



HAL
open science

Influence des impuretes et du desordre dans des systemes magnetiques de basse dimensionnalite

Nicolas Lafflorencie

► **To cite this version:**

Nicolas Lafflorencie. Influence des impuretes et du desordre dans des systemes magnetiques de basse dimensionnalite. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2004. Français. NNT: . tel-00006529

HAL Id: tel-00006529

<https://theses.hal.science/tel-00006529>

Submitted on 20 Jul 2004

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.

UNIVERSITÉ PAUL SABATIER
TOULOUSE III

THÈSE

présentée
pour obtenir

le grade de Docteur en Sciences
Spécialité Physique Théorique

par

NICOLAS LAFLORENCIE

**Influence des impuretés et du désordre dans des
systèmes magnétiques de basse dimensionnalité**

Soutenue le 5 Juillet 2004 devant le jury composé de :

Monsieur Georges Batrouni	Rapporteur
Monsieur Klaus Frahm	Président
Mademoiselle Béatrice Grenier	Invitée
Monsieur Thierry Jolicoeur	Rapporteur
Monsieur Didier Poilblanc	Co-directeur de thèse
Monsieur Heiko Rieger	Examineur
Monsieur Manfred Sigrist	Examineur
Monsieur Erik Sørensen	Invité



A mes parents...

A trop élaguer, tous les troncs se ressemblent...

H. Oudin (XXI^{ème} Siècle)

Remerciements¹

Lorsque j'ai commencé ce travail de thèse il y a trois ans et demi, jamais je n'aurais pu imaginer la densité d'évènements qui m'attendait... De nombreuses personnes ont contribué à rendre ces moments intenses et riches, que ce soit du point de vue professionnel ou personnel, et j'espère trouver ici les mots adéquats pour leur exprimer toute ma sympathie.

Tout d'abord, je tiens à remercier chaleureusement Didier Poilblanc de m'avoir permis de mener à bien ce travail. La façon avec laquelle il m'a accueilli dans son bureau en ce mois de février 2002 m'a redonné la confiance et le courage qui me faisaient défaut depuis plusieurs mois, merci Didier. En un peu plus de deux années d'encadrement, j'ai pu m'enrichir de sa grande expérience des problématiques actuelles, aussi bien théoriques qu'expérimentales, ainsi que des opportunités qu'il m'a offert d'établir de fructueuses collaborations.

C'est avec Erik Sørensen qu'ont débuté mes recherches sur les systèmes de spins. Bien que les circonstances aient écourté notre collaboration, j'ai pu bénéficier de nombreuses discussions qui m'ont servi de base pour la suite. Je le remercie aussi d'avoir fait le voyage depuis Toronto pour assister à ma soutenance.

Klaus Frahm a accepté la direction de cette thèse, je l'en remercie. Sa grande disponibilité et ses coups de mains informatiques furent souvent d'un grand secours.

J'ai été honoré que Thierry Jolicoeur et George Batrouni acceptent d'endosser la tâche de rapporteur et je les en remercie sincèrement.

Bien qu'il ait été difficile de respecter la parité² dans mon jury, Béatrice Grenier a très gentilement apporté son œil expérimental aguerrri, et je l'en remercie.

Je tiens à exprimer ma gratitude envers Heiko Rieger qui, au cours de ma thèse, m'a accueilli au sein de son groupe à Saarbrücken pendant quelques mois. Les travaux initiés alors ont pu être menés à bien et trouvent leur place dans ce manuscrit. J'ai par ailleurs été très heureux qu'Heiko accepte de participer à mon jury.

Ce fut aussi un honneur pour moi de voir Manfred Sigrist dans le jury et je le remercie chaleureusement pour sa présence à Toulouse.

1. En général, la première chose que font les gens lorsqu'ils ouvrent une thèse consiste à lire les remerciements. J'espère donc être à la hauteur des exigences du (je l'espère) nombreux lectorat de cette partie...

2. Théoricien-Expérimentateur

Au cours de ces dernières années, j'ai eu la chance de croiser et d'écouter d'éminents spécialistes ainsi que de discuter avec certains d'entre eux. Je remercie notamment Ian Affleck, Patrik Henelius, Phillipe Lecheminant, Edmond Orignac, Anders Sandvik.

L'ambiance du laboratoire de Physique Théorique de Toulouse a très certainement contribué au bon déroulement de ma thèse. L'équipe des systèmes corrélés, avec Fabien Alet, Sylvain Capponi, Andreas Läuchli, Mathieu Mambrini et Didier Poilblanc a fourni le cadre de travail stimulant et chaleureux que je souhaite à tout doctorant. Les collègues thésards passés, Gaetano, Fabien, Raphaël, David, Alex, et présents, Fabien, Vianney, Guillaume, Benjamin, Julien, ont aussi rendu cette thèse très agréable en me permettant de voir plus loin que le bout de mon écran.

J'en viens maintenant aux remerciements plus personnels. Comment ne pas penser aux copains de la fac avec qui les nombreuses pauses-café-discutes-midups ont rythmé ces années d'une façon parfaitement inoubliable?... Je crois que qu'ils se sont déjà reconnu en lisant ces lignes. Merci les gars pour le réel que vous m'offrez. Je pense aussi à ce-ux-elles qui, de près ou de loin, m'offrent le bonheur et la simplicité de l'amitié, Agnès, Manue, Patricia, Simon, Domidom, Vincent, Loïc, Ben, Guy, Bélinda, Hugo, Céline, Bene, Jesse, Agathe, Olivier, Claire, Zach, Fred, Lololamayo, Jean-Luc, Julien...

Depuis le tout début, Inès m'a donné de l'énergie, du bonheur, sa patience, un ourson, le sourire. Te dire merci est un euphémisme, alors je ne dit rien. L'ourson en question, le jour où il saura lire, découvrira que parfois, grâce à ses réveils matinaux, j'ai pu apprécier la fraîche quiétude du labo quand il fait encore nuit dehors. On remercie beaucoup les gens et trop peu les lieux, alors je remercie les collines de Camareil et les champs de Campolara, ils savent pourquoi.

Pour finir, car il faut bien finir, je ne sais comment dire à mes parents combien je les aime et combien je suis touché par la façon avec laquelle ils m'ont donné goût aux choses, cette thèse est pour eux. Finalement, c'est mon frère que je remercie en dernier car la Physique qui me passionne aujourd'hui ne serait rien pour moi s'il ne m'avait pas montré, il y a quelques années, la beauté de ces choses. Merci Seb.

Table des matières

I	Introduction générale	1
II	Motivations expérimentales	3
1	Désordre dans les chaînes de spins quantiques	4
1.1	Des chaînes de spins $\frac{1}{2}$ dans la nature	4
1.2	Chaînes antiferromagnétiques désordonnées	4
	a) Exemples de composés	4
	b) Observation de la phase des singulets aléatoires	5
1.3	Chaînes de spins avec des couplages aléatoires ferromagnétiques et antiferromagnétiques	6
2	Le composé spin-Peierls CuGeO_3	7
2.1	Propriétés du composé pur	8
	a) Transition de spin-Peierls	8
	b) Structure et couplages	8
	c) Frustration	9
2.2	Influence du dopage sur le composé CuGeO_3	9
	a) Dopage en zinc	9
	b) Coexistence entre la phase spin-Peierls et un ordre antiferromagnétique	10
	c) Diagramme des phases température-dopage	12
3	Influence du dopage sur d'autres composés possédant un gap de spin	13
3.1	Chaînes de Haldane	13
3.2	Mise en ordre des spins effectifs: un comportement générique?	16
III	Principaux modèles étudiés et méthodes utilisées	17
1	Modèles de spins sur réseau	18
1.1	Considérations générales	18
	a) Hamiltonien de spins	18
	b) Fluctuations quantiques en dimensionnalité réduite	19
1.2	La chaîne XXZ de spins $\frac{1}{2}$	21
	a) Solution exacte par Ansatz de Bethe	21
	b) Bosonisation	23
	c) Exemple: calcul des corrections de taille finie à la rigidité de spin	26
1.3	Modèles de chaînes spin-Peierls	31

a)	La chaîne explicitement dimérisée	31
b)	Rôle de la frustration	32
2	Introduction du désordre dans les modèles	35
2.1	Chaînes de spins $\frac{1}{2}$ désordonnées	35
a)	Faible désordre : Approche par la bosonisation	35
b)	Fort désordre : Renormalisation dans l'espace réel	39
2.2	Impuretés dans des systèmes de chaînes spin-Peierls	42
a)	Effet d'une impureté non magnétique dans une chaîne di- mérisée isolée	42
b)	Prise en compte des effets bidimensionnels	45
3	Méthodes numériques	47
3.1	Introduction	47
3.2	Diagonalisation exacte	48
a)	Méthode de Lanczos	48
b)	Application aux systèmes magnétiques frustrés	49
3.3	Monte Carlo quantique	51
a)	Principes de la technique SSE	52
b)	Application aux chaînes de spins $\frac{1}{2}$	58
IV	Crossover et localisation dans les chaînes de spins $\frac{1}{2}$ désordonnées	61
1	Phénomènes de crossover pour les fonctions de corrélation	62
1.1	L'universalité des corrélations de spin en question	62
a)	Confirmations de l'universalité	62
b)	Non universalité selon une étude en DMRG	62
c)	Commentaires	63
1.2	Étude par diagonalisations exactes des corrélations transverses dans la chaîne XX désordonnée	64
a)	Approche par les fermions libres	64
b)	Résultats numériques	64
c)	Analyse du crossover	66
1.3	Étude au point isotrope XXX par Monte Carlo quantique SSE	68
a)	Contrôle des fluctuations liées au désordre et convergence dans le fondamental	68
b)	Étude de la fonction de corrélation longitudinale au point isotrope	70
c)	Loi d'échelle et longueur de crossover	73
2	Transport de spin : localisation à une dimension	75
2.1	Étude de la rigidité de spin de la chaîne XX désordonnée	76
a)	Investigations numériques par diagonalisations exactes	76
b)	Résultats	79
2.2	Transition de localisation	80
a)	Crossover entre le régime métallique pur et la phase loca- lisée de singulets aléatoires	80
b)	Longueur de localisation	81
3	Conclusion	83

V Impuretés non magnétiques dans des chaînes de spins $\frac{1}{2}$ frustrées faiblement couplées	85
1 Introduction	86
2 Prise en compte des effets bidimensionnels	86
2.1 Chaînes faiblement couplées	86
a) Champ moyen auto-cohérent	87
b) Convergence du champ moyen	88
c) Diagramme des phases	90
2.2 Echange à 4 spins	91
a) Rappels sur l'échange cyclique	91
b) Traitement en champ moyen : équivalence avec un modèle spin-phonon	92
c) Diagramme des phases	94
d) Dégénérescence de l'état fondamental	95
3 Effets des impuretés non magnétiques	96
3.1 Le cas d'une seule impureté	97
a) Formation de moments locaux	97
b) Longueur de confinement du soliton	98
3.2 Le cas de deux impuretés non magnétiques	100
a) Couplage effectif entre solitons	100
b) Vers un modèle effectif	101
4 Conclusion partielle	104
VI Modèle effectif désordonné de chaînes spin-Peierls couplées dopées	107
1 Introduction	108
2 Mise en ordre induite par le dopage	109
2.1 Présentation du modèle effectif bidimensionnel	109
2.2 Étude de la mise en ordre antiferromagnétique par Monte Carlo quantique	110
a) Convergence dans le fondamental	110
b) Mise en ordre bidimensionnelle à $T = 0$	111
c) Température de Néel	112
2.3 Susceptibilité de Curie	114
a) L'exemple de l'échelle à deux montants dopée	114
b) Constante de Curie du système de chaînes spin-Peierls dopées	116
c) Températures intermédiaires : discussion	117
3 Étude du régime basse température par renormalisation dans l'espace réel	118
3.1 Procédure de décimation des couplages	118
a) Équations de renormalisation	119
b) Approche numérique	120
3.2 Formation de grands spins effectifs et susceptibilité de Curie	121
a) Formation des moments effectifs	121
b) Étude de la constante de Curie	124
3.3 Discussion concernant la validité de l'approche perturbative	125

Table des matières

a) Arguments qualitatifs	125
b) Comparaison directe avec le Monte Carlo quantique	126
3.4 Régime critique	127
a) Régime critique du modèle unidimensionnel	127
b) Détermination des exposants	128
4 Conclusion	133
Conclusion générale et perspectives	135
Bibliographie	137
Publications	146

Chapitre I

Introduction générale

Les systèmes magnétiques ont servi de base pour élaborer et construire des modèles en physique du solide ainsi que pour comprendre et analyser les mises en ordre et les transitions de phases associées [1, 2]. Le magnétisme quantique est aujourd'hui un problème riche de la physique du solide moderne, tant du point de vue théorique qu'expérimental. En effet, de plus en plus de composés, tels que les oxydes de cuivre, possèdent, à l'état pur, des caractéristiques magnétiques très intéressantes: frustration magnétique, transition spin-Peierls, couplages spin-phonon, plateaux d'aimantation... La stoechiométrie étant de mieux en mieux contrôlée, le dopage de tels composés magnétiques avec des impuretés est possible, permettant ainsi une investigation des effets liés aux impuretés et au désordre dans les systèmes de spins quantiques de basse dimensionnalité. Dans ces systèmes fortement corrélés, la compétition entre les fluctuations quantiques et le désordre peut donner lieu à une nouvelle physique, non triviale. L'exemple d'école est l'apparition d'un ordre antiferromagnétique à basse température induit par les impuretés, observée sur le composé spin-Peierls CuGeO_3 [3, 4, 5].

Du point de vue théorique, de nombreuses voies existent pour appréhender le comportement des systèmes de spins quantiques. Par exemple, des traitements analytiques de certains problèmes unidimensionnels comme la chaîne de spins $\frac{1}{2}$ antiferromagnétique par l'Ansatz de Bethe ou par la technique perturbative de bosonisation donnent accès aux propriétés de basse énergie de ce système. Lorsque du désordre est introduit dans la chaîne de spins $\frac{1}{2}$, Fisher [6] a démontré que la phase pure était immédiatement déstabilisée, quelle que soit l'intensité de ce désordre. Néanmoins, les outils analytiques disponibles sont limités, surtout lorsque les effets liés au désordre sont pris en compte au niveau microscopique. En effet, l'introduction d'une impureté dans un matériau magnétique quasi-unidimensionnel peut avoir diverses conséquences: changement d'espèce magnétique, modification locale de la constante d'échange intrachaîne ou interchaîne, introduction d'une lacune non magnétique. Par conséquent, la prise en compte des impuretés nécessite de construire des modèles microscopiques particuliers dont le traitement théorique requiert le plus souvent une approche numérique.

Afin d'appréhender correctement la spécificité des effets liés aux impuretés et au désordre dans certains systèmes magnétiques de basse dimensionnalité, comme les

chaînes antiferromagnétiques désordonnées de taille finie ou les chaînes spin-Peierls dopées, l'utilisation des techniques numériques a été au cœur de ce travail de thèse.

Les motivations expérimentales qui sous-tendent les travaux théoriques présentés ici constituent l'objet du chapitre II, dans lequel plusieurs matériaux sont présentés, avec notamment un traitement particulier réservé au composé CuGeO_3 . Les principaux modèles théoriques utilisés au cours de ce travail sont décrits dans le chapitre III, une large partie étant notamment consacrée aux modèles unidimensionnels. Au cours de ce même chapitre III, les méthodes numériques employées dans cette thèse sont passées en revue.

Les résultats originaux obtenus au cours de ce travail sont présentés dans les chapitres IV, V et VI. Les effets de taille finie (déjà abordés dans la section 1.2 c) du chapitre III) rencontrés dans les chaînes de spins désordonnées, constituent le sujet du chapitre IV dans lequel un phénomène de crossover est mis en évidence et interprété à travers une analogie avec les problèmes de localisation à une dimension. Les chapitres V et VI sont dédiés à l'étude du rôle joué par les impuretés dans un système quasi-unidimensionnel de chaînes frustrées de spins $\frac{1}{2}$. Un modèle microscopique de chaînes spin-Peierls couplées est d'abord étudié numériquement sur des réseaux de taille finie dans le chapitre V ; l'accent étant mis en particulier sur l'effet provoqué par l'introduction d'une ou de plusieurs impuretés non magnétique dans de tels systèmes. Un modèle effectif de basse énergie, décrivant l'interaction entre les impuretés sous le gap de spin, peut ensuite être construit ; son étude par Monte Carlo quantique sur de très grands réseaux, présentée lors du chapitre VI, permet d'appréhender les problématiques liées à la mise en ordre antiferromagnétique induite par le dopage dans les systèmes spin-Peierls. La suite de ce chapitre VI est dédiée à l'étude du comportement inattendu observé sur la susceptibilité magnétique à basse température. Interprété à travers la formation de grands spins effectifs à basse énergie à l'aide d'une méthode de décimation des couplages dans l'espace réel, le comportement critique du système quasi-unidimensionnel est aussi comparé aux classes d'universalités connues dans les systèmes magnétiques soumis au désordre.

Chapitre II

Motivations expérimentales

Sommaire de ce chapitre

1 Désordre dans les chaînes de spins quantiques	4
1.1 Des chaînes de spins $\frac{1}{2}$ dans la nature	4
1.2 Chaînes antiferromagnétiques désordonnées	4
a) Exemples de composés	4
b) Observation de la phase des singulets aléatoires	5
1.3 Chaînes de spins avec des couplages aléatoires ferromagnétiques et antiferromagnétiques	6
2 Le composé spin-Peierls CuGeO_3	7
2.1 Propriétés du composé pur	8
a) Transition de spin-Peierls	8
b) Structure et couplages	8
c) Frustration	9
2.2 Influence du dopage sur le composé CuGeO_3	9
a) Dopage en zinc	9
b) Coexistence entre la phase spin-Peierls et un ordre antiferromagnétique	10
c) Diagramme des phases température-dopage	12
3 Influence du dopage sur d'autres composés possédant un gap de spin	13
3.1 Chaînes de Haldane	13
3.2 Mise en ordre des spins effectifs : un comportement générique?	16

1 Désordre dans les chaînes de spins quantiques

1.1 Des chaînes de spins $\frac{1}{2}$ dans la nature

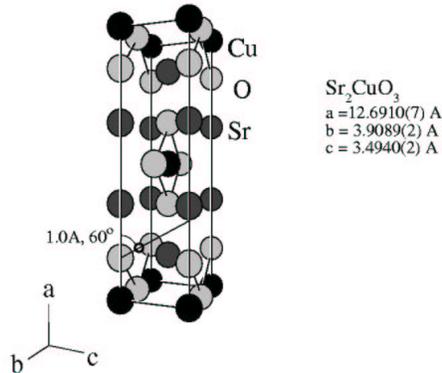


FIG. II.1 – Structure du composé Sr_2CuO_3 , les chaînes de spins $\frac{1}{2}$ sont dans la direction b .

Nous ne pouvons commencer cette partie sur les motivations expérimentales sans mentionner l'existence de composés magnétiques de spins $\frac{1}{2}$ présentant de véritables caractéristiques unidimensionnelles. Le plus célèbre est sans aucun doute le composé Sr_2CuO_3 , fortement anisotrope dans la direction b (voir la figure II.1), présentant une interaction de super-échange antiferromagnétique $J \simeq 2000K$ entre les ions Cu^{2+} , chacun portant un spin $S = \frac{1}{2}$.

Toutefois un couplage transverse entre les chaînes est présent, mais sa valeur extrêmement faible ($J_{\perp}/J \sim 10^{-5}$) entraîne que la susceptibilité, représentée sur la figure II.2, exhibe un comportement unidimensionnel parfaitement décrit par la loi de Eggert, Affleck et Takahashi [9] jusqu'à des températures très basses. Au delà, une mise en ordre antiferromagnétique tridimensionnelle intervient.

De nombreux composés possèdent aussi ce caractère anisotrope et en donner une liste exhaustive ici serait illusoire. Nous renvoyons par conséquent le lecteur intéressé aux revues récentes sur le sujet [10, 11].

1.2 Chaînes antiferromagnétiques désordonnées

Les problèmes de magnétisme soumis au désordre sont explorés depuis maintenant plusieurs décennies [12, 13]. De nombreux exemples de chaînes de spins ayant des couplages désordonnés ont vu le jour depuis les travaux de Bulaevskii *et al.* [14]. Dans la suite, nous donnons un bref aperçu des propriétés remarquables observées dans de tels matériaux à travers quelques exemples choisis parmi les plus caractéristiques.

a) Exemples de composés

Des mesures de susceptibilité magnétique, effectuées sur la famille de composés $\text{Mg}_{1-x}\text{Ti}_{1+x}\text{OBO}_3$ [15], ont révélé une très forte divergence à basse température :

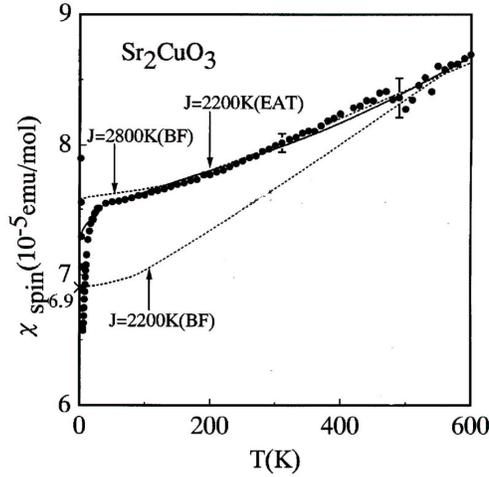


FIG. II.2 – Susceptibilité magnétique mesurée sur le composé Sr_2CuO_3 (•) par Motoyama et al. [7], et comparée à la loi de Bonner-Fisher (BF) [8] et aux calculs analytiques de Eggert et al. (EAT) [9] par la bosonisation. A très basse température, la chute de χ signale une mise en ordre antiferromagnétique tridimensionnelle. Figure extraite de la référence [7].

$\chi(T) \sim T^{-\alpha}$ avec $\alpha \simeq 0,83$, indépendant de x . Un tel comportement a été interprété comme une signature de la présence d'échanges antiferromagnétiques aléatoires entre les spins $\frac{1}{2}$ portés par les ions Ti^{3+} . Des observations similaires ont été effectuées sur le composé $(TCNQ)_2$ avec un exposant $\alpha \sim 0,8$ [16].

Plus récemment, le composé unidimensionnel $CuCl_{2x}Br_{2(1-x)}(\gamma-pic)_2$ [17], réalisation expérimentale d'une chaîne de Heisenberg avec des échanges antiferromagnétiques alternés désordonnés, a révélé un comportement caractéristique d'une phase de Griffiths quantique [12, 13], confirmé par des études théoriques [18, 19].

D'autres exemples, avec des spins plus grands, existent. Citons la réalisation expérimentale d'une chaîne de Haldane ($S = 1$) avec couplages aléatoires [20] ainsi que le composé $(CD_3)_4NMn_xCu_{1-x}Cl$ [21] qui, du fait de la présence de grands spins ($S = 5/2$ pour Mn), est plutôt une réalisation de la chaîne de spins classiques [22].

b) Observation de la phase des singulets aléatoires

Au cours de la dernière décennie, de très nombreux travaux théoriques ont été développés (voir la section 2.1 du chapitre III), améliorant ainsi grandement la compréhension des effets provoqués par la fluctuation aléatoire des constantes d'échanges dans les chaînes antiferromagnétiques. Ainsi, pour le cas $S = \frac{1}{2}$, des théories très robustes prévoient l'apparition d'une nouvelle phase, totalement désordonnée, dite de *singulets aléatoires* [23, 6], lorsque les constantes d'échanges antiferromagnétiques sont aléatoires. Du point de vue macroscopique, cette phase, que nous serons amenés à rencontrer plusieurs fois au cours de ce travail, est notamment caractérisée par une divergence très particulière de la susceptibilité uniforme à basse tempéra-

ture :

$$\chi(T) \sim \frac{1}{T(\ln \frac{\Omega_0}{T})^2}, \quad (\text{II.1})$$

Ω_0 étant une échelle d'énergie caractéristique, de l'ordre de la constante d'échange antiferromagnétique moyenne.

Très récemment, le composé $\text{BaCu}_2(\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5})_2\text{O}_7$ a fait l'objet d'une étude expérimentale [24] dans laquelle la susceptibilité uniforme, représentée sur la figure II.3, a pu être interprétée comme caractéristique de la phase des singulets aléatoires¹, le dopage avec des atomes de germanium, distribués aléatoirement, modifiant les

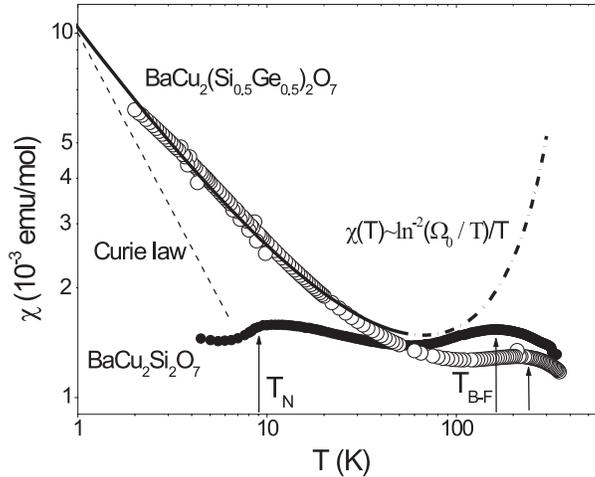


FIG. II.3 – Susceptibilité magnétique mesurée par Masuda *et al.* [24] sur le composé $\text{BaCu}_2(\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5})_2\text{O}_7$ (○), et comparée au composé pur $\text{BaCu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ (●). La droite hachurée représente le comportement de spins libres en loi de Curie et les courbes noires (pleine et hachurée) sont des fits utilisant la loi (II.1). Les températures de mise en ordre du composé pur et des maxima de Bonner-Fisher sont indiquées par T_N et $T_{\text{B-F}}$. Figure extraite de la référence [24].

constantes d'échanges antiferromagnétiques. Des mesures du facteur de structure dynamique [24] ont aussi confirmé les prédictions associées à la phase des singulets aléatoires [25].

1.3 Chaînes de spins avec des couplages aléatoires ferromagnétiques et antiferromagnétiques

La chaîne de spins $\frac{1}{2}$ $\text{Sr}_3\text{CuPt}_{1-p}\text{Ir}_p\text{O}_6$, dont les composés parents $\text{Sr}_3\text{CuPtO}_6$ et $\text{Sr}_3\text{CuIrO}_6$ sont respectivement des chaînes antiferromagnétiques et ferromagnétiques, est une réalisation d'une chaîne quantique présentant des couplages aléatoirement ferromagnétiques et antiferromagnétiques [26]. Pour $p = 0$ ($p = 1$), le comportement de la susceptibilité d'une chaîne antiferromagnétique (ferromagnétique),

1. Ceci suggère éventuellement de re-considérer les divergences observées sur les composés cités dans la partie 1.2 a) à la lumière de l'analyse menée ici par Masuda *et al.* [24].

schématisé sur la figure II.4, a bien été observé (figure II.5). Lorsque $0 < p < 1$, les prédictions théoriques de Furusaki *et al.* [27, 28] ont été vérifiées expérimentalement [26], avec une divergence de χ à basse température en loi de Curie, la constante de Curie c dépendant de la proportion p de liens ferromagnétiques :

$$c(p) \propto \frac{p}{1-p}. \quad (\text{II.2})$$

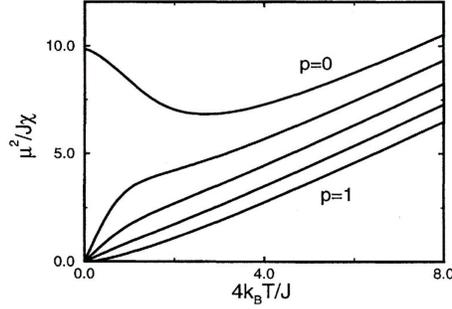


FIG. II.4 – Représentation schématique de la susceptibilité inverse théorique d'une chaîne de spins $\frac{1}{2}$ désordonnée avec une concentration p ($1-p$) de liens ferromagnétiques (antiferromagnétiques). De haut en bas, $p = 0, 1/4, 1/2, 3/4, 1$. Figure extraite de la référence [28].

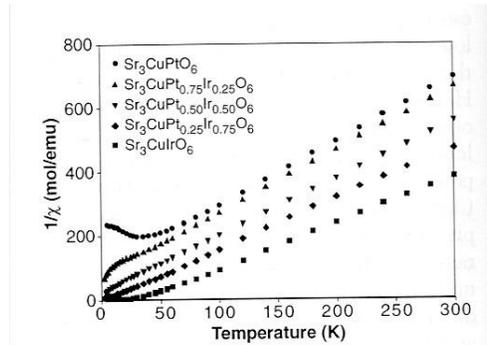


FIG. II.5 – Susceptibilité inverse mesurée sur le composé $\text{Sr}_3\text{CuPt}_{1-p}\text{Ir}_p\text{O}_6$ avec, de haut en bas, $p = 0, 1/4, 1/2, 3/4, 1$. Figure extraite de la référence [26].

2 Le composé spin-Peierls CuGeO_3

Depuis sa découverte en 1993 par Hase *et al.* [3], le composé CuGeO_3 , premier matériau inorganique présentant une transition de spin-Peierls [29], a très rapidement occupé un rôle central dans les problématiques de magnétisme quantique à

basse dimension. En effet, grâce à la synthèse possible de gros monocristaux dont le dopage peut être bien contrôlé, de très nombreuses expériences lui ont été consacrées.

Dans la suite, nous présentons brièvement² certains éléments relatifs à CuGeO_3 en nous concentrant surtout sur les effets spectaculaires liés au dopage de ce système par des impuretés statiques.

2.1 Propriétés du composé pur

a) Transition de spin-Peierls

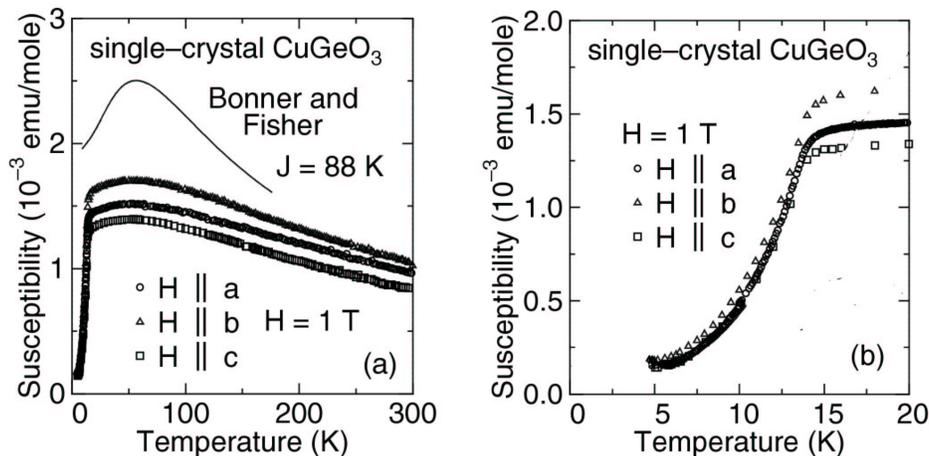


FIG. II.6 – Susceptibilité magnétique mesurée par Hase *et al.* [3] sous $H = 1 \text{ T}$. (a) Comparaison avec la courbe de Bonner-Fisher [8] pour $J = 88 \text{ K}$. (b) Chute brutale de χ autour de $T_{\text{SP}} \simeq 14,2 \text{ K}$. Figure extraite de la référence [3].

Par des mesures de susceptibilité magnétique, Hase *et al.* ont mis en évidence une transition de spin-Peierls à $T_{\text{SP}} \simeq 14,2 \text{ K}$ sur des monocristaux de CuGeO_3 [3]. En effet, on peut observer sur la figure II.6 que quelle que soit la direction du champ appliqué, une chute brutale de χ intervient à basse température, suggérant ainsi l'apparition d'un fondamental singulet non magnétique, séparé de la première excitation de spin par un gap fini. Des mesures de diffraction et de diffusion de rayons X ont ensuite permis de mettre en évidence précisément une dimérisation du réseau associée à la transition [31, 32].

b) Structure et couplages

La structure cristallographique de CuGeO_3 est représentée sur la figure II.7(a). Plus schématiquement, la figure II.7(b) révèle une structure de plans faiblement couplés dans la direction a , chaque ion cuivre Cu^{2+} portant un spin $\frac{1}{2}$. Dans la direction c , ces derniers interagissent de façon antiferromagnétique, par un mécanisme de super-échange faisant intervenir le germanium : $J_c \simeq 135 \text{ K}$ [33]. En étudiant la dispersion des excitations par diffusion inélastique de neutrons, Nishi *et*

2. Nous renvoyons le lecteur intéressé à la très bonne revue de K. Uchinokura [30].

al. [34] et Regnault *et al.* [35] estiment les couplages interchaînes à $J_b/J_c \simeq 0,1$ et $J_a/J_c \simeq -0,01$. On remarque que le caractère unidimensionnel de CuGeO_3 n'est pas parfait, l'interaction antiferromagnétique interchaîne dans la direction b étant relativement importante.

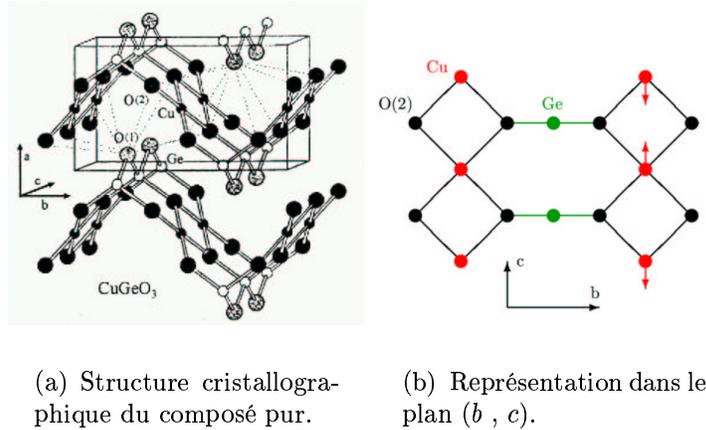


FIG. II.7 – Composé CuGeO_3 pur. Dans la direction c , les atomes de cuivre sont couplés par des super-échanges antiferromagnétiques et forment des chaînes de spins $\frac{1}{2}$ faiblement couplées dans la direction b .

c) Frustration

La présence d'un couplage antiferromagnétique aux seconds voisins dans la direction des chaînes, d'abord suggérée par Lorenzo *et al.* [36], semble aujourd'hui bien acceptée. En effet, le désaccord avec la courbe de Bonner-Fisher (figure II.6) indique qu'un modèle purement unidimensionnel n'est vraisemblablement pas suffisant.

Castilla *et al.* [39] et Riera *et al.* [38] ont montré la pertinence d'un couplage J_2 frustrant entre spins $\frac{1}{2}$ seconds voisins, estimant respectivement $\alpha = 0,24$ et $\alpha = 0,36$ pour le rapport J_2/J_c . Sur la figure II.8, les résultats numériques obtenus par Riera *et al.* pour la susceptibilité d'une chaîne de spins $\frac{1}{2}$ incluant un terme J_2 montrent un très bon accord avec les données expérimentales [3, 37].

2.2 Influence du dopage sur le composé CuGeO_3

a) Dopage en zinc

Tout juste après la découverte de la transition spin-Peierls dans CuGeO_3 pur, l'effet provoqué par le dopage avec des ions Zn^{2+} (non magnétique $S = 0$) remplaçant les ions magnétiques Cu^{2+} ($S = \frac{1}{2}$) a été étudié par Hase *et al.* [40]. On voit sur la figure II.9 que la température de transition spin-Peierls de $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{GeO}_3$ décroît rapidement à mesure que x augmente. En dessous de T_{SP} , la susceptibilité diverge pour ensuite saturer à très basse température.

Cette nouvelle phase à basse température, d'abord interprétée à tort comme une phase verre de spins [40] s'est révélée être en fait une phase antiferromagnétique [4].

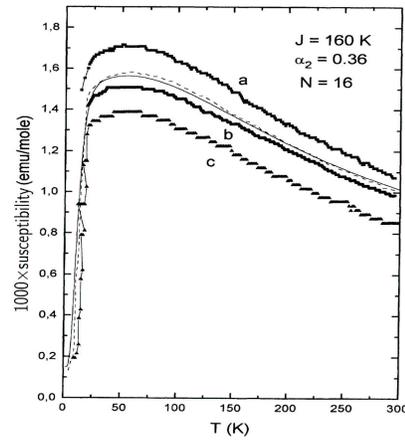


FIG. II.8 – Comparaison entre les mesures de susceptibilité effectués sur CuGeO_3 par Hase *et al.* [3] (courbes larges), Hori *et al.* [37] (courbe pointillée) et des calculs par diagonalisation exacte d'une chaîne antiferromagnétique frustrée de spins $\frac{1}{2}$ de taille $N = 16$ avec $J_c = 160$ K et $\alpha = J_2/J_c = 0,36$ (courbe pleine). Figure extraite de la référence [38].

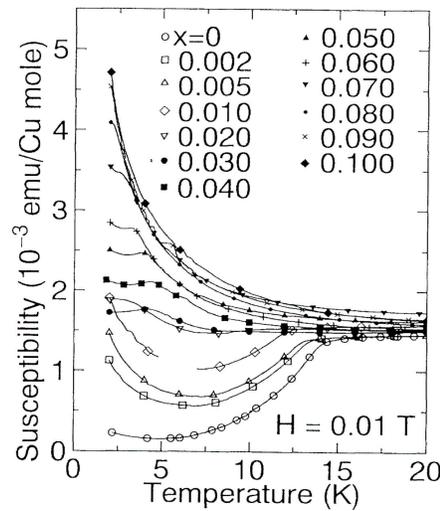


FIG. II.9 – Susceptibilité magnétique de $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{GeO}_3$ mesurée par Hase *et al.* [40] pour des températures inférieures à 20 K pour 13 concentrations x différentes, de $x = 0$ (courbe du bas) à $x = 0,1$ (en haut). Figure extraite de la référence [40].

b) Coexistence entre la phase spin-Peierls et un ordre antiferromagnétique

I. MISE EN ÉVIDENCE PAR DIFFUSION ÉLASTIQUE DE NEUTRONS

Par la suite, Regnault *et al.* [5] ont clairement mis en évidence par des expériences de diffusion élastique de neutrons sur le composé dopé au silicium $\text{CuGe}_{0,993}\text{Si}_{0,007}\text{O}_3$

la coexistence à basse température entre la phase spin-Peierls et un ordre antiferromagnétique. Cette même coexistence de phase a aussi été observée pour le composé dopé au zinc [41, 42], jusqu'à des concentrations $x = 0,0042$ par Martin *et al.* [42]. Sur la figure II.10, on identifie clairement les deux transitions observés sur $\text{Cu}_{0,968}\text{Zn}_{0,032}\text{GeO}_3$: pour $T < T_{\text{SP}} = 10,3$ K, la phase spin-Peierls apparaît et lorsque $T < T_{\text{N}} = 4,2$ K, une instabilité antiferromagnétique est observée, coexistant avec la dimérisation.

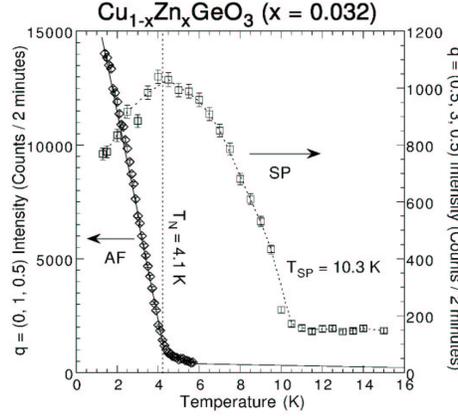


FIG. II.10 – Intensité des pics de diffusion élastique de neutrons aux vecteurs $(1/2, 3, 1/2)$ pour la phase spin-Peierls et $(0, 1, 1/2)$ pour la phase antiferromagnétique mesurées sur $\text{Cu}_{0,968}\text{Zn}_{0,032}\text{GeO}_3$. Figure extraite de la référence [42].

II. TEMPÉRATURE DE NÉEL

La transition vers la phase antiferromagnétique ordonnée, induite par les impuretés, s'effectue à une température de Néel T_{N} qui dépend de la concentration x . L'évolution de $T_{\text{N}}(x)$, mesurée sur $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{GeO}_3$ pour des concentrations $0,00112 \leq x \leq 0,0049$ par Manabe *et al.* [43] est représentée sur la figure II.11.

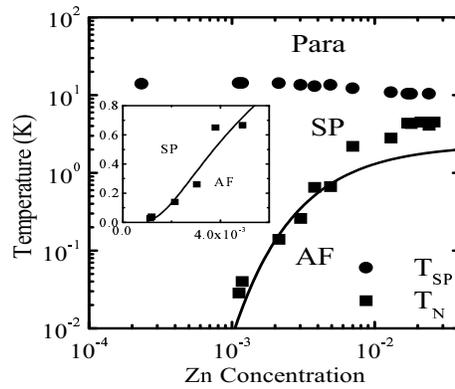


FIG. II.11 – T_{N} et T_{SP} en fonction de la concentration en Zn. La courbe est un fit exponentiel (II.3). Figure extraite de la référence [43].

Etudié pour de grandes dilutions, le comportement de la température de Néel suggère fortement l'absence de concentration critique nécessaire à la mise en ordre antiferromagnétique. Un fit de la forme

$$T_N(x) = A \exp\left(-\frac{B}{x}\right) \quad (\text{II.3})$$

a d'ailleurs été proposé avec les paramètres $A = 2,3$ K et $B = 5,7 \times 10^{-3}$ [43].

De la même façon, pour le composé $\text{CuGe}_{1-y}\text{Si}_y\text{O}_3$ étudié jusqu'à des concentrations $y = 0,002$, Grenier *et al.* [44] ne concluent pas non plus à l'existence d'un seuil de dopage critique à dépasser pour que la mise en ordre ait lieu.

c) Diagramme des phases température-dopage

I. COMPOSÉ DOPÉ AU MAGNÉSIIUM

Pour $\text{Cu}_{1-x}\text{Mg}_x\text{GeO}_3$, Masuda *et al.* [45, 46] ont établi le diagramme des phases température-dopage suivant (figure II.12). On voit que la phase dimérisée (SP) est rapidement détruite par le dopage. L'apparition à basse température d'un ordre antiferromagnétique, induit par le dopage est aussi relevée, mais la région de coexistence (D-AF) est bornée par une concentration critique $x_c \simeq 0,25$ au delà de laquelle la dimérisation disparaît, laissant place à un antiferromagnétisme uniforme (U-AF), plus conventionnel³. Mentionnons aussi qu'une discontinuité de la température de Néel est observée à x_c , suggérant ainsi une transition du premier ordre entre les deux phases.

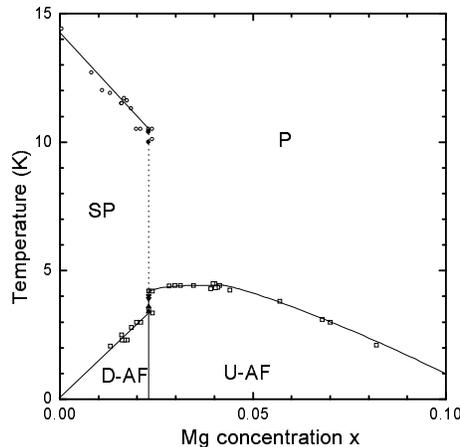


FIG. II.12 – Diagramme des phases température-dopage obtenu par Masuda *et al.* [45] par étude de la susceptibilité magnétique de $\text{Cu}_{1-x}\text{Mg}_x\text{GeO}_3$. Figure extraite de la référence [45].

3. La réapparition d'une dimérisation sous forte pression a été récemment observée dans la phase U-AF de $\text{Cu}_{1-x}\text{Mg}_x\text{GeO}_3$ [46, 47, 48] ; un tel phénomène peut s'expliquer par le fait que la pression renforce la frustration dans les chaînes.

II. DIAGRAMME « UNIVERSEL »

Il a pu être établi que le comportement de CuGeO_3 dopé ne dépendait essentiellement pas du type d'impureté⁴. En effet, Grenier *et al.* [50] ont, par des mesures de susceptibilité, construit le diagramme des phases « universel » suivant (figure II.13) pour $\text{Cu}_{1-x}\text{M}_x\text{GeO}_3$ avec $M = \text{Zn}, \text{Mg}, \text{Ni}$, ainsi que pour $\text{CuGe}_{1-y}\text{Si}_y\text{O}_3$. La particularité essentielle observée entre les différents types de dopages réside dans la loi d'échelle $y = 3x$. En effet la proportion de spins $\frac{1}{2}$ libérés par les impuretés et contribuant à la loi de Curie se révèle être trois fois plus grande dans le cas du dopage hors chaîne par le silicium que dans le cas d'un dopage dans la chaîne par $M = \text{Zn}, \text{Mg}$ ou Ni . Encore aujourd'hui, ce phénomène demeure mal compris.

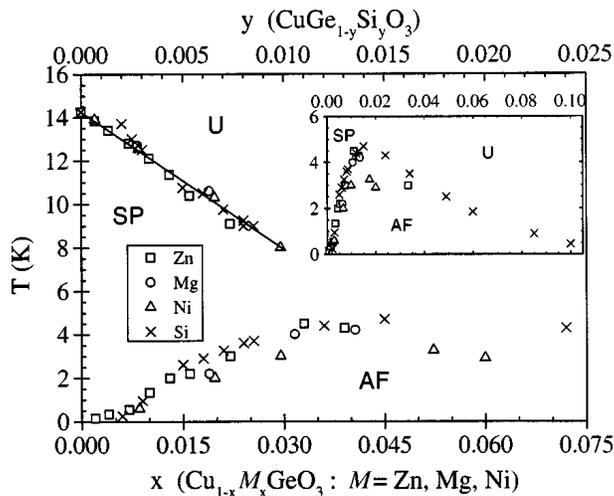


FIG. II.13 – Diagramme des phases « universel » température-dopage ($y = 3x$) obtenu par Grenier *et al.* [50] à l'aide de mesures de susceptibilité magnétique effectuées sur les composés $\text{Cu}_{1-x}\text{M}_x\text{GeO}_3$ avec $M = \text{Zn}, \text{Mg}, \text{Ni}$ et $\text{CuGe}_{1-y}\text{Si}_y\text{O}_3$. La vignette est un zoom sur la région des basses températures. Figure extraite de la référence [50].

3 Influence du dopage sur d'autres composés possédant un gap de spin

3.1 Chaînes de Haldane

Dans une chaîne de spins 1, l'introduction d'une impureté non magnétique produit des excitations de spin $\frac{1}{2}$ localisées au voisinage de la lacune [51, 52]. Plusieurs expériences ont effectivement observé ce phénomène. Sur le composé NENP, ces

4. Notons toutefois que la mise en ordre antiferromagnétique observée à faible concentration s'établit selon l'axe préférentiel a dans le cas du dopage au Ni alors que dans tous les autres cas c'est selon l'axe c [49].

excitations de bords ont été mises en évidence par des mesures de résonance paramagnétique électronique [53] ainsi que par résonance magnétique nucléaire sur Y_2BaNiO_5 dopé au Mg [54, 55] ou au Zn [56, 57]. Il est aussi très intéressant de noter que des mesures de susceptibilité sur le composé $\text{Y}_2\text{BaNi}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_5$ trouvent une divergence $\sim T^{-\alpha}$ avec $\alpha \sim 0,8$ [58] révélant ainsi l'existence d'un fondamental vraisemblablement contrôlé par le désordre⁵. Toutefois, à l'inverse de CuGeO_3 , aucune signature d'une mise en ordre antiferromagnétique des moments effectifs à basse température n'a été observée pour Y_2BaNiO_5 , ceci résultant très certainement de son caractère fortement anisotrope ($|J_{\perp}/J| < 5 \times 10^{-4}$).

En revanche, une mise en ordre de ces spins effectifs à faible dopage a été observée dans le composé $\text{PbNi}_2\text{V}_2\text{O}_8$ dopé au Mg [59]. Ce dernier présente un couplage interchaîne non négligeable $J_{\perp} \simeq J/100$ le rendant ainsi plus proche du point critique $J_{\perp}^c \simeq 0,04$ de mise en ordre antiferromagnétique des chaînes de Haldane [60]. La figure II.14 rapporte les résultats des mesures de susceptibilité effectués sur $\text{Pb}(\text{Ni}_{1-x}\text{Mg}_x)_2\text{V}_2\text{O}_8$ par Uchiyama *et al.* [59]. On y observe clairement une divergence de χ à basse température pour tous les échantillons dopés, signature de spins effectifs libérés par les impuretés, suivie d'une transition magnétique au dessous de $T_c \simeq 3,5$ K pour $x \geq 0,020$. L'anisotropie observée en vignette de la figure II.14 est caractéristique d'une mise en ordre antiferromagnétique avec l'axe facile selon la direction c .

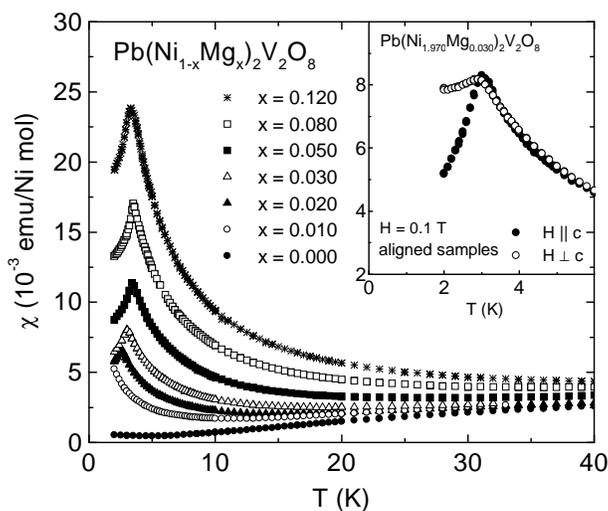


FIG. II.14 – Comportement à basse température de la susceptibilité magnétique mesurée sur $\text{Pb}(\text{Ni}_{1-x}\text{Mg}_x)_2\text{V}_2\text{O}_8$ par Uchiyama *et al.* [59]. Figure extraite de la référence [59].

Très récemment, par des mesures de susceptibilité et de chaleur spécifique effectuées sur $\text{Pb}(\text{Ni}_{1-x}\text{M}_x)_2\text{V}_2\text{O}_8$, Imai *et al.* [61] ont présenté des résultats fort intéressants pour quatre types d'impuretés : $M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Cu}, \text{Mg}$. Le diagramme des

⁵. En effet à basse énergie, un modèle effectif minimal se ramène à des spins $\frac{1}{2}$ effectifs en interaction, aléatoirement distribués dans la chaîne (F. Alet, communication privée).

phases qu'ils proposent est qualitativement similaire à celui de CuGeO_3 dopé, avec notamment une dépendance de la température de Néel en fonction du dopage (voir la figure II.15(b)) suggérant aussi l'absence de concentration critique. Cependant, le caractère universel observé pour le composé spin-Peierls ne semble pas d'actualité ici car, comme on peut le voir sur la figure II.15, quantitativement le comportement de $T_N(x)$ dépend fortement du type de dopant⁶.

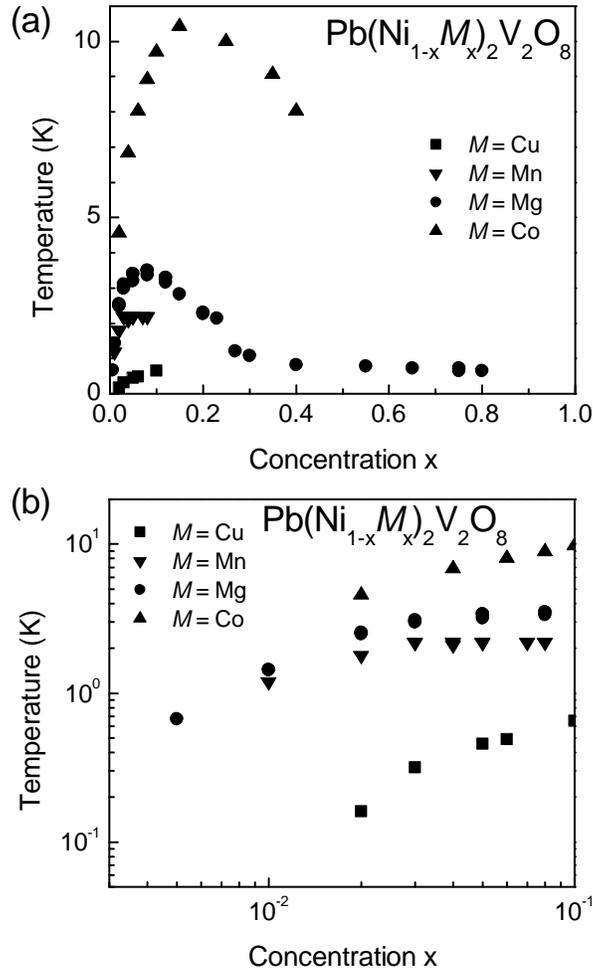


FIG. II.15 – Diagramme des phases température-concentration de $\text{Pb}(\text{Ni}_{1-x}\text{M}_x)_2\text{V}_2\text{O}_8$, établi par Imai et al. [61] pour $M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Cu}, \text{Mg}$. La variation de la température de Néel est représentée pour $0 \leq x \leq 1$ en (a) et un zoom sur la région de basses concentrations est montré en (b) sur une échelle log-log. Figure extraite de la référence [61].

6. A ce sujet, nous renvoyons à la discussion [61].

3.2 Mise en ordre des spins effectifs : un comportement générique ?

Comme il a été suggéré par plusieurs auteurs [59, 30], la mise en ordre induite par le dopage semble être un phénomène générique pour les composés possédant un gap de spin. En effet, à la liste constituée par CuGeO_3 et $\text{PbNi}_2\text{V}_2\text{O}_8$ se rajoutent au moins deux composés : SrCu_2O_3 , échelle de spins $\frac{1}{2}$ à deux montants, et TlCuCl_3 , système de dimères couplés.

Par des mesures de susceptibilité et de chaleur spécifique dans $\text{Sr}(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)_2\text{O}_3$ ($0,02 \leq x \leq 0,08$), Azuma *et al.* [62] ont mis en évidence à basse température la formation de moments effectifs s'ordonnant de façon antiferromagnétique, accompagnée d'une suppression du gap de spin par le dopage. Ces moments locaux ont aussi été observés par résonance magnétique nucléaire dans le composé dopé au Zn ou au Ni [63, 64].

Le composé TlCuCl_3 , système de dimère couplés⁷, présente une mise en ordre antiferromagnétique induite par le dopage avec du Mg [67]. De plus, Oosawa *et al.* [68] ont observé une coexistence entre l'ordre antiferromagnétique et le gap de spin pour $\text{TlCu}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Cl}_3$ avec $x = 0,03$.

Il semble toutefois que la mise en ordre antiferromagnétique des moments effectifs induits par les impuretés soit subordonnée à la présence de couplages tridimensionnels conséquents. En effet, l'absence de mise en ordre observée dans Y_2BaNiO_5 dopé ou encore dans le composé à échelle de spins $\frac{1}{2}$ à deux montants dopé au Zn $(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$ [69], est dans les deux cas liée à de trop faibles couplages interchaîne ou inter-échelle.

7. Notons que ce composé présente une transition vers un ordre magnétique alterné induit par le champ magnétique, décrite en terme de condensation de Bose-Einstein de magnons [65, 66].

Chapitre III

Principaux modèles étudiés et méthodes utilisées

Sommaire de ce chapitre

1	Modèles de spins sur réseau	18
1.1	Considérations générales	18
	a) Hamiltonien de spins	18
	b) Fluctuations quantiques en dimensionnalité réduite	19
1.2	La chaîne XXZ de spins $\frac{1}{2}$	21
	a) Solution exacte par Ansatz de Bethe	21
	b) Bosonisation	23
	c) Exemple: calcul des corrections de taille finie à la rigidité de spin	26
1.3	Modèles de chaînes spin-Peierls	31
	a) La chaîne explicitement dimérisée	31
	b) Rôle de la frustration	32
2	Introduction du désordre dans les modèles	35
2.1	Chaînes de spins $\frac{1}{2}$ désordonnées	35
	a) Faible désordre: Approche par la bosonisation	35
	b) Fort désordre: Renormalisation dans l'espace réel	39
2.2	Impuretés dans des systèmes de chaînes spin-Peierls	42
	a) Effet d'une impureté non magnétique dans une chaîne dimérisée isolée	42
	b) Prise en compte des effets bidimensionnels	45
3	Méthodes numériques	47
3.1	Introduction	47
3.2	Diagonalisation exacte	48
	a) Méthode de Lanczos	48
	b) Application aux systèmes magnétiques frustrés	49
3.3	Monte Carlo quantique	51
	a) Principes de la technique SSE	52
	b) Application aux chaînes de spins $\frac{1}{2}$	58

1 Modèles de spins sur réseau

Le modèle de Hubbard à une bande [70], dont le hamiltonien sur réseau s'écrit

$$\mathcal{H}_{\text{Hubbard}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (\text{III.1})$$

fournit un point de départ très pertinent à la description théorique des systèmes électroniques fortement corrélés. $c_{i,\sigma}^\dagger$ est l'opérateur de création d'un fermion de spin σ au site i et $n_{i\sigma}$ est le nombre de fermions de spin σ au site i . Dans le hamiltonien (III.1), où t et U sont positifs, le premier terme décrit l'énergie cinétique des électrons : il favorise leur mouvement et donc, leur délocalisation. Le second terme caractérise l'interaction Coulombienne, tendant plutôt à localiser les particules sur site. La compétition entre ces deux tendances donne naissance à des effets non triviaux et, bien que ce modèle constitue déjà une approximation des interactions électroniques dans la matière, il peut encore être simplifié dans certains cas spéciaux. Par exemple sur un réseau carré, si le nombre d'électrons est égal au nombre de sites, lorsque $t \gg U$, la délocalisation est favorisée : on a un comportement métallique. Par contre si $t \ll U$, le système est isolant et peut être décrit en termes d'électrons localisés où seuls les degrés de liberté de spin interviennent. En effet, la physique de basse énergie d'un tel isolant (dit de Mott) est contenue dans le *modèle effectif* de Heisenberg antiferromagnétique

$$\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = \frac{4t^2}{U} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (\text{III.2})$$

où $J = \frac{4t^2}{U}$ est la constante d'échange antiferromagnétique.

1.1 Considérations générales

a) Hamiltonien de spins

D'une façon plus générale on peut écrire le hamiltonien de spins en interaction sous la forme suivante :

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \sum_{\alpha=x,y,z} J_{ij}^\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha. \quad (\text{III.3})$$

Ainsi on peut distinguer plusieurs cas de figure selon les paramètres de \mathcal{H} :

- (i) Signe de J : l'interaction est ferromagnétique si $J < 0$ et antiferromagnétique si $J > 0$.
- (ii) Portée de l'interaction : le plus souvent, l'interaction est restreinte aux plus proches voisins mais l'échange à plus longue distance existe et peut notamment donner lieu à des phénomènes de *frustration magnétique*.
- (iii) Symétrie des couplages : dans le cas où $J^x = J^y = J^z$ on parle du modèle de Heisenberg isotrope. Si $J^x = J^y \neq J^z$ on fait alors référence au modèle XXZ. Les limites d'Ising et XY sont obtenues respectivement pour $J_z \gg J^x, J^y$ et $J^x = J^y \gg J^z$.

- (iv) Invariance par translation : lorsque J_{ij} ne dépend que de la distance $|i - j|$, le modèle est invariant par translation et \mathcal{H} peut aussi s'écrire dans l'espace réciproque où les approches analytiques sont souvent plus aisées. Par contre lorsque J_{ij} dépend de i et de j , la symétrie de translation est brisée et les approches analytiques sont essentiellement restreintes à l'espace réel. De plus, les techniques numériques utilisent beaucoup les symétries des modèles, et notamment la symétrie de translation, qui réduisent la taille de l'espace de Hilbert à considérer.
- (v) Valeur du spin : la quantification du spin selon une direction donnée, par exemple (Oz) , entraîne que l'opérateur S^z ne prend qu'un nombre fini de valeurs $\{-S, -S + 1, \dots, S - 1, S\}$. Dans le cas des grands spins $S \gg 1$, la quantification peut être négligée et le vecteur \vec{S} est traité comme une variable classique pouvant accéder à un continuum de valeurs. A l'inverse, le cas des petits spins (typiquement $S = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$) est fortement sensible aux *fluctuations quantiques*, surtout à très basse température, lorsque les fluctuations thermiques deviennent négligeables.

De plus, comme l'a montré Haldane en 1983 [71], le caractère entier ou demi-entier de S se révèle être un paramètre fort important, notamment pour les chaînes de spins. En effet, le modèle de Heisenberg isotrope à une dimension présente des propriétés à basse énergie radicalement différentes selon la parité de $2S$. Pour les chaînes de spins demi-entiers, le spectre des excitations ne possède pas de gap de spin ($\Delta_s = 0$), la longueur de corrélation est donc infinie ($\xi \sim \Delta_s^{-1} \rightarrow \infty$). Cela se traduit par des fonctions de corrélation de spin qui décroissent de façon algébrique à $T = 0$: on parle alors de *quasi-ordre à longue distance*. Par contre, lorsque S est un nombre entier, de façon assez surprenante un gap s'ouvre dans le spectre des excitations $\Delta_s \sim S^2 \exp(-\pi S)$ et les fonctions de corrélation de spin décroissent alors de manière exponentielle avec une longueur de corrélation $\xi \sim S^{-1} \exp(\pi S)^1$.

Une autre donnée essentielle, que nous venons d'aborder brièvement avec la problématique des chaînes de spins quantiques, concerne la forme du réseau. Nous allons voir que la géométrie, et notamment la dimensionnalité, jouent un rôle majeur quant aux fluctuations quantiques.

b) Fluctuations quantiques en dimensionnalité réduite

I. GÉNÉRALITÉS

Dans le cas classique ($S \gg 1$), l'état fondamental d'un système de spins en interaction antiferromagnétique aux plus proches voisins sur un réseau bipartite, via le hamiltonien de Heisenberg isotrope

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

1. Les résultats des simulations numériques les plus récentes pour $S = 1, 2, 3$ sont rapportés dans [72].

est un *état de Néel* d'aimantation alternée par site maximale

$$m_{\text{AF}} = \frac{1}{L} \left| \sum_{i \in A} \langle S_i^z \rangle - \sum_{j \in B} \langle S_j^z \rangle \right| = S.$$

L est le nombre de spins et le réseau bipartite est partagé en deux sous-réseaux A et B . Par contre lorsque les spins sont des objets quantiques, l'état de Néel $|\uparrow\downarrow\uparrow \dots \downarrow\rangle$ n'est plus un état propre de (III.4), mais est « habillé » par des fluctuations quantiques; la théorie des ondes de spins donnant [73]

$$m_{\text{AF}} - S \sim -\frac{1}{(2\pi)^D} \int \frac{d^D \vec{k}}{k},$$

où D est la dimensionnalité du réseau. Si $D = 1$, l'intégrale diverge en 0, ce qui nous informe qu'un ordre de type Néel n'est pas possible. En revanche, si $D = 2$, la mise en ordre peut avoir lieu, mais seulement à température nulle [74, 75]. A trois dimensions par contre, la transition vers un ordre antiferromagnétique s'effectue à une température de Néel $T_N \neq 0$. Dans la suite de l'exposé S est égal à $\frac{1}{2}$ dans la quasi-totalité des situations. Toutefois, nous préciserons explicitement les cas où des spins plus grands seront étudiés.

II. $D = 2$

Le cas bidimensionnel est très intéressant car la géométrie du réseau peut jouer un rôle essentiel dans le mécanisme de mise en ordre antiferromagnétique. Par exemple, les réseaux bipartites sans frustration magnétique² de type carré ou nid d'abeille, présentent un fondamental ordonné ($m_{\text{AF}} \neq 0$). A l'inverse, sur des réseaux frustrés du type *Kagomé* [76] ou *Shastry-Sutherland* [77], l'ordre de Néel est détruit par les fluctuations quantiques [78]. Pourtant la frustration, via les fluctuations quantiques qu'elle peut générer, ne suffit pas à détruire un ordre antiferromagnétique. Le modèle de Heisenberg sur le réseau triangulaire en est un exemple car, malgré la compétition entre les interactions, un ordre de Néel s'établit à température nulle [79].

III. $D = 1$

Défini sur un anneau de L sites (voir la figure III.1) par le hamiltonien

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^L J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}, \quad (\text{III.5})$$

avec des conditions aux bords périodiques $\vec{S}_{L+1} = \vec{S}_1$, le modèle de Heisenberg isotrope en dimension 1 jouit d'un statut particulier car l'ordre antiferromagnétique y est proscrit. Ses propriétés sont bien connues depuis les travaux fondateurs de Bethe en 1931 [80]. Ce modèle, véritable paradigme en physique de la

2. L'image la plus simple illustrant la frustration magnétique est obtenue en considérant l'interaction antiferromagnétique de trois spins sur un triangle, où l'un des trois liens ne peut être satisfait dans une configuration d'énergie minimale.

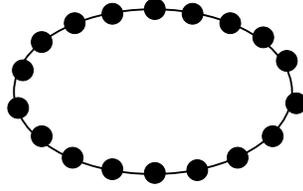


FIG. III.1 – Réseau unidimensionnel de spins $\frac{1}{2}$ (cercles noirs) couplés aux premiers voisins. Les conditions aux bords sont périodiques.

matière condensée, symbolise l'importance que peuvent revêtir les fluctuations quantiques. En effet, la fonction d'onde de son état fondamental, situé dans le secteur où $S_{\text{total}}^z = \sum_{i=1}^L S_i^z = 0$, est une superposition des $\frac{N!}{N/2!N/2!}$ états du sous-espace. Bien que non-ordonné, le système est fortement corrélé à grande distance car un quasi-ordre à longue portée s'y établit : la longueur de corrélation est par conséquent infinie et le spectre des excitations présente un continuum d'états de basse énergie.

1.2 La chaîne XXZ de spins $\frac{1}{2}$

Dans le contexte des transitions de phases quantiques³, la chaîne antiferromagnétique de spins $\frac{1}{2}$ dans sa version anisotrope est extrêmement intéressante à étudier. En effet, le modèle XXZ unidimensionnel, décrit par le hamiltonien

$$\mathcal{H}_{\text{XXZ}} = \frac{J}{2} \sum_{i=1}^L (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + J\Delta \sum_{i=1}^L S_i^z S_{i+1}^z, \quad (\text{III.6})$$

exhibe à $T = 0$ une transition pour $\Delta = 1$ entre une phase, que nous qualifierons de *critique* si $\Delta \in [0,1]$, et une phase de type Ising apparaissant lorsque $\Delta > 1$.

a) Solution exacte par Ansatz de Bethe

Depuis l'article original de Bethe [80], la chaîne XXZ ainsi que bien d'autres modèles admettant aussi une solution exacte de type Ansatz de Bethe ont fait l'objet de multiples études. En donner une bibliographie, même superficielle, serait illusoire tant cette approche est un véritable paradigme pour les modèles intégrables [81]. Citons toutefois les travaux de Yang et Yang [82, 83] où la solution des équations de Bethe fut étendue au cas XXZ pour la première fois. Le livre de Gaudin [84] constitue un ouvrage fondamental sur le sujet ainsi que l'approche algébrique de Baxter [81]. Dans ce qui suit nous présentons les grandes lignes de la solution exacte pour l'état fondamental de la chaîne XXZ par l'Ansatz de Bethe, inspirées de [85, 86] ainsi que du cours de DEA de F. Mila donné en 2000.

Comme le commutateur $[\mathcal{H}, S_{\text{total}}^z] = 0$, nous travaillons dans les sous-espaces où S_{total}^z est fixé, égal à $\frac{L}{2} - m$, le fondamental antiferromagnétique se situant dans le

3. Par transitions de phases quantiques [2], nous désignons les changements de phase qui ont lieu à température nulle et dont le paramètre de contrôle n'est plus la température T , mais un paramètre extérieur comme par exemple un champ magnétique, un couplage, voire le désordre.

secteur où $m = \frac{L}{2}$. Pour $m = 0$ on a l'état complètement polarisé $|F\rangle = |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle$. Si l'on introduit une excitation (on retourne 1 spin), on obtient un état à 1 magnon qui s'écrit dans l'espace réciproque $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=1}^L \exp(ikj)|j\rangle$, où l'état $|j\rangle = S_j^-|F\rangle = |\uparrow_1\uparrow_2 \dots \downarrow_j \dots \uparrow_L\rangle$ et $k = 2\pi p/L$, $p = 0, \dots, L-1$.

Pour les secteurs de $m > 1$, l'état fondamental peut se mettre sous la forme d'une superposition d'ondes de spins de la forme

$$|\Psi\rangle = \sum_{1 \leq j_1 \leq \dots \leq j_m \leq L} a(j_1, \dots, j_m) |j_1, \dots, j_m\rangle. \quad (\text{III.7})$$

Sous plusieurs conditions que l'on impose aux $a(\{j\})$ [85], les coefficients de la fonction de Bethe s'écrivent

$$a(j_1, \dots, j_m) = \sum_{\mathcal{P} \in \Pi_m} A(\mathcal{P}) \exp(i \sum_{l=1}^m k_{\mathcal{P}(l)} j_l), \quad (\text{III.8})$$

avec $A(\mathcal{P}) = \text{sgn}(\mathcal{P}) \exp(-i \sum_{l < n} \Theta_{\mathcal{P}(l), \mathcal{P}(n)})$.

Π_m étant le groupe des permutations à m éléments et $\Theta_{p,q}$ est le terme de déphasage qui obéit à

$$\Theta_{p,q} = 2 \arctan \left(\frac{\Delta \sin \left(\frac{k_p - k_q}{2} \right)}{\cos \left(\frac{k_p + k_q}{2} \right) + \Delta \cos \left(\frac{k_p - k_q}{2} \right)} \right). \quad (\text{III.9})$$

Les conditions aux bords périodiques imposent alors une relation entre les déphasages Θ et les impulsions k :

$$Lk_j = 2\pi I_j - \sum_{n \neq j} \Theta_{j,n}, \quad (\text{III.10})$$

où la famille $\{I_j\}$ représente les nombres quantiques de Bethe qui dans un secteur m quelconque sont donnés par [82]

$$I_j = -\frac{m}{2} + \frac{1}{2}, -\frac{m}{2} + \frac{3}{2}, \dots, \frac{m}{2} - \frac{1}{2}. \quad (\text{III.11})$$

Le calcul de l'énergie du fondamental s'effectue alors assez simplement :

$$E_0 = -\frac{JL\Delta}{4} + J \sum_{l=1}^{L/2} (\Delta - \cos k_l), \quad (\text{III.12})$$

les impulsions k_l pouvant être calculées directement numériquement à partir de (III.10) en utilisant une paramétrisation astucieuse des k_l [86]. A la limite thermodynamique, le résultat bien connu au point antiferromagnétique isotrope $\Delta = 1$ donnant une énergie par site $e_0(L \rightarrow \infty) = \frac{1}{4} - \ln 2 \simeq -0.44315$ est bien vérifié, comme le montre la figure III.2 où les résultats par Ansatz de Bethe sont comparés aux corrections de taille finie prévues par la théorie conforme [87, 88]. En effet, dans

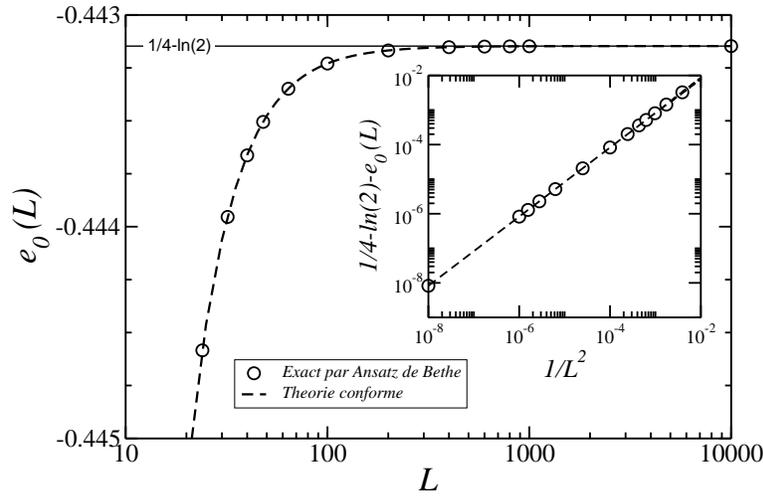


FIG. III.2 – *Energie par site de l'état fondamental du modèle XXX (equation (III.6) avec $\Delta = 1$) en fonction de la taille de la chaîne L . Les cercles représentent le résultat exact calculé numériquement par Ansatz de Bethe jusqu'à $L = 10^4$ sites et la ligne brisée montre les corrections de taille finie calculées par la théorie conforme dans [87]. La ligne pleine est la valeur à la limite thermodynamique $e_0(L \rightarrow \infty) = \frac{1}{4} - \ln 2$. En vignette nous vérifions la convergence en L^{-2} vers la limite thermodynamique (équation (III.13)).*

le régime critique les corrections de taille finie à l'énergie par site du fondamental ont été évaluées par la théorie conforme :

$$e_0(\Delta, L) = e_0(\Delta, L \rightarrow \infty) - u(\Delta)c \frac{\pi}{6L^2} + o\left(\frac{1}{L^2}\right), \quad (\text{III.13})$$

où $u(\Delta) = \frac{\pi\sqrt{1-\Delta^2}}{2\arccos\Delta}$ est la vitesse des excitations de basse énergie et c est la charge centrale qui vaut 1. La résolution numérique des équations de Bethe pour des chaînes de tailles finies nous donne des résultats en parfait accord avec l'équation (III.13), comme le montre la figure III.2.

La solution exacte de la chaîne XXZ nous fournit de nombreuses informations sur l'état fondamental et ses applications à des modèles classiques de physique statistique se sont révélées très fructueuses [81]. Dans la section 1.2 c) de ce chapitre, nous reviendrons sur la solution exacte de la chaîne XXZ dans le cas de conditions de bords particulières que nous qualifierons de « twistées ».

b) Bosonisation

I. TRANSFORMATION DE JORDAN-WIGNER

Dans cette partie nous nous intéressons aux excitations de basse énergie de la chaîne de spins $\frac{1}{2}$, accessibles par la technique de bosonisation. Celle-ci ramène le modèle XXZ à un problème de fermions sans spin en interaction qui peut être décrit par la théorie du liquide de Luttinger [89]. La première étape consiste à exprimer

les opérateurs de spin $\frac{1}{2}$ en terme d'opérateurs fermioniques, via la transformation de Jordan-Wigner [90]:

$$S_j^+ = c_j^\dagger \exp(i\pi \sum_{l=1}^{j-1} n_l), \quad S_j^- = \exp(-i\pi \sum_{l=1}^{j-1} n_l) c_j. \quad (\text{III.14})$$

$n_j = c_j^\dagger c_j$ est le nombre de fermions au site j (0 ou 1), donné par $n_j = 1/2 + S_j^z$. On peut noter que les relations d'anticommutation sont bien vérifiées: $\{c_i^\dagger, c_j\} = \delta_{i,j}$. Le hamiltonien XXZ (III.6) devient alors

$$\mathcal{H}_{\text{XXZ}} = \frac{J}{2} \sum_{i=1}^L (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i) + J\Delta \sum_{i=1}^L (n_i - \frac{1}{2})(n_{i+1} - \frac{1}{2}). \quad (\text{III.15})$$

Arrêtons nous quelques instants sur la forme du hamiltonien (III.15) qui décrit des fermions sans spin. Le premier terme est un terme de saut, correspondant à l'énergie cinétique des fermions; le second, lui, apparaît comme une interaction entre fermions voisins. Un tel modèle est aussi appelé $t - V$ avec $t = J/2$ et $V = J\Delta$. Le nombre total de fermions $\mathcal{N} = \sum_{i=1}^L n_i$ est relié au secteur de S_{total}^z par $\mathcal{N} = S_{\text{total}}^z + L/2$. Autrement dit le fondamental antiferromagnétique du problème de spins se trouve dans le secteur correspondant au demi-remplissage pour le problème de fermions.

II. MODÈLE DE SINE-GORDON

Dans ce qui suit, nous nous contenterons seulement d'un bref rappel des principaux résultats de la bosonisation de la chaîne XXZ. Pour plus de détails, de nombreuses références existent sur le sujet [91, 92, 93, 94] et nous invitons le lecteur intéressé à s'y référer.

L'étude des excitations de basse énergie repose sur la linéarisation du spectre au voisinage du niveau de Fermi. L'introduction de champs bosoniques continus $\Phi(x)$ et $\Pi(x)$, vérifiant $[\Phi(x), \Pi(y)] = i\delta(x - y)$, permet une réécriture des opérateurs de spin

$$S^+(x) = \frac{\exp(-i\pi \int \Pi(x) dx)}{\sqrt{2\pi a}} (\exp(-\frac{i\pi x}{a}) + \cos 2\Phi(x)),$$

$$S^z(x) = -\frac{1}{\pi} \partial_x \Phi(x) + \exp(\frac{i\pi x}{a}) \frac{\cos 2\Phi(x)}{a\pi},$$

où a est le pas du réseau. Physiquement, $-\frac{1}{\pi} \partial_x \Phi(x)$ est relié à la densité de fermions et $\Pi(x)$ au courant. La formulation continue de (III.15) est donnée par le hamiltonien sine-Gordon

$$\mathcal{H}_{\text{SG}} = \int \frac{dx}{2} \left\{ \frac{uK}{\pi} [\pi\Pi]^2 + \frac{\pi u}{K} \left[\frac{\partial_x \Phi}{\pi} \right]^2 \right\} + \frac{J\Delta}{2(\pi a)^2} \int dx \cos(4\Phi). \quad (\text{III.16})$$

Dans le cas sans interaction $\Delta = 0$, (III.16) est le modèle du liquide de Luttinger qui décrit simplement une chaîne élastique. Pour la chaîne XY, la vitesse des excitations

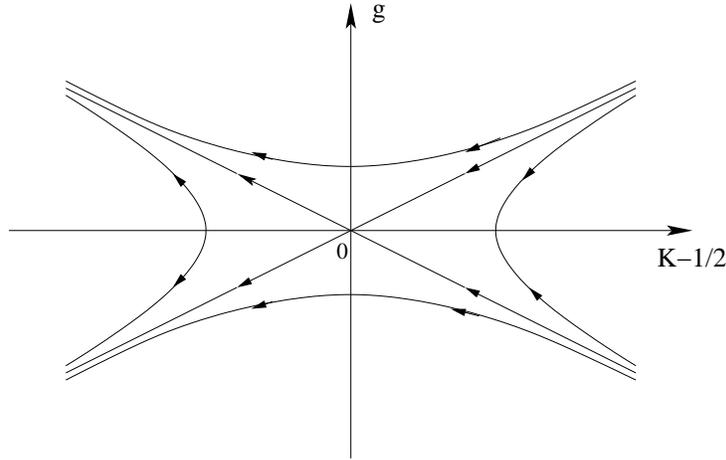


FIG. III.3 – Flot de renormalisation du modèle sine-Gordon (III.16).

est donnée par $u = 1$ et le paramètre de Luttinger $K = 1$. A température nulle, les fonctions de corrélation de spin sont données par [91, 92] :

$$\begin{aligned} \langle S^z(x)S^z(0) \rangle &\sim (-1)^x \frac{1}{x^{2K}}, \\ \langle S^+(x)S^-(0) \rangle &\sim (-1)^x \frac{1}{x^{1/2K}}. \end{aligned} \quad (\text{III.17})$$

On retrouve bien le quasi-ordre à longue portée avec de telles fonctions de corrélation qui décroissent en loi de puissance. Dans le cas avec interaction $\Delta \neq 0$, le terme $g \int dx \cos(4\Phi(x))$ est traité en perturbation. La question est de savoir comment va se comporter le couplage g sous un changement d'échelle. Les équations du groupe de renormalisation obtenues par José, Kadanoff, Kirkpatrick et Nelson [95], donnent

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dl} &= (2 - 4K)g + \mathcal{O}(g^2) \\ \frac{dK}{dl} &= -Ag^2, \end{aligned} \quad (\text{III.18})$$

avec $l = \ln(L)$ et A une constante > 0 . Notons que ces équations sont identiques à celles obtenues par Kosterlitz et Thouless [96] dans le traitement du modèle XY classique à deux dimensions décrivant la transition superfluide. Le flot de renormalisation de ce système est représenté sur la figure III.3 où l'on peut identifier deux types de points fixes :

(i) $g = 0$ et $K = K^*$. La perturbation est *non pertinente* et le système se comporte comme un liquide de Luttinger avec notamment des fonctions de corrélation décrites par (III.17) et contrôlées par l'exposant K^* .

(ii) $g \rightarrow \infty$ et $K \rightarrow 0$. On tend vers la limite de couplage fort, la renormalisation détruit le liquide de Luttinger.

III. CONCLUSIONS POUR LA CHAÎNE XXZ

Pour la chaîne XXZ le point fixe K^* peut s'obtenir exactement en fonction de l'anisotropie $\Delta \in [-1,1]$ par Ansatz de Bethe [97] et vaut

$$K^*(\Delta) = \frac{\pi}{2(\pi - \arccos \Delta)}. \quad (\text{III.19})$$

Dans le regime antiferromagnétique où $\Delta \geq 0$, on identifie aisément les différents comportements :

(i) Si $\Delta \in [0,1]$, $K \rightarrow K^*$ et le terme d'interaction est renormalisé à zero : le liquide de Luttinger est stable. Pour $1/2 < K^* \leq 1$ (i.e. $0 \leq \Delta < 1$) la perturbation est *non-pertinente* alors qu'au point isotrope $K^* = 1/2$ (i.e. $\Delta = 1$) on parle de perturbation *non-pertinente marginale* pouvant notamment produire des corrections logarithmiques aux observables physiques. Les corrélations de spin sont quasi-ordonnées avec des décroissances en lois de puissances

$$\mathcal{C}^\alpha(r) = \langle S_i^\alpha S_{i+r}^\alpha \rangle \propto (-1)^r r^{-\eta_\alpha}, \quad \alpha = x, y, z, \quad (\text{III.20})$$

où les exposants $\eta_{x,y} = \eta_z^{-1} = 1 - \arccos \Delta^4$.

(ii) Si $\Delta > 1$, la renormalisation positive de l'interaction fait plonger le système dans une phase différente où le terme d'Ising prend le dessus et tend à ordonner les spins de façon antiferromagnétique⁵. Un gap de spin s'ouvre dans le spectre des excitations, et les fonctions de corrélation de spin décroissent exponentiellement.

c) Exemple : calcul des corrections de taille finie à la rigidité de spin

Dans cette partie, un exemple de calcul exact par Ansatz de Bethe est présenté et les corrections de taille finie sont analysées, puis comparées à un calcul par bosonisation. La compréhension des effets de taille finie est cruciale du point de vue de la physique de systèmes mésoscopiques et notamment pour l'étude des propriétés de transport et des courants permanents [100, 101, 102].

I. GÉNÉRALITÉS

La conductivité du liquide Luttinger, donnée par

$$\sigma(\omega) = \frac{uK}{\pi} \delta(\omega) + \sigma_{\text{reg}}(\omega), \quad (\text{III.21})$$

se compose d'une partie à fréquence nulle et d'une partie régulière. Le préfacteur $\frac{uK}{\pi}$ est appelé *poids de Drude* où encore, *rigidité de charge* dans le cas d'un modèle de fermions (comme $t - V$ [94]), ou *rigidité de spin* dans le cas d'un hamiltonien de spins. La connaissance de cette rigidité ρ nous permet notamment d'accéder au courant permanent induit par la présence d'un flux Aharonov-Bohm Φ_{A-B} [103]: $J = 2\pi\rho \frac{\Phi_{A-B}}{\Phi_0}$ [104], Φ_0 étant le quantum de flux. L'application d'un tel flux à un

4. Notons toutefois qu'au point isotrope $\Delta = 1$, des corrections logarithmiques de la forme $\mathcal{C}^\alpha(r) \propto (-1)^r \frac{\sqrt{\ln r}}{r}$ sont observées [98, 99].

5. Une telle mise en ordre à une dimension n'est pas en contradiction avec le théorème de Mermin-Wagner [75] car le hamiltonien n'est plus invariant SU(2).

anneau de fermions modifie les conditions aux bords [105]. En effet, partant d'une chaîne périodique, le flux va avoir pour effet de « tordre » l'anneau d'un angle dit de « twist » $\phi = 2\pi \frac{\Phi_{A-B}}{\Phi_0}$. Plus précisément on aura

$$c_{L+1}^\dagger = c_1^\dagger \exp(i\phi) \text{ et } c_{L+1} = c_1 \exp(-i\phi), \quad (\text{III.22})$$

ou, en terme d'opérateurs de spin

$$S_{L+1}^\pm = S_1^\pm \exp(\pm i\phi) \text{ et } S_{L+1}^z = S_1^z. \quad (\text{III.23})$$

A température nulle, la rigidité est donnée par la deuxième dérivée de l'énergie du fondamental ϵ_0 par rapport au twist, ramené à l'unité de longueur ϕ/L :

$$\rho = \left. \frac{\partial^2 e_0(\phi)}{\partial(\phi/L)^2} \right|_{\phi=0}. \quad (\text{III.24})$$

Dans la section 2.1 du chapitre IV, nous reviendrons sur les lois d'échelle qui régissent le comportement de la rigidité au voisinage d'un point critique. Toutefois, nous pouvons mentionner ici que dans une phase critique (pour la chaîne XXZ c'est une ligne critique pour $\Delta \in [-1,1]$), en dimension D , la rigidité d'un système de taille L se comporte comme [106]

$$\rho(L) \sim L^{2-D-z}, \quad (\text{III.25})$$

où z est l'exposant dynamique, qui dans le cas de chaîne XXZ vaut 1. A la limite thermodynamique, on prévoit donc d'observer une rigidité finie non nulle dans la phase critique alors qu'une chute de ρ à 0 est attendue à la transition pour $\Delta = 1$ (ou -1). Ceci est bien confirmé par l'étude de Sutherland et Shastry [107] qui ont dérivé l'expression suivante, exacte, à la limite thermodynamique pour la rigidité

$$\frac{\rho}{J} = \begin{cases} \frac{\pi}{4} \frac{\sin(\mu)}{\mu(\pi-\mu)} & \text{si } \Delta = \cos(\mu) \in [-1,1] \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{III.26})$$

La phase où $\Delta \in [-1,1]$ est qualifiée de *métallique* alors que pour $\Delta < -1$ et $\Delta > 1$, on parle de phase *isolante* avec, comme vu précédemment, l'ouverture d'un gap ainsi qu'une longueur de corrélation finie. La transition de phase à $\Delta = 1$, accompagnée par la chute brutale à 0 de la rigidité, est une transition de type *Metal-Isolant* suivant un mécanisme de Mott [108].

Dans la suite de la section, nous posons pour simplifier l'échelle d'énergie $J = 1$.

II. CALCUL DE LA RIGIDITÉ PAR L'ANSATZ DE BETHE

Sous les conditions de bord « twistées » (III.22-III.23), les équations de l'Ansatz de Bethe peuvent être résolues [109, 110]. L'angle ϕ imposé en bord de chaîne peut être distribué uniformément sur chaque lien à raison de $\varphi = \phi/L$ par lien. Les impulsions k , introduites en (III.10), subissent uniquement un décalage dans l'espace réciproque de φ . L'équation (III.10) devient donc

$$k_l(\phi) = \frac{1}{L} [2\pi I_l + \phi - \sum_{n \neq l} \Theta_{l,n}], \quad (\text{III.27})$$

avec $\Theta_{l,n}$ toujours donné par l'équation (III.9). Dans le secteur du fondamental, les nombres quantiques de Bethe restent inchangés (III.11). Le calcul de la rigidité est alors donné par [111]

$$\begin{aligned} \rho(L) &= L^2 \frac{\partial^2 e_0(\varphi)}{\partial \varphi^2} \Big|_{\varphi=0} \\ &= -L \sum_{l=1}^{L/2} \frac{\partial^2 (\cos(k_l(\varphi)))}{\partial \varphi^2} \Big|_{\varphi=0} \\ &= L \sum_{l=1}^{L/2} \left[\frac{\partial^2 k_l}{\partial \varphi^2} \sin(k_l) + \left(\frac{\partial k_l}{\partial \varphi} \right)^2 \cos(k_l) \right] \Big|_{\varphi=0}. \end{aligned} \quad (\text{III.28})$$

Par la suite il est possible de calculer les dérivées $\partial^2 k_l / \partial \varphi^2$ et $\partial k_l / \partial \varphi$ à partir de (III.27) et (III.9). Pour $\partial k_l / \partial \varphi$ on obtient l'expression suivante

$$\frac{\partial k_l}{\partial \varphi} = \frac{1}{L} - \frac{1}{L} \sum_{n=1}^{L/2} \left[\frac{\partial \Theta(k_l, k_n)}{\partial k_l} \frac{\partial k_l}{\partial \varphi} + \frac{\partial \Theta(k_l, k_n)}{\partial k_n} \frac{\partial k_n}{\partial \varphi} \right]. \quad (\text{III.29})$$

Étant donné que les dérivées $\partial \Theta(k_l, k_n) / \partial k_l$ ne dépendent pas de $\partial k_l / \partial \varphi$, mais seulement des impulsions k_l connues, une simple équation matricielle permet d'accéder à $\partial k_l / \partial \varphi$. La résolution s'effectue numériquement, à l'aide de routines standards d'algèbre linéaire. Une expression équivalente existe pour le calcul de $\partial^2 k_l / \partial \varphi^2$ qui se réduit aussi à un problème d'algèbre linéaire une fois que les $\partial k_l / \partial \varphi$ sont connus. Par conséquent, $\rho(L)$ peut être déterminé numériquement exactement, une fois les k_l déterminés.

La figure III.4 illustre ce calcul exact de la rigidité en fonction de l'anisotropie Δ de la chaîne XXZ. Outre le fait que la transition métal-isolant à $\Delta = 1$ est bien retrouvée, la question qui nous intéresse concerne les corrections de taille finie $\rho(L) = \rho(L \rightarrow \infty) + f(L)$. Dans le régime isolant, on sait que $\rho(L \rightarrow \infty) = 0$ et on s'attend à ce que $f(L) \sim Y(L/\xi)$, avec Y une fonction universelle [112] caractérisant la transition métal-isolant d'un système unidimensionnel⁶. En ce qui concerne le régime critique, la simple analyse d'échelle de l'équation (III.25) est insuffisante pour appréhender correctement la fonction $f(L)$.

III. ÉTUDE DES CORRECTIONS DE TAILLE FINIE PAR LE GROUPE DE RENORMALISATION

L'intégration des équations de renormalisation (III.18) de L_0 à L donne accès aux corrections de taille finie de $K(L)$ et $g(L)$. Les corrections de g ont été calculées par Cardy [114] et se révèlent utiles notamment pour évaluer les corrections d'ordres supérieurs à l'énergie (III.13) [98, 115, 116].

6. Mentionnons les récents travaux de Gu *et al.* [113] où une meilleure loi d'échelle a été trouvée, de la forme $L^{-\eta} Y(L/\xi)$, η étant toutefois $\ll 1$.

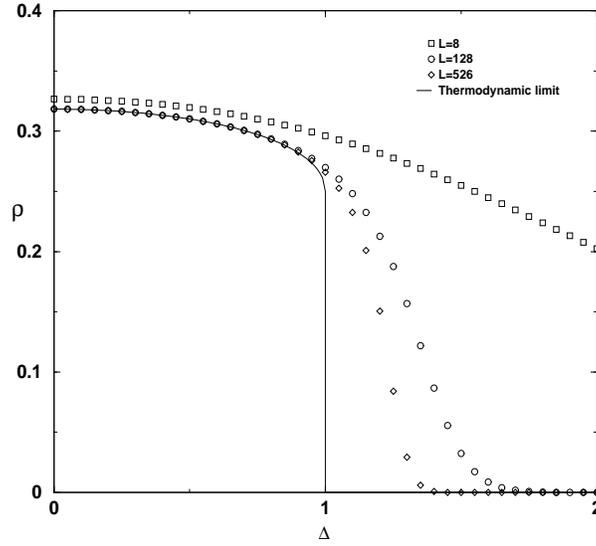


FIG. III.4 – Rigidité de spin ρ tracée en fonction de l'anisotropie Δ de la chaîne XXZ pour différentes tailles. Les points à $L = 8, 128$ et 526 ont été obtenus par Ansatz de Bethe et la ligne pleine est le résultat à la limite thermodynamique [équation (III.26)]. Figure extraite de la référence [111], publication n° 1.

i) Perturbation marginale : corrections logarithmiques

Au point isotrope $\Delta = 1$, on a $K^* = 1/2$. La perturbation est donc marginale et l'intégration de (III.18) donne pour $K(L)$ [111]

$$K(L) = \frac{1}{2} + \frac{K(L_0) - \frac{1}{2}}{1 + 4(K(L_0) - \frac{1}{2}) \ln(\frac{L}{L_0})}. \quad (\text{III.30})$$

Un tel comportement est en accord avec les prédictions de Loss et Maslov [117]. Au premier ordre en $1/\ln(L/L_0)$ ⁷, la rigidité doit se comporter comme

$$\rho(L) \simeq \frac{1}{4} + \frac{\rho(L_0) - 1/4}{1 + 8(\rho(L_0) - 1/4) \ln(L/L_0)}. \quad (\text{III.31})$$

La comparaison avec les calculs exacts par Ansatz de Bethe est très satisfaisante, comme le montre la figure III.5.

7. Le paramètre L_0 définit une borne pour l'intégration des équations du groupe de renormalisation entre L et L_0 . Afin d'accéder aux propriétés pour $L \rightarrow \infty$, il convient de choisir pour L_0 la plus grande valeur accessible par les calculs numériques de l'Ansatz de Bethe.

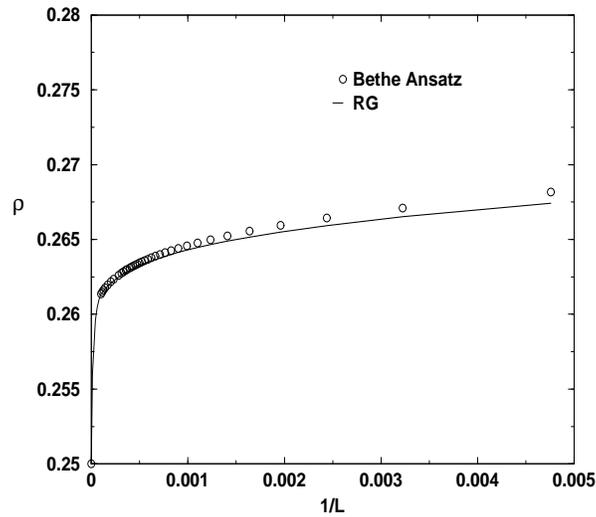


FIG. III.5 – Rigidité de spin $\rho(L)$ en fonction de $1/L$ pour $\Delta = 1$. Les résultats du groupe de renormalisation (équation (III.31) ligne pleine) avec $L_0 = 10000$ sont comparés aux résultats exacts obtenus par Ansatz de Bethe (\circ) sur des chaînes allant jusqu'à $L = 10000$ spins. La valeur à la limite thermodynamique est $\rho = 1/4$. Figure extraite de la référence [111], publication n° 1.

ii) *Perturbation non-pertinente : corrections algébriques*

Dans le régime anisotrope, $\Delta < 1$, on a $1/2 < K^* \leq 1$. Les équations (III.18) intégrées de L_0 à L donnent [111]

$$K(L) = K^* + \frac{(K(L_0) - K^*)(1 - 2K^*)}{1 - K^* - K(L_0)} \left(\frac{L}{L_0}\right)^{-8(K^* - 1/2)} + \mathcal{O}\left(\frac{L}{L_0}\right)^{-16(K^* - 1/2)}. \quad (\text{III.32})$$

On remarque que l'exposant

$$\gamma = 8(K^* - 1/2) = \frac{4 \arccos \Delta}{\pi - \arccos \Delta} \quad (\text{III.33})$$

varie entre 0^+ et 4. Pourtant, des termes en L^{-2} sont attendus à cause de l'invariance conforme [118, 119]. Par conséquent les corrections dominantes sont en L^{-2} pour $0 \leq \Delta \leq \frac{1}{2}$ et en $L^{-\gamma}$ pour $\frac{1}{2} \leq \Delta < 1$, ce qui est montré sur la figure III.6 où les résultats numériques par Ansatz de Bethe confirment bien ce fait.

En résumé, dans le régime anisotrope de la chaîne XXZ, à l'ordre le plus bas les corrections de taille finie à la rigidité sont

$$\rho(L) - \frac{\pi \sin \mu}{4\mu(\pi - \mu)} \sim \begin{cases} L^{-2} & \text{si } 0 \leq \Delta \leq 1/2 \\ L^{-\gamma} & \text{si } 1/2 < \Delta < 1. \end{cases} \quad (\text{III.34})$$

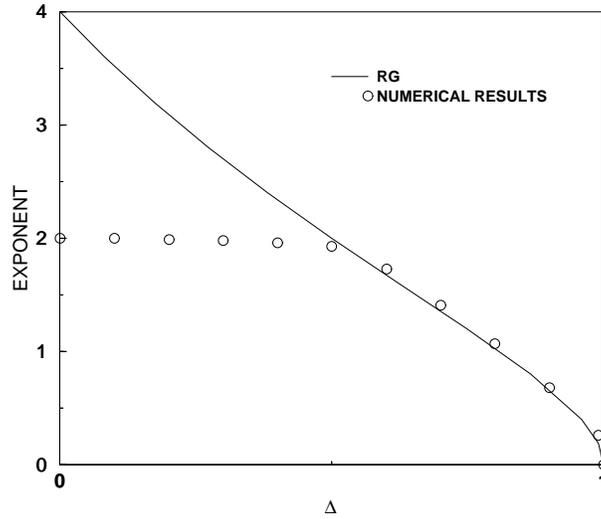


FIG. III.6 – *Exposant contrôlant la correction dominante de taille finie de la rigidité de spin $\rho(L)$, tracé en fonction de l'anisotropie Δ , calculé par Ansatz de Bethe (o) et comparé à l'exposant γ déterminé par le groupe de renormalisation (équation (III.33), ligne pleine). Figure extraite de la référence [111], publication n° 1.*

1.3 Modèles de chaînes spin-Peierls

Une partie des travaux effectués lors de cette thèse a porté sur l'étude de systèmes spin-Peierls. Ces derniers avaient auparavant fait l'objet du travail de thèse de David Augier [120]. La brève introduction théorique aux chaînes spin-Peierls qui suit est largement inspirée de cette solide référence [120].

a) La chaîne explicitement dimérisée

La façon la plus simple d'obtenir une dimérisation dans une chaîne de spins est d'y introduire explicitement un terme rigide de modulation des couplages aux premiers voisins :

$$\mathcal{H}_{\text{dim}} = \sum_{i=1}^L J(1 + (-1)^i \delta) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}. \quad (\text{III.35})$$

Une phase de type spin-Peierls [121, 122] apparaît $\forall \delta \neq 0$ où le quasi-ordre à longue distance disparaît, cédant la place à un état fondamental unique, non dégénéré, possédant une dimérisation $d = \left| \langle \vec{S}_{i-1} \cdot \vec{S}_i \rangle - \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \rangle \right|$ non nulle. Les corrélations de spin sont fortes sur le lien dont le couplage est le plus fort $J(1 + \delta)$ et faibles sur l'autre. Cette dimérisation est illustrée par la figure III.7 où est représenté le corrélateur $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \rangle$ le long d'une chaîne de spins $\frac{1}{2}$ gouvernée par le hamiltonien (III.35) avec $L = 100$ sites. Ce calcul a été effectué à l'aide de la technique Monte Carlo quantique SSE, que nous présenterons plus loin, dans la section 3.3 de ce chapitre.

La forme bosonisée du terme de modulation $h_d = \sum_i J(-1)^i \delta \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$ est donnée

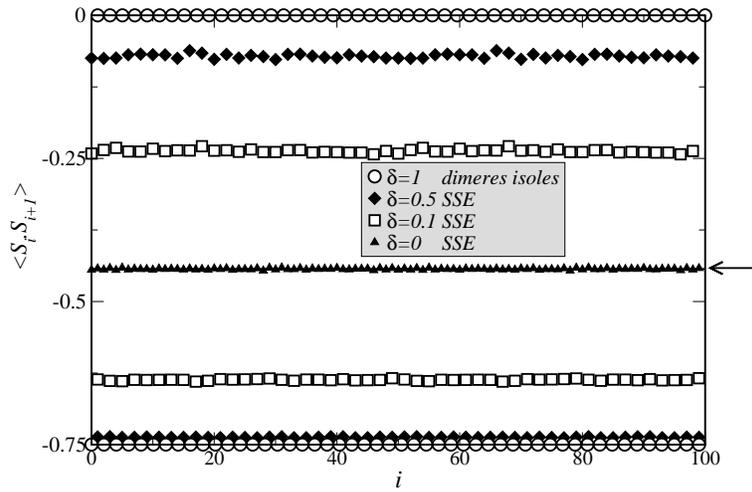


FIG. III.7 – Corrélations aux plus proches voisins $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \rangle$ dans la chaîne de Heisenberg dimérisée, calculées par Monte Carlo quantique SSE pour $L = 100$ sites et $\delta = 0, 0,1, 0,5$. Les barres d'erreurs sont de la taille des symboles. La flèche indique la valeur connue par l'Ansatz de Bethe de $\frac{1}{4} - \ln 2 \simeq 0.443$ pour la chaîne non dimérisée. Le cas trivial $\delta = 1$ est indiqué par les cercles ouverts.

par [123]

$$h_d \sim \delta \int \frac{dx}{2\pi} \sin(2\Phi), \quad (\text{III.36})$$

qui, ajouté à (III.16) donne un hamiltonien non soluble, du type sine-Gordon à deux fréquences. Toutefois, on sait que le terme (III.36) est pertinent (du point de vue du groupe de renormalisation) et ouvre un gap singulet-triplet dans le spectre des excitations [124, 125]

$$\Delta_s \propto \delta^{2/3} / |\log \delta|^{1/2}. \quad (\text{III.37})$$

b) Rôle de la frustration

I. LA CHAÎNE $J_1 - J_2$

Une autre façon de déstabiliser le quasi-ordre à longue distance de la chaîne de Heisenberg est de brancher une interaction antiferromagnétique aux seconds voisins qui va introduire une compétition entre les couplages.

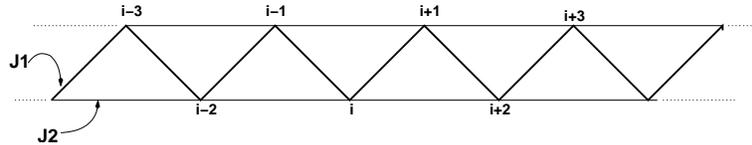


FIG. III.8 – Représentation schématique de la chaîne $J_1 - J_2$ dite en « zig-zag ».

Considérons ainsi le modèle $J_1 - J_2$ unidimensionnel, que l'on peut représenter

sur une chaîne dite en « zig-zag » (voir figure III.8) et dont le hamiltonien s'écrit

$$\mathcal{H}_{J_1-J_2} = \sum_{i=1}^L (J_1 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + J_2 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2}). \quad (\text{III.38})$$

Le terme d'interaction aux seconds voisins J_2 produit de la frustration dont on mesure l'intensité par $\alpha = J_2/J_1$. Un tel modèle, introduit initialement par Majumdar et Ghosh [126] s'est avéré être très pertinent pour décrire les propriétés du matériau CuGeO_3 (voir page 9). D'un point de vue strictement théorique l'étude de la chaîne $J_1 - J_2$ est extrêmement riche et a motivé de nombreux travaux durant les dernières années [127, 128, 129, 130, 131, 132].

II. ÉTAT FONDAMENTAL AU POINT MAJUMDAR-GHOSH

Tout d'abord on connaît exactement l'état fondamental de (III.38) pour $\alpha = 0$ (voir la section précédente sur l'Ansatz de Bethe) ainsi que pour $\alpha = 0,5$ que l'on appelle point Majumdar-Ghosh (MG) [133]. En ce point, pour une chaîne ayant des conditions de bord périodiques et un nombre pair de sites, le fondamental est spontanément dimérisé et brise ainsi la symétrie de translation. De plus il est deux fois dégénéré, $|\Phi_1\rangle$ et $|\Phi_2\rangle$ étant les deux états singulets suivants

$$|\Phi_1\rangle = [1, 2] [3, 4] \dots [L-1, L], \quad (\text{III.39})$$

$$|\Phi_2\rangle = [2, 3] [4, 5] \dots [L, 1], \quad (\text{III.40})$$

avec $[i, j] = \frac{|\uparrow_i \downarrow_j\rangle - |\downarrow_i \uparrow_j\rangle}{\sqrt{2}}$, le singulet formé entre les spins i et j . La figure III.9 donne une représentation schématique des ces deux fonctions d'ondes. Ces états, dits de

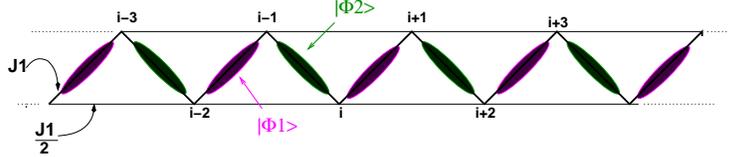


FIG. III.9 – Représentation schématique des deux états fondamentaux $|\Phi_1\rangle$ et $|\Phi_2\rangle$ de la chaîne « zig-zag » au point MG.

MG⁸, présentent exactement une dimérisation $d_{MG} = \frac{3}{4}$, ainsi qu'une énergie par site indépendante de la taille du système $e_0 = -\frac{3}{8}J_1$. Notons aussi que dans le cas d'une chaîne frustrée et explicitement dimérisée, le singulet de MG reste le fondamental exact le long de la ligne de *Shastry-Sutherland* où $\delta + 2\alpha = 1$ [135, 136].

III. GAP DE SPIN

Au point MG, la première excitation magnétique, qui consiste à briser un singulet pour créer un triplet de spin $S_{\text{total}} = 1$, présente un gap fini assez important

8. On trouve aussi la dénomination « état de *Kékulé* », en référence aux états à liaison de valence de la molécule de Benzène, découverts par Kékulé en 1865 [134].

$\Delta_s \sim J_1/4$ [135, 137]. Par conséquent les corrélations magnétiques s'annulent très rapidement, typiquement au delà de 2 sites⁹. Contrairement au cas avec dimérisation rigide, où la phase critique est immédiatement déstabilisée $\forall \delta \neq 0$, la chaîne $J_1 - J_2$ demeure dans la phase quasi-ordonnée pour des valeurs de la frustration α inférieures à une certaine valeur critique α_c , au delà de laquelle un gap de spin s'ouvre dans le spectre. On sait maintenant que la transition entre la phase quasi-ordonnée et la

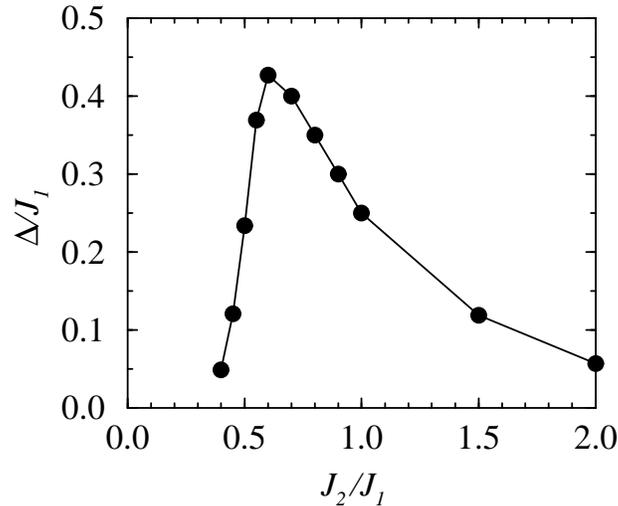


FIG. III.10 – Gap de spin en fonction de la frustration $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ pour la chaîne $J_1 - J_2$ obtenu en DMRG sur $L = 200$ spins $\frac{1}{2}$ par White et Affleck dans [138].

phase dimérisée avec gap de spin est du second ordre, et s'établit à $\alpha_c \simeq 0.2412$, comme l'ont montré plusieurs groupes par diverses méthodes [139, 136, 140] (voir aussi la section 3.2 de ce chapitre pour une détermination de α_c par diagonalisation exacte). Des études analytiques ont montré [141, 91] que l'ouverture du gap s'effectue pour $\alpha \gtrsim \alpha_c$ comme $\Delta_s \propto \exp(-\text{const}/(\alpha - \alpha_c))$ et dans le cas limite où $J_2 \gg J_1$, un traitement en bosonisation donne [138] $\Delta_s \propto \exp(-\text{const}/\alpha)$. Pour des régimes de frustration intermédiaire ($0,4 \leq \alpha \leq 2$) des simulations numériques par DMRG (*Density Matrix Renormalization Group*) ont été effectuées sur des chaînes allant jusqu'à 200 sites [138]. Leur résultat pour le gap de spin est montré sur la figure III.10.

Par ailleurs, Il est aussi important de noter que au delà du point MG, les corrélations de spin ne sont plus commensurables [136, 138]. Un diagramme schématique résume les propriétés de la chaîne frustrée et dimérisée dans le plan (α, δ) sur la figure III.11.

⁹. Se placer au voisinage de $\alpha = 0,5$ est alors très avantageux du point de vue numérique car les effets de taille finie y sont très faibles.

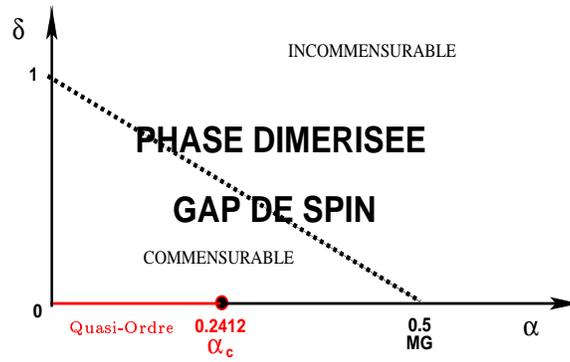


FIG. III.11 – Diagramme des phases schématisé de la chaîne frustrée et dimérisée $\alpha - \delta$. Pour $\delta = 0$, le quasi-ordre à longue portée est robuste tant que $\alpha \leq \alpha_c$. Au delà, une dimérisation de la chaîne apparaît, accompagnée par l'ouverture d'un gap dans le spectre. Le long de la droite de Shastry-Sutherland (ligne pointillée), le fondamental est décrit par l'état MG. À gauche de cette dernière, les corrélations sont commensurables alors qu'à droite elles sont incommensurables.

2 Introduction du désordre dans les modèles

La physique des systèmes désordonnés constitue un champ d'étude extrêmement riche de la physique de la matière condensée, tant du point de vue expérimental (voir le chapitre II) que du point de vue théorique. Les systèmes réels présentent en effet très souvent des imperfections et des impuretés. De tels défauts peuvent alors donner naissance à une physique totalement nouvelle. Le cas des systèmes magnétiques en constitue un très bel exemple comme nous allons le voir par la suite.

L'un des points cruciaux qui nous a permis d'appréhender les propriétés des chaînes de spins $\frac{1}{2}$ dans la section 1.2 de ce chapitre réside dans la périodicité du réseau, permettant notamment de se placer dans l'espace réciproque. L'introduction du désordre dans de tels réseaux cristallins en brise la périodicité et restreint alors les études théoriques à l'espace réel. Dans cette partie, nous nous concentrerons plus particulièrement sur deux aspects des systèmes magnétiques soumis au désordre : la chaîne XXZ de spins $\frac{1}{2}$ avec des couplages aléatoires et l'influence des impuretés non magnétiques dans des chaînes spin-Peierls. Une brève revue des résultats connus concernant ces systèmes est donnée, et servira de point d'ancrage à la présentation des travaux originaux de cette thèse, dans les chapitres IV, V et VI.

2.1 Chaînes de spins $\frac{1}{2}$ désordonnées

a) Faible désordre : Approche par la bosonisation

La chaîne XXZ [hamiltonien (III.6)] perturbée par différents type de désordres a été étudiée par Doty et Fisher [23] à l'aide des techniques de bosonisation, dans la limite où les termes aléatoires restent faibles. Deux cas ont été considérés, selon que le terme aléatoire préserve ou non la symétrie de rotation autour de l'axe de quantification du spin (O_z). Dans la suite nous ne nous intéressons qu'au cas où cette

symétrie n'est pas brisée. Trois types de perturbations peuvent alors être étudiées :

- L'échange aléatoire dans le plan XY

$$\delta\mathcal{H}_{XY} = \sum_i \delta J_{\perp}(i) (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y). \quad (\text{III.41})$$

- L'échange aléatoire selon (Oz)

$$\delta\mathcal{H}_{ZZ} = \sum_i \delta J_z(i) S_i^z S_{i+1}^z. \quad (\text{III.42})$$

- Le champ magnétique aléatoire selon (Oz)

$$\delta\mathcal{H}_Z = \sum_i h(i) S_i^z. \quad (\text{III.43})$$

Il est très important de noter que la forme de la distribution des variables aléatoires n'est pas une donnée pertinente. Un seul paramètre suffit à caractériser le désordre, nous le noterons \mathcal{D} . Il est défini comme le second moment de la variable aléatoire, ce qui donne par exemple pour le modèle (III.41)

$$\mathcal{D} = \overline{(J_{\perp}(i))^2} - \left(\overline{J_{\perp}(i)} \right)^2, \quad (\text{III.44})$$

où $J_{\perp}(i) = 1 + \delta J_{\perp}(i)$. L'échelle d'énergie du système a été volontairement posée égale à 1. Pour les trois types de perturbations (III.41-III.43), dans la limite du faible désordre $\mathcal{D} \ll 1$, la renormalisation de \mathcal{D} et du paramètre de Luttinger K sous un changement d'échelle $l = \ln L$ dans le système s'écrivent [23, 142]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial l} &= (3 - 2K)\mathcal{D}, \\ \frac{\partial K}{\partial l} &= -K^2 \frac{\mathcal{D}}{2}. \end{aligned} \quad (\text{III.45})$$

Notons que ces relations de récursion ont aussi été obtenues par Giamarchi et Schulz [143] pour le problème de la localisation à une dimension dans un potentiel aléatoire.

En se restreignant au régime où $-1 \leq \Delta \leq 1$ (i.e. $K \leq 1/2$), on voit que le désordre est pertinent si $K < 3/2$, ce qui correspond à $-1/2 < \Delta \leq 1$. Par contre dans la région où $-1 \leq \Delta \leq -1/2$, la renormalisation de \mathcal{D} sous un changement d'échelle est négative, ce qui indique que la phase quasi-ordonnée n'est pas immédiatement détruite pour $\mathcal{D} > 0$. L'analyse du flot de (III.45) conduit [23] à une parabole critique dans le régime d'anisotropie $\Delta \in [-1, -1/2]$ et à une ligne critique à $\mathcal{D} = 0$ pour $-1/2 < \Delta \leq 1$. D'un point de vue qualitatif, ce comportement est résumé schématiquement sur la figure III.12.

Bien que similaires quant à la renormalisation des paramètres K et \mathcal{D} , les effets du champ aléatoire et de l'échange aléatoire sont très différents eu égard aux phases qu'ils engendrent lorsque le désordre est pertinent. Un tel constat n'est pas surprenant dans le sens où la symétrie de réflexion qui transforme S^z en $-S^z$ n'est pas affectée par l'échange aléatoire alors qu'un champ magnétique la brise.

A ce stade de la réflexion, il est intéressant de re-considérer la chaîne XXZ sous l'œil fermionique, via la transformation de Jordan-Wigner. Alors que le terme planaire (III.41) peut être vu comme un terme de saut aléatoire, le champ aléatoire (III.43) renvoie au problème des fermions sans spin dans un potentiel aléatoire.

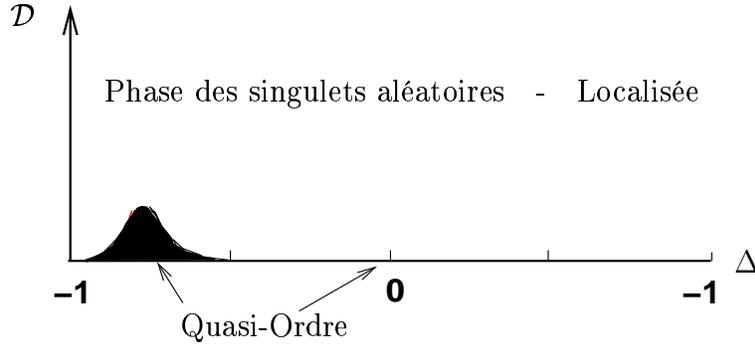


FIG. III.12 – Représentation schématique du diagramme des phases de la chaîne XXZ d'anisotropie Δ soumise à du désordre d'intensité D préservant la symétrie XY. Le quasi-ordre à longue distance existe dans la zone noire ainsi que le long de la ligne $D = 0$. Ailleurs la phase est dite des singulets aléatoires ou localisée.

I. EFFET D'UN CHAMP MAGNÉTIQUE ALÉATOIRE : PHASE LOCALISÉE

Le cas sans interaction $\Delta = 0$, introduit initialement en 1958 par Anderson dans un article de référence [144], a donné lieu par la suite à de nombreuses études, en partie résumées ou référencées dans [145, 142]. Partant d'un hamiltonien unidimensionnel de fermions sans spin possédant un terme de saut t constant et un terme d'énergie sur site $\epsilon(i)$ aléatoire, les fonctions d'ondes seront *localisées* dans l'espace quelle que soit la force du désordre $D_\epsilon \neq 0$. Autrement dit le système de fermions sera isolant, on parle d'isolant « d'Anderson »¹⁰. Dans le cas du hamiltonien de spins, l'appellation phase *localisée* est conservée et Klein et Perez [146] ont rigoureusement montré que la fonction de corrélation transverse, moyennée sur le désordre, décroît de façon exponentielle à $T = 0$,

$$C_{avg}^{+-}(r) = \overline{\langle S_i^+ S_{i+r}^- \rangle} \sim \exp(-r/\xi), \quad (\text{III.46})$$

où ξ est une longueur caractéristique, appelée *longueur de localisation*. La nature de la phase localisée pour $\Delta \neq 0$ n'est pas modifiée, comme l'ont confirmé diverses études numériques [147, 148].

II. EFFET DE L'ÉCHANGE ALÉATOIRE

Récrivons le hamiltonien XXZ avec échanges aléatoires sous sa forme générale

$$\mathcal{H}_{XXZ}^{\text{rand}} = \sum_{i=1}^L \left[J_{\perp}(i) (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + J_z(i) \Delta S_i^z S_{i+1}^z \right]. \quad (\text{III.47})$$

Contrairement au cas précédent où les inhomogénéités du potentiel sur site ont tendance à localiser les excitations, le désordre dans les couplages antiferromagnétiques aura pour effet de « geler » certaines paires de spins en singulets [149, 150].

10. Cette dénomination est à mettre en parallèle de l'isolant dit « de Mott » pour lequel la transition métal-isolant est induite par les interactions et s'accompagne de l'ouverture d'un gap alors que dans le cas d'Anderson c'est le désordre qui induit la transition, sans pour autant ouvrir de gap dans le spectre.

Une fois de plus, l'approche à $\Delta = 0$ est plus aisée et notamment, certains résultats exacts existent pour la densité d'états du problème fermionique [151, 152, 153]. Au niveau de Fermi elle diverge comme $\sim |\epsilon(\ln \epsilon)^3|^{-1}$ ce qui donne, dans le langage des spins, une susceptibilité uniforme qui diverge à basse température comme

$$\chi(T) \sim \frac{1}{T(\ln T)^2}. \quad (\text{III.48})$$

La longueur de localisation diverge aussi au niveau de Fermi [154, 152], ce qui entraîne que les fonctions de corrélation moyennes décroissent de façon algébrique à $T = 0$ comme

$$C_{avg}^\alpha(r) = \overline{\langle S_i^\alpha S_{i+r}^\alpha \rangle} \sim \frac{(-1)^r}{r^{\eta_{RSP}}}, \quad (\text{III.49})$$

où l'exposant $\eta_{RSP} = 2^{11}$ pour toutes les composantes $\alpha = x, y, z$. Un tel comportement est singulier car, comme nous le verrons plus loin, cette lente décroissance en loi de puissance n'est pas caractéristique d'un quasi-ordre [équation (III.20)] mais signale le fort couplage de certaines paires de spins en singulets à des distances arbitrairement grandes [23]. Cette phase, de nature assez étrange, est appelée *phase des singulets aléatoires*. Nous approfondirons ses propriétés d'ici quelques pages.

III. LONGUEUR CARACTÉRISTIQUE

La transition entre l'état quasi-ordonné, caractéristique du point fixe pur, et la phase où le désordre croît avec la renormalisation (voir la figure III.12) est une transition de phase quantique où l'on s'attend à ce qu'émerge une longueur caractéristique, divergente à l'approche du point critique.

Dans le cas de la chaîne de spins soumise à un champ aléatoire, Doty et Fisher ont identifié cette longueur comme étant la longueur ξ caractérisant la décroissance des corrélations transverses de spin, décrite par l'équation (III.46). Pour le cas de l'échange aléatoire, nous verrons dans le chapitre IV que cette longueur peut être vue comme une longueur de « *crossover* » contrôlant la transition entre la ligne XXZ de points fixes purs (répulsive) et le point fixe à fort désordre (attractif). Du point de vue fermionique, cette longueur est appelée longueur de localisation [93].

La divergence de ξ à la transition n'a pas la même forme à droite ou à gauche de $\Delta = -1/2$.

- (i) Si $-1/2 < \Delta < 1$, transition à $\mathcal{D}_c = 0$ si $-1/2 < \Delta < 1$:

$$\xi(\mathcal{D}) \sim \mathcal{D}^{-\frac{1}{3-2K}} \quad \text{pour } \mathcal{D} \rightarrow 0. \quad (\text{III.50})$$

- (ii) Si $-1 < \Delta < -1/2$, transition à $\mathcal{D}_c(\Delta)$, de type KT [96]:

$$\xi(\Delta) \sim \exp\left(\frac{\text{const}}{\sqrt{|\Delta - \Delta_c|}}\right) \quad \text{pour } \Delta \rightarrow \Delta_c. \quad (\text{III.51})$$

11. L'acronyme RSP fait référence à la phase des singulets aléatoires (*Random Singlet Phase*) [6].

b) Fort désordre : Renormalisation dans l'espace réel

I. UN BREF HISTORIQUE

Introduite à la fin des années 70 par Ma, Dasgupta et Hu [149, 150] pour traiter la chaîne antiferromagnétique XXX de spins $\frac{1}{2}$ avec des couplages aléatoires, la technique de renormalisation dans l'espace réel a ensuite été appliquée au cas XXZ [155]. Bhatt et Lee ont étendu cette méthode aux couplages à longue distance pour traiter le problème de l'interaction antiferromagnétique à longue portée de spins $\frac{1}{2}$ localisés dans des semi-conducteurs dilués [156]. Nous reviendrons plus tard sur cette approche qui nous a servi pour l'étude du comportement à basse température de systèmes spin-Peierls désordonnés (voir chapitre VI).

C'est un véritable tour de force qui fut réalisé par Fisher en 1994 en déterminant la solution exacte des équations de renormalisation dans l'espace réel pour la chaîne XXZ désordonnée [6]. Le point fixe a ainsi été identifié comme étant un *point fixe de désordre infini*, associé à la phase des singulets aléatoires. Forts de ce succès, de nombreux modèles magnétiques désordonnés ont ensuite fait l'objet d'investigations par cette méthode de décimation, la procédure subissant éventuellement quelques modifications selon les modèles. Citons par exemple la chaîne magnétique où les spins sont couplés par des constantes d'échanges aléatoirement ferromagnétiques ou antiferromagnétiques [27, 157, 158]; la chaîne de spins 1 désordonnée [159, 160, 161, 162, 163]¹²; les échelles de spins $\frac{1}{2}$ [167, 168]; la chaîne de spins $\frac{3}{2}$ [169, 170, 171, 172]; des modèles frustrés [173, 174].

II. LA TECHNIQUE POUR LA CHAÎNE DE SPINS $\frac{1}{2}$

Partant d'un hamiltonien isotrope de spins $\frac{1}{2}$ couplés aux premiers voisins par une interaction aléatoire $J(i) \geq 0$

$$\mathcal{H}^{\text{rand}} = \sum_{i=1}^L J(i) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}, \quad (\text{III.52})$$

l'ingrédient essentiel de la technique de renormalisation consiste en une décimation successive des plus forts couplages dans la chaîne. Illustrons ceci sur l'exemple d'un groupement de 4 spins, représenté sur la figure III.13. Le hamiltonien d'un tel système où $J_{23} \gg J_{12}, J_{34}$ s'écrit

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{4 \text{ spins}} &= J_{12} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + J_{23} \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3 + J_{34} \vec{S}_3 \cdot \vec{S}_4 \\ &\simeq J_{14}^{\text{eff}} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_4 + \text{const}, \end{aligned} \quad (\text{III.53})$$

avec

$$J_{14}^{\text{eff}} = \frac{J_{12} J_{34}}{2 J_{23}}, \quad (\text{III.54})$$

calculé en perturbation au second ordre. Le résultat de cette première étape de décimation est le suivant : les deux spins couplés le plus fortement au départ sont

¹². Notons qu'un débat existe autour du diagramme des phases de la chaîne de spins 1 désordonnée : voir [164, 165, 166]

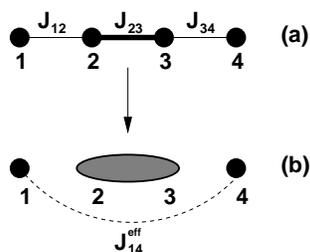


FIG. III.13 – Schéma de la décimation dans l'espace réel d'un ensemble de 4 spins. (a) Le couplage le plus fort, entre les spins 2 et 3 est décimé. → (b) Les spins 2 et 3 sont « gelés » en singulet et les spins 1 et 4 sont couplés via un couplage effectif J_{14}^{eff} .

gelés en un singulet et une interaction effective apparaît alors entre les spins voisins de ce singulet. Ce raisonnement peut alors être étendu sur une chaîne infinie [149, 150, 6].

On voit à travers (III.54) que la renormalisation produit de nouveaux couplages, plus faibles que les couplages originels. Fisher a démontré [6] l'existence d'un point fixe pour la distribution de ces couplages effectifs

$$\mathcal{P}_0(J^{\text{eff}}) \propto (J^{\text{eff}})^{-1+1/\delta}, \quad \delta \rightarrow \infty. \quad (\text{III.55})$$

Une telle distribution, très large, garantit que la procédure de renormalisation est asymptotiquement exacte étant donné que la décimation produit des couplages toujours plus petits, la condition nécessaire à la validité de l'approche perturbative $J_{23} \gg J_{12}, J_{34}$, est de mieux en mieux satisfaite à mesure que la renormalisation progresse.

La procédure de décimation successive des couplages peut aussi être vue comme une diminution de la température (ou de l'échelle d'énergie) du système. Cette dernière est donnée à chaque étape de renormalisation par le plus fort couplage n'ayant pas encore subi la décimation. A mesure que l'échelle d'énergie Ω diminue, les couplages survivants tendent de plus en plus vers la distribution d'équilibre (III.55) : le point fixe est qualifié de *point fixe de désordre infini* [6].

L'équation (III.54) peut être généralisée au cas de la chaîne anisotrope XXZ [155, 6]. Il est important de réaliser qu'une telle approche perturbative n'est valide que si le désordre est un paramètre pertinent (au sens du groupe de renormalisation de la section 2.1 a)). Par conséquent, la région du diagramme des phases de la figure III.12 où la phase ordonnée demeure robuste face au désordre, ne peut pas être analysée par la technique de décimation des couplages (voir à ce propos la note 14 de [6]).

III. PROPRIÉTÉS DE LA PHASE DES SINGULETS ALÉATOIRES

Au cours de la renormalisation, des paires de spins (pas nécessairement premiers voisins dans le réseau initial) se gèlent en singulets : la phase associée au point fixe de désordre infini est la phase des singulets aléatoires, dont nous allons maintenant rappeler les principales propriétés.

L'image physique que l'on peut associer à cette curieuse phase de dimères couplés à des distances arbitrairement grandes est représentée sur la figure III.14. Au cours



FIG. III.14 – Représentation schématique de la phase des singulets aléatoires où des liens singulets entre spins même très éloignés peuvent se former aléatoirement.

de la décimation, à mesure que l'échelle d'énergie Ω s'abaisse, la densité de spins $\frac{1}{2}$ qui demeurent encore libres décroît comme $(\ln \Omega)^{-2}$ [6]. Par conséquent la susceptibilité à basse température, donnée par la contribution des spins libres à la loi de Curie, est bien conforme à l'équation (III.48) donnant

$$\chi(T) \sim \frac{1}{T(\ln T)^2}.$$

La distance caractéristique entre deux spins non encore affectés par la renormalisation est donc $\sim (\ln \Omega)^2$, i.e. l'inverse de la densité de spins libres. Par conséquent, le gap de taille finie d'une chaîne de longueur L , $\Delta_\epsilon(L)$, est donné par

$$\ln \Delta_\epsilon \sim -\sqrt{L}. \quad (\text{III.56})$$

L'exposant dynamique au point fixe de désordre infini est donc formellement $z = \infty$.

Les fonctions de corrélation peuvent aussi être obtenues et méritent une attention particulière car elle traduisent la spécificité de la phase des singulets aléatoires. La fonction de corrélation de spin dite « moyenne » est dominée par les singulets couplés à longue distance et décroît donc lentement comme l'indique l'équation (III.49), $C_{avg}(r) \sim \frac{(-1)^r}{r^2}$, quelle que soit la direction. Si par contre l'on s'intéresse au comportement « typique » des corrélations de spin, la décroissance est beaucoup plus rapide :

$$C_{typ}^\alpha(r) = \exp\left(\overline{\ln |S_i^\alpha S_{i+r}^\alpha|}\right) \sim \exp(-A\sqrt{r}), \quad (\text{III.57})$$

où A est une constante non universelle. Une autre quantité, mesurant un ordre topologique dans la chaîne, est la fonction de corrélation dite de « string »¹³, définie à distance r par

$$S(r) = \frac{2^{r+1}}{L} \sum_{i=1}^L \langle S_i^z S_{i+1}^z \dots S_{i+r}^z \rangle. \quad (\text{III.58})$$

Dans la phase des singulets aléatoires, la moyenne sur le désordre de $S(r)$ est donnée par [176, 177]

$$S_{avg}(r) = \overline{S(r)} \propto \frac{(-1)^r}{r^{2-\phi}}, \quad (\text{III.59})$$

où $\phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ est le nombre d'or.

13. Très utilisée dans le cas des spins 1, pour caractériser l'ordre topologique [175].

2.2 Impuretés dans des systèmes de chaînes spin-Peierls

Dans le chapitre II, nous avons vu que le composé spin-Peierls CuGeO_3 exhibe un diagramme des phases extrêmement riche lorsqu'on le dope avec des impuretés statiques. A faible dopage, la coexistence entre l'état dimérisé et un ordre antiferromagnétique est un phénomène surprenant qui trouve son origine dans la formation de moments magnétiques effectifs localisés.

a) Effet d'une impureté non magnétique dans une chaîne dimérisée isolée

I. CHAÎNE FRUSTRÉE $J_1 - J_2$

Comme nous l'avons vu précédemment, la chaîne de spins $\frac{1}{2}$ frustrée, décrite par le hamiltonien $J_1 - J_2$ (III.38), est dans une phase critique, sans gap de spin, tant que $\alpha < \alpha_c \simeq 0.24$. Au delà de α_c , un gap s'ouvre dans le spectre et le système rentre dans une phase dimérisée avec un fondamental deux fois dégénéré. Au point MG, il est simplement donné par les états exacts $|\Phi_1\rangle$ et $|\Phi_2\rangle$ (voir les équations (III.39-III.40)).

L'introduction d'une impureté non magnétique dans la chaîne revient à remplacer un spin $\frac{1}{2}$ par un site inactif. Si le nombre de sites est pair (ce que nous supposons par la suite), un dimère est brisé et un spin $\frac{1}{2}$ est alors libéré dans la chaîne. Du fait de la dégénérescence double de son état fondamental, la chaîne MG ne favorise ni $|\Phi_1\rangle$ ni $|\Phi_2\rangle$; cela se traduit par une délocalisation du spin $\frac{1}{2}$, appelé aussi *soliton* [178]. L'image physique du soliton « déconfiné » est donnée sur la figure III.15.



FIG. III.15 – Représentation schématique du déconfinement du spin $\frac{1}{2}$ (\uparrow) libéré par l'impureté non magnétique (\circ) dans la chaîne MG. Les dimères, symbolisés en noir, représentent les états $|\Phi_1\rangle$ et $|\Phi_2\rangle$, de part et d'autre de l'impureté.

Par des calculs DMRG sur des chaînes MG ouvertes avec $L = 101$ spins, Sørensen *et al.* [178] ont clairement mis en évidence ce phénomène de déconfinement du soliton, comme le montre la figure III.16. L'introduction de deux impuretés dans une chaîne MG supporte le même type de raisonnement et le déconfinement se traduit alors par une recombinaison des spins $\frac{1}{2}$ libérés et par un gap de spin non affecté par le dopage [178, 130]. Un tel comportement est lié à la dégénérescence double de l'état fondamental qui permet aux dimères de s'adapter autour de l'impureté¹⁴.

¹⁴. Notons aussi qu'un phénomène analogue de gels de dimères autour de l'impureté, accompagné par le déconfinement d'un spin $\frac{1}{2}$, a récemment été observé à deux dimensions pour le modèle de Heisenberg sur le réseau Kagomé [179].

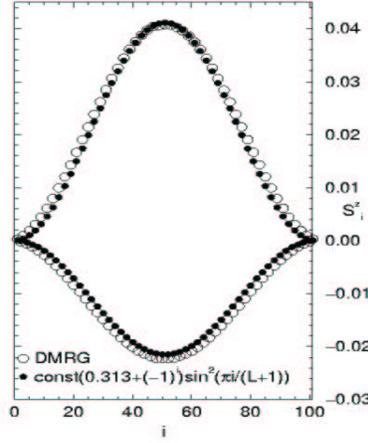


FIG. III.16 – Profil d’aimantation $\langle S_i^z \rangle$ de la chaîne MG avec une impureté non magnétique. Résultats obtenus en DMRG (\circ) dans le fondamental $S_{\text{total}}^z = \frac{1}{2}$ pour $L = 101$ spins + 1 impureté positionnée en $i = 0$ (ou $i = 102$) sont comparés avec le profil d’une onde stationnaire dans une boîte (\bullet), d’équation $\langle S_i^z \rangle = \text{const}(0.313 + (-1)^i) \times \sin^2(\pi i/(L+1))$. Figure extraite de Sørensen et al. [178].

II. RÔLE DE LA DIMÉRISATION RIGIDE

Le modèle MG dimérisé défini sur une chaîne ouverte de $L - 1$ spins $\frac{1}{2}$ (L étant un nombre pair) par

$$\mathcal{H}_{\text{MG-dim}} = \sum_{i=1}^{L-2} (1 + (-1)^i \delta) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^{L-2} \vec{S}_{i-1} \cdot \vec{S}_{i+1}, \quad (\text{III.60})$$

exhibe un comportement bien différent du cas précédent, et ce $\forall \delta \neq 0$ [178]. Le terme de modulation δ , qui trouve son origine physique dans le couplage élastique tridimensionnel entre les chaînes voisines, brise l’invariance par translation dans la chaîne et sélectionne un fondamental dimérisé unique (il est plus favorable de placer un dimère sur un lien fort $J(1 + \delta)$). Le spin $\frac{1}{2}$ libéré par l’impureté non magnétique reste alors localisé dans son voisinage afin de minimiser la région où les dimères s’établissent sur les liens faibles. Qualitativement, ce phénomène est illustrée par la figure III.17. Le fait d’éloigner le soliton de l’impureté non magnétique d’une



FIG. III.17 – Représentation schématique du confinement du spin $\frac{1}{2}$ (\uparrow) libéré par l’impureté non magnétique (\circ) dans la chaîne MG dimérisée. Les dimères couvrant les liens forts $J(1 + \delta)$ sont représentés en noir et les dimères quadrillés, couvrant les liens faibles $J(1 - \delta)$, représentent le « mauvais fondamental ». Le potentiel d’interaction entre l’impureté et le soliton est noté $V(r)$.

distance r engendre un coût en énergie $V(r)$ qui est proportionnel à la distance. Le soliton est ainsi confiné dans un demi-puits de potentiel linéaire dont la pente est proportionnelle à δ [180].

Les résultats numériques pour les profils d'aimantation obtenus par Sørensen *et al.* [178], avec $0,001 \leq \delta \leq 0,1$, sont représentés sur la figure III.18.

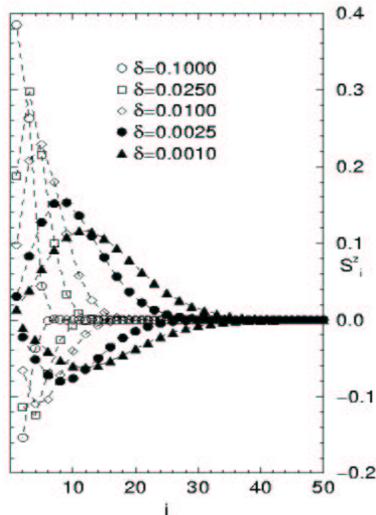


FIG. III.18 – Profil d'aimantation $\langle S_i^z \rangle$ de la chaîne MG explicitement dimérisée (III.60) avec $\delta \neq 0$. Résultats obtenus en DMRG pour $L = 51$ spins + 1 impureté positionnée en $i = 0$ (ou $i = 52$). Figure extraite de Sørensen *et al.* [178].

III. MODÈLE ADIABATIQUE : RÔLE DES PHONONS

Il est important de souligner que la modulation rigide δ des couplages aux premiers voisins ne prend pas en compte les distortions locales du réseau. Le premier pas vers une description permettant la relaxation du réseau, consiste à considérer le modèle unidimensionnel adiabatique suivant

$$\mathcal{H}_{\text{adiab}} = J \sum_i (1 + \delta_i) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \frac{K_{\parallel}}{2} \sum_i \delta_i^2, \quad (\text{III.61})$$

où K_{\parallel} est la constante de raideur du réseau. Les variables classiques δ_i sont déterminées par

$$J \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \rangle + K_{\parallel} \delta_i = 0, \quad (\text{III.62})$$

de façon à minimiser l'énergie du système.

Ce hamiltonien est en fait la limite classique d'un problème quantique plus général incluant des phonons à toutes fréquences. En effet, pour considérer rigoureusement le rôle des phonons, δ_i doit être remplacé par un terme de la forme $g(b_i^\dagger + b_i)$ où g est le couplage magnéto-élastique et l'opérateur b , bosonique, est relié à la création

et à la destruction des phonons. Néanmoins le cas adiabatique, qui sélectionne les phonons de basse fréquence, est une approximation raisonnable¹⁵.

La présence d'une impureté non magnétique dans la chaîne provoque de fortes distortions locales du réseau autour de l'impureté et, comme l'ont montré Hansen *et al.* [183], le soliton est déconfiné. Une importante dimérisation se forme alors autour de l'impureté (notons qu'elle serait certainement renforcée si un terme de frustration était ajouté au hamiltonien (III.61)), et ce afin de minimiser l'énergie élastique. Par suite, aucun état lié impureté-soliton ne se forme à une dimension [183, 120]. Par contre, la prise en compte des effets élastiques interchaînes change radicalement la situation et favorise l'apparition de moments localisés comme nous allons le voir maintenant.

b) Prise en compte des effets bidimensionnels

Motivés par le fait que le composé $\text{Cu}_{1-x}\text{M}_x\text{GeO}_3$ (M=Zn ou Mg) présente, à faible dopage x , des moments localisés s'ordonnant de façon antiferromagnétique dans un bain de dimères (voir la discussion des résultats expérimentaux dans la section 2 du chapitre II), la prise en compte des couplages interchaînes s'avère nécessaire. Dans cette optique, le hamiltonien bidimensionnel suivant a été étudié par Dobry *et al.* [184]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{2D}(\alpha, K_{\parallel}, K_{\perp}, J_{\perp},) = \sum_{i,a} & \left[(1 + \delta_{i,a}) \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a} + \alpha \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+2,a} \right. \\ & \left. + J_{\perp} \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i,a+1} + \frac{K_{\parallel}}{2} \delta_{i,a}^2 + K_{\perp} \delta_{i,a} \delta_{i,a+1} \right]. \end{aligned} \quad (\text{III.63})$$

L'échelle d'énergie a été fixée égale à 1, et les déplacements $\delta_{i,a}$ sont considérés comme des variables classiques.

Nous reviendrons aussi sur ce modèle dans le chapitre V à travers notamment les analogies qu'il présente avec le modèle purement magnétique étudié dans [131]. Qualitativement, le couplage transverse J_{\perp} a tendance à favoriser une phase antiferromagnétique alors que K_{\perp} tend plutôt à stabiliser la dimérisation. Dans la région du diagramme des phases (figure 1 de la référence [184]) où l'état est dimérisé, les distortions entre chaînes voisines sont en phase ou en opposition de phase suivant le signe de K_{\perp} [120]. Une telle corrélation entre les chaînes est à l'origine d'un potentiel attractif de confinement entre une impureté non magnétique et le spin $\frac{1}{2}$ libéré dans la chaîne.

Outre le profil d'aimantation qui permet d'observer le phénomène de confinement, on peut aussi calculer une aimantation alternée locale, définie par

$$\mathcal{M}_{i,a}^{\text{alt}} = \frac{1}{4} (-1)^{i+a} (2\langle S_{i,a}^z \rangle - \langle S_{i+1,a}^z \rangle - \langle S_{i-1,a}^z \rangle). \quad (\text{III.64})$$

La figure III.19 représente cette quantité, calculée par Dobry *et al.* en Monte Carlo quantique pour le hamiltonien (III.63) avec 1 impureté non magnétique introduite

¹⁵. Nous renvoyons le lecteur intéressé par ces problématiques à la thèse de David Augier [120] ainsi qu'aux travaux [181, 182].

dans un système de 8 chaînes de 40 sites, couplées en champ moyen. Les paramètres élastiques et le couplage transverse J_{\perp} ayant été choisis de façon réaliste par rapport à CuGeO_3 [35, 185]. On voit qu'un excès d'aimantation antiferromagnétique est loca-

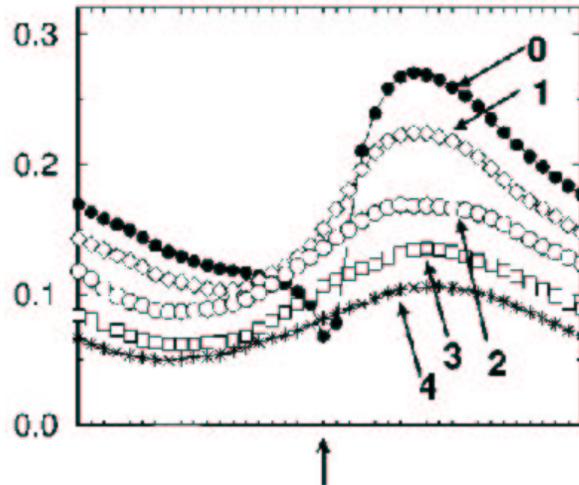


FIG. III.19 – Aimantation locale alternée $\mathcal{M}_{i,a}^{\text{alt}}$ d'un système de 8 chaînes de 40 sites couplées, gouvernées par le hamiltonien (III.63) avec $\alpha = 0$, $K_{\parallel} = 2,4$, $K_{\perp} = 0,2$ et $J_{\perp} = 0,1$. L'impureté non magnétique, repérée par (\uparrow), se situe au centre de la chaîne notée 0 (\bullet). L'aimantation alternée est montrée pour la chaîne dopée ainsi que pour les chaînes voisines notées 1, 2, 3 et 4 (représentées par les différents symboles). Résultats d'un calcul Monte Carlo quantique extraits de la référence [184].

lisé au voisinage de l'impureté. De plus, de fortes corrélations interchaînes ont pour effet d'étendre le nuage de polarisation antiferromagnétique aux chaînes voisines. Un tel modèle, incluant les effets bidimensionnels, est réaliste quant aux problématiques expérimentales soulevées par le composé CuGeO_3 . Pour une gamme de paramètres physiquement pertinents, il possède un état fondamental dimérisé et de plus, son comportement face au dopage en impuretés non magnétiques est extrêmement intéressant dans le sens où un moment magnétique localisé au voisinage de l'impureté est observé, ainsi qu'une mise en ordre antiferromagnétique à $T = 0$ [184]. Pourtant le rôle joué par la frustration dans la chaîne, impossible à prendre en compte dans les calculs Monte Carlo quantiques, est sans doute très important. Une autre question concerne aussi le rôle du couplage magnétique interchaîne J_{\perp} dans le mécanisme de confinement. Ce sont de telles interrogations qui ont motivé l'étude d'un modèle purement magnétique [131] que nous expliciterons en détails dans le chapitre V.

3 Méthodes numériques

3.1 Introduction

Quelques rares hamiltoniens de systèmes fortement corrélés (essentiellement à une dimension) ont la particularité d'admettre un traitement analytique, permettant notamment d'accéder aux propriétés de basse énergie. Pourtant, une description détaillée des composés expérimentaux nécessite d'aller au delà de tels hamiltoniens modèles, et une bonne compréhension des systèmes électroniques fortement corrélés requiert donc le plus souvent une approche numérique.

En ce qui concerne les problèmes de magnétisme, et plus particulièrement de spins en interaction, trois principales méthodes existent, chacune possédant ses propres avantages et inconvénients. La première est appelée la *diagonalisation exacte* qui, comme son nom l'indique, consiste à résoudre *exactement* un problème aux valeurs propres. A priori applicable à tout type de problème de mécanique quantique, elle est cependant limitée par la taille des matrices à diagonaliser ; nous l'aborderons dans la section 3.2. La section 3.3 sera consacrée à la méthode de *Monte Carlo quantique*, dans sa version SSE (pour *Stochastic Series Expansion*). Beaucoup moins limitée par la taille des systèmes que la diagonalisation exacte, elle souffre néanmoins du fameux *problème de signe* qui la restreint à l'étude de hamiltoniens non frustrés. La troisième technique est la méthode DMRG (pour *Density Matrix Renormalization Group*) que nous ne traiterons pas ici. En quelques mots toutefois, elle s'appuie sur la diagonalisation exacte de petits systèmes, couplée aux principes du groupe de renormalisation. Développée par White au début des années 90 [186, 187], son champ d'application est varié, comprenant aussi bien les systèmes frustrés que désordonnés et permettant d'accéder à de grandes tailles. Cependant, les calculs DMRG sont restreints aux propriétés de systèmes essentiellement unidimensionnels avec des conditions aux bords ouvertes.

D'autres méthodes moins conventionnelles ont vu le jour ces dernières années. Par exemple, la méthode CORE (pour *Contractor Renormalization*) [188] consiste à construire des hamiltoniens effectifs en appliquant successivement des changements d'échelles dans l'espace réel. Ceci permet d'accéder à des tailles supérieures à celles disponibles en diagonalisation exacte, et la méthode n'est à priori pas restreinte à des problèmes à une dimension comme le DMRG, ou non frustrés comme le Monte Carlo quantique. Nous renvoyons le lecteur intéressé aux travaux récents [189, 190, 191] où cette méthode a été appliquée avec succès. Dans un même esprit de renormalisation dans l'espace réel, les systèmes de spins désordonnés peuvent être étudiés à l'aide d'une approche reprenant les idées développées par Fisher [6] pour la chaîne de spins $\frac{1}{2}$ avec couplages aléatoires (voir la section 2.1 b) de ce chapitre). Nous détaillerons cette technique dans le chapitre VI, à travers l'étude d'un modèle effectif désordonné de spins $\frac{1}{2}$ en interaction à longue portée, aléatoirement ferromagnétique ou antiferromagnétique [192].

3.2 Diagonalisation exacte

Dans un article de référence datant de 1964, Bonner et Fisher [8] ont, en quelque sorte, inauguré la diagonalisation exacte numérique par le calcul fort célèbre¹⁶ de la dépendance en température de la susceptibilité magnétique d'une chaîne de 11 spins $\frac{1}{2}$. Par la suite, le succès de cette méthode fut intimement lié au développement spectaculaire de la puissance des ordinateurs ainsi qu'à son caractère fondamentalement exact.

Le problème aux valeurs propres posé par l'équation de Schrödinger

$$\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (\text{III.65})$$

pour un système quantique de taille finie requiert la diagonalisation de la matrice de l'opérateur $\hat{\mathcal{H}}$ exprimé dans une certaine base. Le plus souvent, on ne s'intéresse qu'aux propriétés de basse énergie des modèles, ce qui restreint les études au bas du spectre. Dans un tel contexte, l'algorithme de Lanczos [193] est très efficace, surtout dans le cas de systèmes en interaction à courte portée, se traduisant par des matrices à diagonaliser très creuses.

a) Méthode de Lanczos

Durant cette thèse, les programmes de diagonalisation exacte par la méthode de Lanczos utilisés, sont des adaptations de codes initialement écrits par Didier Poilblanc. Pour plus de détails on pourra consulter les revues [194, 195, 196].

I. UTILISATION DES SYMÉTRIES

Le principe de base consiste à écrire la matrice de $\hat{\mathcal{H}}$ dans un certain secteur de symétrie. Prenons comme exemple un anneau périodique de L spins $\frac{1}{2}$ interagissant via le hamiltonien de Heisenberg frustré et dimérisé suivant

$$\mathcal{H}(\alpha, \delta) = \sum_{i=1}^L (1 + (-1)^i \delta) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \alpha \sum_{i=1}^L \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2}. \quad (\text{III.66})$$

La dimension de l'espace de Hilbert total est $d_{\text{H}}^{\text{total}} = 2^L$. Néanmoins il est possible de réduire de façon conséquente cette taille en utilisant les symétries du système. Pour $L = 36$ sites, $d_{\text{H}}^{\text{total}} \simeq 6,9 \times 10^{10}$ ce qui est manifestement trop important pour les machines de calculs actuelles. Cependant il est très profitable de se placer dans un secteur de S_{total}^z donné : par exemple dans le secteur où $S_{\text{total}}^z = 0$, la dimension devient $\frac{36!}{18!18!} \sim 9 \times 10^9$. Ensuite, en fonction des symétries de la chaîne on peut diagonaliser le hamiltonien dans des sous-espaces encore plus réduits, de dimension d_{H}^r valant typiquement la dimension totale du secteur de S_{total}^z donné, divisée par le nombre de symétries. Le tableau III.1 résume ces caractéristiques pour le hamiltonien (III.66) avec ou sans impureté. Techniquement, la présence d'une impureté dans la chaîne a des conséquences facheuses car les symétries de translation disparaissent.

Dans cette thèse, les problématiques qui ont été abordées par la technique de Lanczos ont concerné l'effet des impuretés non magnétiques, prohibant malheureusement l'utilisation de la plupart des symétries d'espace.

¹⁶ Cet article compte, début 2004, plus de 1500 citations.

$\alpha, \delta, \text{ impureté}$	Symétries	d_H^r dans $S_{\text{total}}^z = 0$ et $k = 0$
$\forall \alpha, \delta = 0, 0 \text{ imp.}$	$T_{36} \otimes C_2 \otimes I_2$	$\sim 6,3 \times 10^6$
$\forall \alpha, \delta \neq 0, 0 \text{ imp.}$	$T_{18} \otimes C_2 \otimes I_2$	$\sim 1,3 \times 10^7$
$\forall (\alpha, \delta), 1 \text{ imp.}$	I_2	$\sim 2,3 \times 10^9$

TAB. III.1 – Groupes de symétries et tailles des espaces de Hilbert réduits pour une chaîne de spins $\frac{1}{2}$, frustrée et dimérisée (III.66), avec ou sans impureté non magnétique. La taille typique de l'espace de Hilbert réduit d_H^r est calculée dans le secteur $S_{\text{total}}^z = 0$ et d'impulsion $k = 0$ pour des chaînes de $L = 36$ sites. T_N et I_2 représentent respectivement les translations à N éléments et l'inversion de spin. C_2 est la réflexion par rapport au centre de la chaîne .

II. ALGORITHME

L'algorithme de Lanczos [193] utilise le fait que l'on ne s'intéresse qu'au bas du spectre de matrices très creuses. Partant d'un vecteur de la base de travail (par exemple la base des états de $S_{\text{total}}^z = 0$), aléatoire $|\phi_1\rangle$, on lui applique successivement \mathcal{H} , ce qui donne

$$\mathcal{H}|\phi_1\rangle = \alpha_1|\phi_1\rangle + \beta_1|\phi_2\rangle, \quad (\text{III.67})$$

où $|\phi_2\rangle$ est orthogonal à $|\phi_1\rangle$ et de norme unité. Puis

$$\mathcal{H}|\phi_2\rangle = \beta_1|\phi_1\rangle + \alpha_2|\phi_2\rangle + \beta_2|\phi_3\rangle, \quad (\text{III.68})$$

avec $|\phi_3\rangle$ normé et orthogonal à $|\phi_1\rangle$ et à $|\phi_2\rangle$. On arrive ensuite à la loi récurrente pour $n > 1$

$$\mathcal{H}|\phi_n\rangle = \beta_{n-1}|\phi_{n-1}\rangle + \alpha_n|\phi_n\rangle + \beta_{n+1}|\phi_{n+1}\rangle, \quad (\text{III.69})$$

avec $|\phi_{n+1}\rangle$ normé et orthogonal à tous les $|\phi_i\rangle$ ($i = 1, \dots, n$).

Le hamiltonien est en fait réécrit dans une base tronquée où il prend la forme matricielle tridiagonale suivante :

$$M = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & \beta_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ 0 & \cdots & 0 & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}. \quad (\text{III.70})$$

Les valeurs propres extrémales de M convergent vers celles de \mathcal{H} , exponentiellement avec le nombre d'itérations Lanczos n [197]. Typiquement, $n \simeq 100$ itérations suffisent à obtenir l'énergie du fondamental d'une chaîne de Heisenberg avec une précision de 10^{-8} .

b) Application aux systèmes magnétiques frustrés

Un des champs d'applications de cette méthode numérique concerne les systèmes magnétiques frustrés, pour lesquels le Monte Carlo quantique ne peut être utilisé [198]. Nous donnons dans la suite deux exemples, tous deux sur le modèle $J_1 - J_2$ à une dimension.

I. DÉTERMINATION DU α_c POUR LA CHAÎNE $J_1 - J_2$

Comme discuté précédemment, dans la section 1.3 b) de ce chapitre, on sait qu'une valeur critique de la frustration sépare une phase quasi-ordonnée, d'une phase dimérisée possédant un gap singulet-triplet non nul. La localisation de α_c est néanmoins assez ardue car l'ouverture du gap s'y effectue très lentement [141, 91]. La méthode développée par Emery et Noguera [199] consiste à repérer en fonction de α le croisement entre les deux plus basses excitations pour une taille L donnée, ce croisement s'effectuant à $\alpha_c(L)$. La loi d'échelle attendue est de la forme $\alpha_c(L) - \alpha_c \sim 1/L^2$ [199], comme l'illustre la figure III.20. La valeur extrapolée $\alpha_c \simeq 0.2412$ est conforme aux meilleures estimations que l'on peut trouver dans la littérature [139, 136, 140].

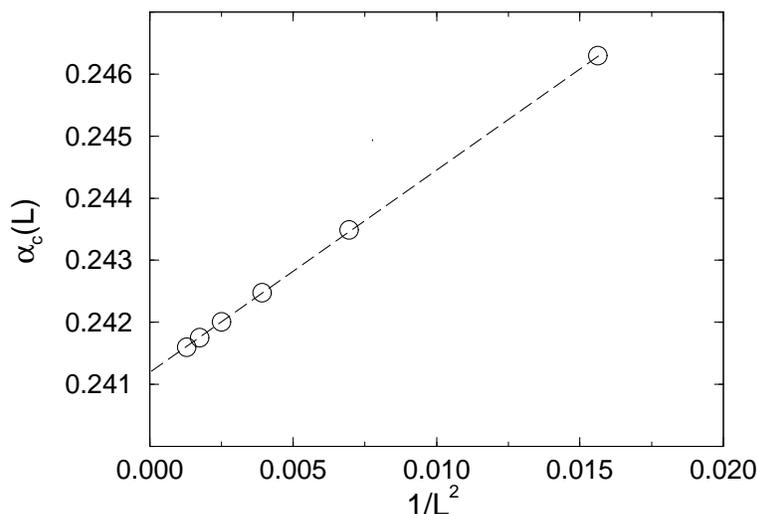


FIG. III.20 – Valeur critique $\alpha_c(L)$ de la frustration en fonction de $1/L^2$, calculée par diagonalisations exactes pour $L = 8, 12, 16, 20, 24, 28$ avec la méthode de croisement des niveaux développée dans [199]. Figure extraite de la référence [120].

II. IMPURETÉS NON MAGNÉTIQUES DANS LA CHAÎNE $J_1 - J_2$

Une impureté non magnétique, introduite dans la chaîne $J_1 - J_2$, libère un soliton déconfiné (voir la figure III.16). Dans le cas à plusieurs impuretés, la chaîne frustrée ne présente pas de moment effectif au voisinage des impuretés, les spins $\frac{1}{2}$ libérés se recombinaient en singulet [178, 130]. Ce phénomène est mis en évidence par un calcul en diagonalisations exactes, effectué sur une chaîne MG de $L = 20$ sites avec 2 impuretés non magnétiques. Les corrélations aux plus proches voisins ont été déterminées numériquement (voir la figure III.21) et l'oscillation de $\langle \vec{S}_{i-1} \cdot \vec{S}_i \rangle$ entre les valeurs $\simeq 0$ et $\simeq -0.75$ montre clairement que les dimères $|\Phi_1\rangle$ et $|\Phi_2\rangle$ [équations (III.39-III.40)] s'établissent de part et d'autre des impuretés, empêchant ainsi la formation de moments localisés.

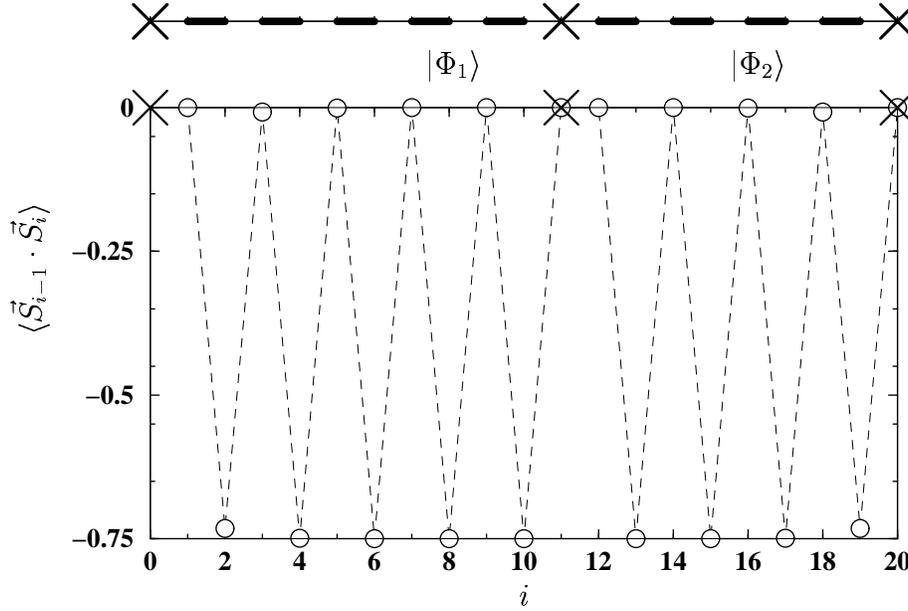


FIG. III.21 – Calcul par la méthode de Lanczos des corrélations aux plus proches voisins $\langle \vec{S}_{i-1} \cdot \vec{S}_i \rangle$ dans la chaîne MG de $L = 20$ sites, avec 2 impuretés, repérées par (\times), situées en $i = 11$ et $i = 20$ ($i = 0$). En haut de la figure, la formation des dimères de type $|\Phi_1\rangle$ et $|\Phi_2\rangle$ est schématisée.

III. AUTRES APPLICATIONS

La compréhension de l'effet des impuretés non magnétiques dans les systèmes de chaînes spin-Peierls est l'une des thématiques centrales de cette thèse. Le rôle joué par les couplages magnétiques interchaînes sur la formation de moments effectifs localisés sera analysé dans le chapitre V à l'aide de la méthode de Lanczos, couplée à un champ moyen auto-cohérent. Nous y expliciterons en détail les problématiques liées à la convergence de cette méthode numérique qui nous a permis d'accéder, dans la limite de validité du champ moyen, à des systèmes allant jusqu'à 128 spins $\frac{1}{2}$.

3.3 Monte Carlo quantique

Les méthodes de Monte Carlo quantique constituent, depuis les travaux de Metropolis en 1953 [200], un outil de référence pour simuler de nombreux problèmes classiques ou quantiques de spins en interaction¹⁷. Le principe de ces techniques repose sur une marche aléatoire dans l'espace des configurations d'un système donné, le but étant d'en échantillonner la fonction de partition en ne retenant que les configurations les plus significatives. Dans ce qui suit nous donnons un bref exposé de la technique SSE (*Stochastic Series Expansion*) qui a été employée dans cette thèse pour traiter le hamiltonien de Heisenberg de spins $\frac{1}{2}$ couplés aux plus proches voisins (III.47). Une version plus avancée, considérant des interactions magnétiques à

¹⁷. Voir notamment le compte-rendu de la conférence célébrant le cinquantième anniversaire de l'algorithme de Metropolis [201].

longue portée (non frustrantes), a aussi été utilisée en collaboration avec Anders Sandvik ; les détails algorithmiques relatifs à cette méthode sont disponibles dans [202]. Le lecteur intéressé par les méthodes de Monte Carlo quantique pourra par ailleurs consulter les très nombreuses revues existant sur ce sujet ; nous en donnons ici un petit échantillon [203, 60, 204, 201].

a) Principes de la technique SSE

I. INTRODUCTION

Développée par Sandvik au début des années 90 [205], la technique SSE s'est rapidement affirmée comme étant une méthode de choix pour traiter des hamiltoniens de spins non frustrés. En comparaison avec son « concurrent » l'algorithme de boucle *world line* [203], l'algorithme SSE est certainement plus simple à utiliser car il travaille exclusivement avec des nombres entiers. De plus, dans le cas de systèmes soumis à des champs magnétiques externes, le SSE est nettement plus performant que l'algorithme de boucle qui souffre de ralentissement critique [206].

Partant du modèle XXZ avec couplages aléatoires, on peut récrire le hamiltonien (III.47) comme la somme de deux termes, un diagonal et un non diagonal :

$$\mathcal{H}_{\text{XXZ}}^{\text{rand}} = - \sum_{b=1}^L \left[J_z(b) H_{1,b} - J_{\perp}(b) H_{2,b} \right], \quad (\text{III.71})$$

où b définit un lien connectant une paire $(i(b), j(b))$ de spins en interaction. La partie diagonale de (III.71) s'écrit

$$H_{1,b} = C - \Delta S_{i(b)}^z S_{j(b)}^z, \quad (\text{III.72})$$

et la non diagonale est donnée par

$$H_{1,b} = \frac{1}{2} [S_{i(b)}^+ S_{j(b)}^- + S_{i(b)}^- S_{j(b)}^+]. \quad (\text{III.73})$$

La base de travail est $\{|\alpha\rangle\} = \{|S_1^z, S_2^z, \dots, S_L^z\rangle\}$ et la constante C rajoutée au terme diagonal dans (III.72) joue juste le rôle d'un décalage dans les énergies, permettant ainsi de rendre tous les éléments de matrice non nuls positifs. La technique s'appuie sur le développement en série de Taylor de la fonction de partition, en puissances de β :

$$Z = \text{Tr} \left[\exp(-\beta \mathcal{H}_{\text{XXZ}}^{\text{rand}}) \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \text{Tr} \left[\mathcal{H}_{\text{XXZ}}^{\text{rand}} \right]^n. \quad (\text{III.74})$$

Le développement s'effectue en principe jusqu'à $n \rightarrow \infty$, mais on va voir qu'il est réaliste d'introduire une coupure \mathcal{M} dans la somme.

L'énergie moyenne d'un système de taille L est, dans cette formulation, simplement donnée par

$$E = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = - \frac{1}{\beta} \langle n \rangle + LC. \quad (\text{III.75})$$

Ceci nous donne en fait une idée du comportement de la valeur moyenne $\langle n \rangle$ du nombre de termes contribuant à la somme dans (III.74) : $\langle n \rangle \sim \beta L$. Comme nous

le verrons plus loin, la coupure \mathcal{M} est une quantité dynamique dans les simulations (ajustée durant la phase de thermalisation), ce qui nous assure que les termes du développement pour $n > \mathcal{M}$ ne contribuent pas à la fonction de partition.

La trace (III.74) se calcule dans la base $\{|\alpha\rangle\}$:

$$Z = \sum_{\alpha} \sum_{S_{\mathcal{M}}} \frac{\beta^n (\mathcal{M} - n)!}{\mathcal{M}!} \left\langle \alpha \left| \prod_{i=1}^{\mathcal{M}} J_{a_i}(b_i) H_{a_i, b_i} \right| \alpha \right\rangle, \quad (\text{III.76})$$

où $S_{\mathcal{M}}$, notée

$$S_{\mathcal{M}} = [a_1, b_1], [a_2, b_2], \dots, [a_{\mathcal{M}}, b_{\mathcal{M}}], \quad (\text{III.77})$$

sert à repérer une suite d'opérateurs considérés dans le produit. L'indice $a_i = 1, 2$ correspond au type de l'opérateur (diagonal ou pas) et $b_i = 1, 2, \dots, L$, repère le lien sur lequel l'opérateur agit. Il est important de remarquer qu'une séquence de longueur \mathcal{M} ne contient pas \mathcal{M} opérateurs de type 1 ou 2, mais seulement $n < \mathcal{M}$; $\mathcal{M} - n$ opérateurs identité \mathbb{I} étant insérés dans la séquence afin de gonfler artificiellement sa taille. L'insertion de ces opérateurs peut se faire de diverses manières : il y a $C_{\mathcal{M}}^{\mathcal{M}-n}$ possibilités dont nous avons tenu compte dans l'écriture (III.76) de Z . Notons aussi qu'un opérateur identité est noté dans $S_{\mathcal{M}}$ par $[0, 0]$.

Une configuration Monte Carlo est donnée par un état $|\alpha\rangle$ et une séquence $S_{\mathcal{M}}$. L'action successive des opérateurs de la séquence sur l'état $|\alpha\rangle$ définit alors une *propagation*, repérée par un indice p , l'état propagé étant $|\alpha(p)\rangle \sim \prod_{i=1}^p H_{a_i, b_i} |\alpha\rangle$. Notons aussi que la cyclicité de la trace impose que $|\alpha(\mathcal{M})\rangle = |\alpha(0)\rangle = |\alpha\rangle$.

II. ALGORITHME SSE

Les conditions initiales d'une simulation SSE sont données par un état de départ $|\alpha\rangle_{\text{init}}$, aléatoire, et une séquence, de longueur \mathcal{M} , d'opérateurs identités $S_{\mathcal{M}} = [0, 0], \dots, [0, 0]$. La simulation s'effectue à une température $T = 1/\beta$. La marche aléatoire dans l'espace des configurations est ensuite contrôlée par une certaine loi de probabilité, via une série de deux mouvements principaux. Le premier, appelé *mouvement diagonal*, consiste à proposer d'échanger les opérateurs identités et diagonaux $[0, 0]_p \longleftrightarrow [1, b]_p$, les uns après les autres. Le second mouvement est non local, car il s'appuie sur la construction d'une boucle d'opérateurs [207], le long de laquelle les opérateurs diagonaux et non diagonaux sont éventuellement échangés $[1, b]_p \longleftrightarrow [2, b]_p$: c'est le *mouvement de boucle*.

i) Mouvement diagonal

C'est le plus simple : à chaque indice p de propagation, on regarde le type d'opérateur y agissant. Si le type est 2 (non diagonal) il ne se passe rien ; si c'est 1 on propose le mouvement $[1, b]_p \rightarrow [0, 0]_p$ qui sera accepté avec la probabilité de Metropolis [205]

$$\mathcal{P}([1, b]_p \rightarrow [0, 0]_p) = \min \left[1, \frac{\mathcal{M} - n + 1}{J_z(b) L \beta \langle \alpha(p) | H_{1, b} | \alpha(p) \rangle} \right]. \quad (\text{III.78})$$

En revanche si l'opérateur rencontré à l'indice p est de type 0 (identité), le mouvement $[0,0]_p \rightarrow [1,b]_p$ est alors proposé, toujours selon une probabilité de Metropolis

$$\mathcal{P}([0,0]_p \rightarrow [1,b]_p) = \min \left[1, \frac{J_z(b)L\beta \langle \alpha(p) | H_{1,b} | \alpha(p) \rangle}{\mathcal{M} - n} \right]. \quad (\text{III.79})$$

Notons que ces lois de transition vérifient bien le bilan détaillé [205].

Lors du mouvement, le nombre n d'opérateurs non identité peut varier à chaque indice de propagation. C'est une variable très importante car elle permet d'accéder à l'énergie [équation (III.75)]; et l'on peut aussi contrôler grâce à elle la coupure \mathcal{M} imposée dans le développement. Nous avons donc fixé un critère dans nos simulations: dès que $n > 0,8 \times \mathcal{M}$, la coupure est réajustée telle que $\mathcal{M} \mapsto n \times 1,25$. La figure III.22 illustre ce fait. Afin d'atteindre une configuration Monte Carlo équilibrée avant d'effectuer les mesures proprement dites, il conviendra donc de vérifier que la thermalisation est bien achevée.

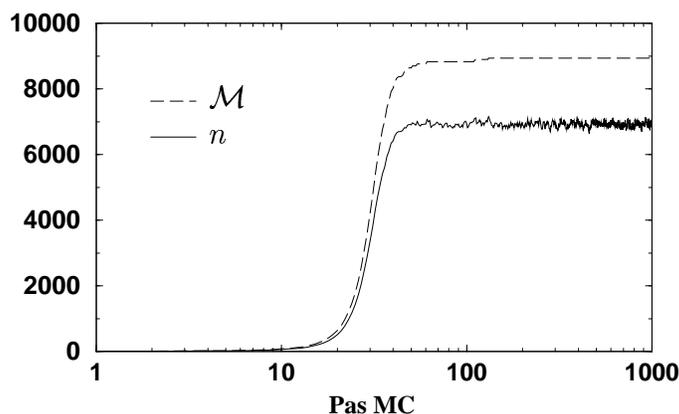


FIG. III.22 – Evolution du nombre n d'opérateurs non identité (ligne pleine) et coupure \mathcal{M} (ligne brisée) en fonction du nombre de pas Monte Carlo pour une chaîne XXX pure de $L = 100$ spins $\frac{1}{2}$ à $\beta = 100$.

ii) Mouvement de boucle

L'étape suivante est le mouvement non diagonal dit *de boucle* qui opère à n constant. Son but est d'effectuer la substitution $[1,b]_p \longleftrightarrow [2,b]_p$ de façon non locale. Proposé par Sandvik [207], un algorithme de boucle performant permet d'effectuer un très grand nombre de mouvements non diagonaux à la fois. La construction de la boucle, discutée en détail par Syljuåsen et Sandvik [204], est complètement déterministe au point antiferromagnétique SU(2) dans le sens où chaque boucle est construite de façon unique. Par conséquent, pour $\Delta = 1$ toutes les boucles sont mises à jour indépendamment, avec probabilité 1/2. Si $\Delta \neq 1$ la construction d'une boucle dépend de probabilités bien définies [204] à chaque fois qu'un opérateur non identité est rencontré.

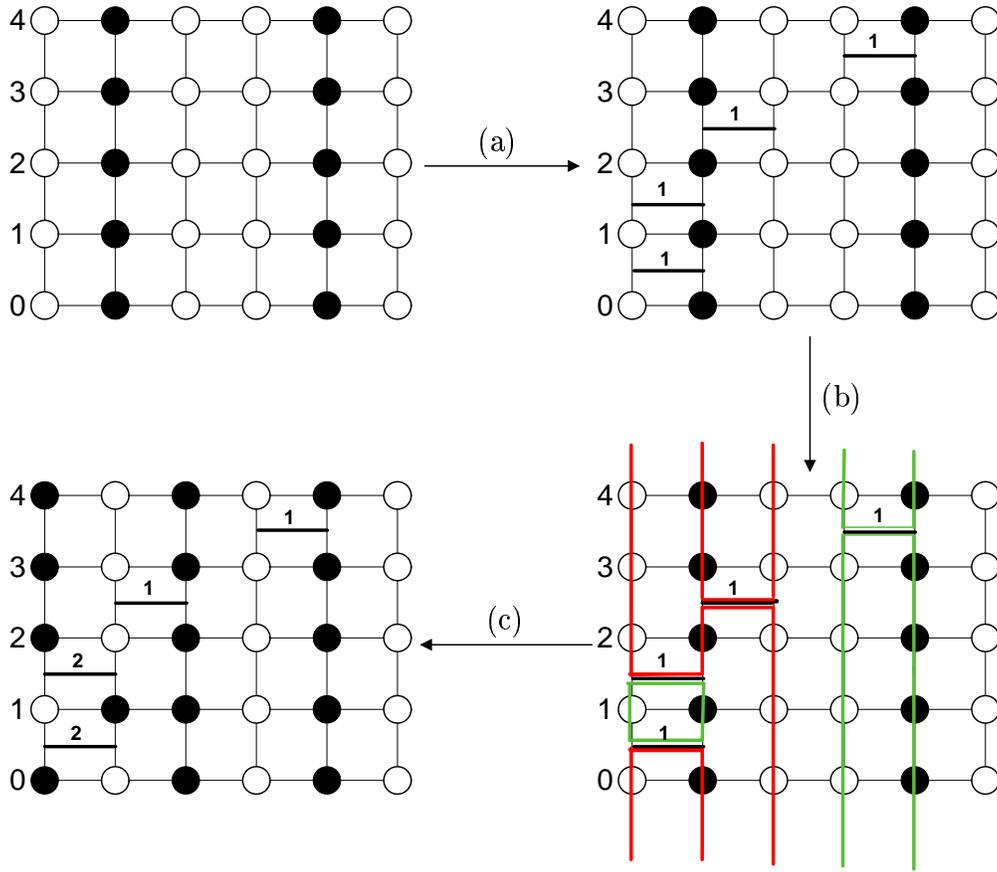


FIG. III.23 – Exemple du déroulement d'un pas Monte Carlo SSE sur une chaîne de 6 spins $\frac{1}{2}$. La configuration \uparrow est symbolisé par \bullet et \downarrow par \circ . Au départ, en haut à gauche, l'état est $|\alpha(0)\rangle = |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$ et il n'y a que des opérateurs identités: $S_{\mathcal{M}=4} = [0,0],[0,0],[0,0],[0,0]$. (a) Le premier mouvement diagonal génère les opérateurs diagonaux de type 1. (b) Construction de toutes les boucles. (c) Seule la boucle rouge a été retournée: un spin traversé par la boucle est retourné et un opérateur est transformé $1 \rightarrow 2$ ou $2 \rightarrow 1$ chaque fois qu'une boucle le rencontre. La nouvelle configuration est $|\alpha(0)\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$ et $S_{\mathcal{M}=4} = [2,1],[2,1],[1,2],[1,4]$. L'étape suivante consisterait à agrandir l'espace dans la direction de propagation: $\mathcal{M} = 5$, et à recommencer un mouvement diagonal.

Dans le travail présenté dans la suite, les simulations SSE ont été effectuées au point isotrope $\Delta = 1$ où la constante C est prise égale à $1/4$. Enfin, pour résumer les différentes étapes qui constituent un pas Monte Carlo, un exemple à 6 spins est présenté sur la figure III.23.

III. OBSERVABLES

La méthode SSE sert à échantillonner la fonction de partition Z . Bien que cette dernière ne soit pas directement calculable lors des simulations, de nombreuses observables physiques sont accessibles, la moyenne statistique sur l'ensemble des configurations Monte Carlo d'un opérateur \mathcal{O} étant notée par $\langle \mathcal{O} \rangle$.

i) Énergie

La plus simple des quantités est l'énergie, donnée par l'équation (III.75). De cette dernière découle la chaleur spécifique qui vaut

$$C_v = -\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 - \langle n \rangle. \quad (\text{III.80})$$

ii) Facteurs de structure

Dans la base de travail $\{|\alpha\rangle\} = \{|S_1^z, S_2^z, \dots, S_L^z\rangle\}$, les opérateurs diagonaux sont faciles à déterminer. Par exemple le facteur de structure ferromagnétique, au vecteur d'onde $\mathbf{q}_F = 0$, est très simple à calculer car au cours d'un pas Monte Carlo, l'aimantation totale est conservée lors de la propagation de $p = 0$ à \mathcal{M} . Par conséquent, il suffit d'évaluer l'aimantation totale sur l'état initial à $p = 0$: on trouve

$$S(\mathbf{q}_F) = \frac{1}{L} \left\langle \alpha(0) \left| \left(\sum_{i=1}^L S_i^z \right)^2 \right| \alpha(0) \right\rangle \quad (\text{III.81})$$

(où $\langle \dots \rangle$ représente la valeur moyenne prise sur toutes les configurations Monte Carlo), et pour l'aimantation moyenne par site

$$m_F = \frac{1}{L} \left\langle \alpha(0) \left| \left(\sum_{i=1}^L S_i^z \right) \right| \alpha(0) \right\rangle. \quad (\text{III.82})$$

Par contre, l'aimantation alternée, elle, n'est pas conservée lors de la propagation, ce qui implique une intégration dans la direction de propagation pour déterminer le facteur de structure antiferromagnétique à $\mathbf{q}_{AF} = \pi$:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}_{AF}) &= \frac{1}{L} \left\langle \left(\sum_{i=1}^L (-1)^i S_i^z \right)^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{L(n+1)} \sum_{p=0}^n \left\langle \alpha(p) \left| \left(\sum_{i=1}^L (-1)^i S_i^z \right)^2 \right| \alpha(p) \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{III.83})$$

A la limite thermodynamique, le paramètre d'ordre antiferromagnétique, mesurant l'aimantation alternée par site, est donné par¹⁸

$$m_{AF} = \lim_{L \rightarrow \infty} \sqrt{3S(\mathbf{q}_{AF})}. \quad (\text{III.84})$$

18. Il existe deux expressions pour évaluer l'aimantation par site d'un système fini, l'une avec le facteur de structure alterné [équation (III.84)], l'autre avec la fonction de corrélation entre les spins les plus éloignés [208]. Elles tendent toutes les deux vers la même valeur à la limite thermodynamique, avec toutefois des corrections de taille finie différentes [208, 209].

iii) Fonctions de corrélations statiques

La fonction de corrélation diagonale entre deux spins i et j , définie par $\mathcal{C}_{i,j}^z = \langle S_i^z S_j^z \rangle$ se calcule, comme pour l'aimantation alternée, en intégrant dans la direction de la propagation p :

$$\mathcal{C}_{i,j}^z = \frac{1}{n+1} \sum_{p=0}^n \langle \alpha(p) | S_i^z S_j^z | \alpha(p) \rangle. \quad (\text{III.85})$$

Si le système est périodique, on peut par exemple calculer pour les spins les plus éloignés, une corrélation moyenne à mi-distance, définie comme

$$\mathcal{C}^z(L/2) = \frac{2}{L} \sum_{i=1}^{L/2} \mathcal{C}_{i,i+L/2}^z. \quad (\text{III.86})$$

Dans le cas d'un système invariant par translation, la somme sur i améliore la statistique et dans le cas des systèmes avec échange aléatoire, la quantité définie par (III.86), améliore aussi la moyenne sur les réalisations du désordre.

iv) Susceptibilités

La susceptibilité statique uniforme, définie par

$$\chi = \frac{\beta}{L} \left[\left\langle \left(\sum_{i=1}^L S_i^z \right)^2 \right\rangle - \left\langle \sum_{i=1}^L S_i^z \right\rangle^2 \right] \quad (\text{III.87})$$

se calcule à partir des expressions (III.81) et (III.82).

On peut aussi accéder à la susceptibilité généralisée entre deux opérateurs diagonaux \mathcal{O}_1 et \mathcal{O}_2 :

$$\chi_{\mathcal{O}_1 \mathcal{O}_2} = \int_0^\beta \langle \mathcal{O}_1(\tau) \mathcal{O}_2(0) \rangle d\tau, \quad (\text{III.88})$$

qui devient en SSE

$$\begin{aligned} \chi_{\mathcal{O}_1 \mathcal{O}_2} = \beta \left\langle \frac{1}{n(n+1)} \left(\sum_{p=0}^{n-1} \mathcal{O}_1(p) \right) \left(\sum_{p'=0}^{n-1} \mathcal{O}_2(p') \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{(n+1)^2} \sum_{p=0}^n \mathcal{O}_1(p) \mathcal{O}_2(p) \right\rangle, \end{aligned} \quad (\text{III.89})$$

avec $\mathcal{O}(p) = \langle \alpha(p) | \mathcal{O} | \alpha(p) \rangle$. Par exemple, la susceptibilité magnétique alternée à température T s'obtient en évaluant

$$\chi_{\text{alt}}(T) = \frac{1}{L} \sum_{i,j} (-1)^{i-j} \int_0^\beta \langle S_i^z(\tau) S_j^z(0) \rangle d\tau. \quad (\text{III.90})$$

b) **Application aux chaînes de spins $\frac{1}{2}$**

Dans le cas de la chaîne XXX de spins $\frac{1}{2}$ définie par le hamiltonien général

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^L J(i) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}, \quad (\text{III.91})$$

l'algorithme SSE est déterministe. Dans la suite, nous présentons quelques exemples d'application de la méthode Monte carlo quantique SSE pour ce modèle.

I. QUELQUES PROPRIÉTÉS THERMODYNAMIQUES DE LA CHAÎNE XXX PURE

Lorsque $J(i) = 1 \forall i$, nous retrouvons le cas pur (III.5) pour lequel nous pouvons calculer diverses observables.

i) Énergie par site

Le premier calcul concerne l'énergie par site $e_0(T)$, en fonction de la température, avec $L = 256$ spins $\frac{1}{2}$ sur un anneau fermé. Les résultats de ces simulations sont représentés sur la figure III.24(a) où l'on voit clairement que pour $T < 0,01$, l'énergie par site est quasiment confondue avec la valeur exacte de $\frac{1}{4} - \ln 2$. On sait en outre que le gap de taille finie de la chaîne est $\Delta(L) \propto 1/L$; en se plaçant à $T \ll \Delta(L)$ on peut raisonnablement considérer que le système est dans son état fondamental.

Sur la figure III.24(b), cette même énergie, extrapolée à $T = 0$ est représentée pour différentes tailles de chaînes ($L = 8, 16, 32, 64, 128, 256$) et est aussi comparée avec succès à la loi d'échelle (III.13) prévue par la théorie conforme [87, 88, 110].

ii) Susceptibilité uniforme

La susceptibilité magnétique, évaluée selon (III.87), est très sensible au gap de taille finie. En effet lorsque $T < \Delta(L)$, le système « voit » le gap de spin et $\chi(T)$ a un comportement activé à basse température $\sim \exp(-T/\Delta(L))$. La figure III.24(c) illustre cette caractéristique pour la susceptibilité uniforme représentée pour $L = 128, 256, 512$. On devine aisément que lorsque $L \rightarrow \infty$, χ va tendre vers une valeur constante à $T = 0$. Cette valeur est par ailleurs connue par l'Ansatz de Bethe, elle vaut $\chi(0) = 1/\pi^2$.

iii) Fonction de corrélation

Enfin nous montrons aussi sur la figure III.24(d) le comportement de la fonction de corrélation diagonale à mi-distance, $\mathcal{C}^z(L/2)$ définie par (III.86), calculée à $T = 0$ pour $L = 4, 8, 16, 32, 64, 128$ et 256. Les résultats obtenus en SSE sont comparés aux prédictions issues de la bosonisation $\mathcal{C}^z(L) \propto (-1)^L \frac{\sqrt{\ln L}}{L}$ [98, 99].

II. SUSCEPTIBILITÉ MAGNÉTIQUE DANS LA PHASE DES SINGULETS ALÉATOIRES

Le hamiltonien (III.91) est maintenant étudié en prenant les échanges $J(i)$ comme des variables aléatoires tirées indépendamment selon une certaine distribution $\mathcal{P}(J)$. Les fluctuations entre les différents échantillons sont d'autant plus importantes que

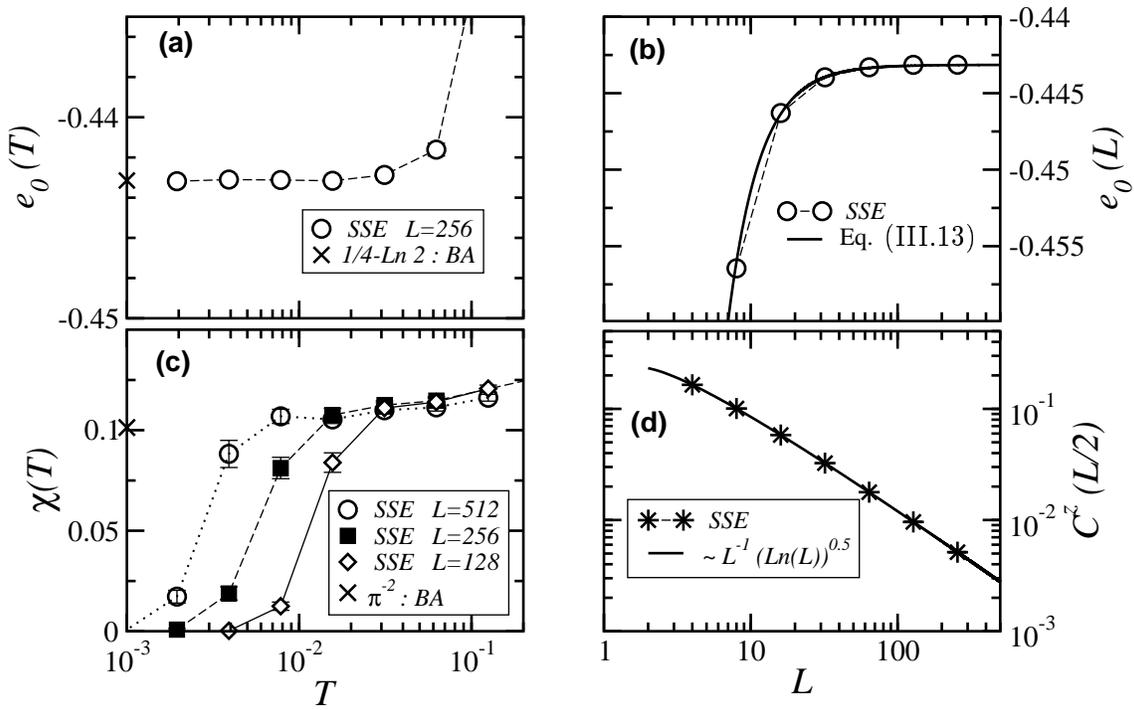


FIG. III.24 – Résultats de simulations SSE effectuées sur la chaîne XXX de spins $\frac{1}{2}$ non désordonnée. Après thermalisation, les mesures ont été faites pour 10^5 pas Monte Carlo à chaque température. (a) Énergie par site (\circ) pour une chaîne de $L = 256$ spins en fonction de la température T ; la valeur exacte de l’Ansatz de Bethe (BA) est symbolisée par (\times). (b) Énergie par site (\circ) calculée dans le fondamental en fonction de la taille L de la chaîne ; la courbe pleine est la loi d’échelle (III.13). (c) Susceptibilité uniforme $\chi(T)$ tracée pour trois tailles (indiquées sur le graphe) en fonction de la température T ; la valeur attendue à la limite thermodynamique de $1/\pi^2$ est représentée à gauche par (\times). (d) Fonction de corrélation diagonale à mi-distance $C^z(L/2)$ représentée en fonction de la taille L et comparée à une fonction de la forme $\frac{\sqrt{\ln L}}{L}$.

le désordre est large. Il est donc nécessaire de faire des moyennes pour les observables sur un grand nombre de réalisations du désordre. Dans la section 1.3 a) du chapitre IV, nous reviendrons en détail sur cet effet des fluctuations liées au désordre qui nécessitent un traitement très soigneux.

Selon les prédictions de Fisher pour la chaîne désordonnée (voir la section 2.1 b) de ce chapitre), on s’attend à observer dans la phase des singulets aléatoires une susceptibilité divergente (III.48). Ce qui implique une constante de Curie $C(T) = \chi(T) \times T$ se comportant comme

$$C(T) \sim \frac{1}{(\ln T)^2}. \quad (\text{III.92})$$

Les résultats pour $C(T)$ d’un calcul SSE, effectué sur une chaîne de $L = 32$ spins couplés aléatoirement avec les $J(i)$ distribués selon $\mathcal{P}(J) \propto J^{-1+\frac{1}{5}}$, sont représentés

sur la figure III.25. La procédure appelée « β -doubling scheme », développée par

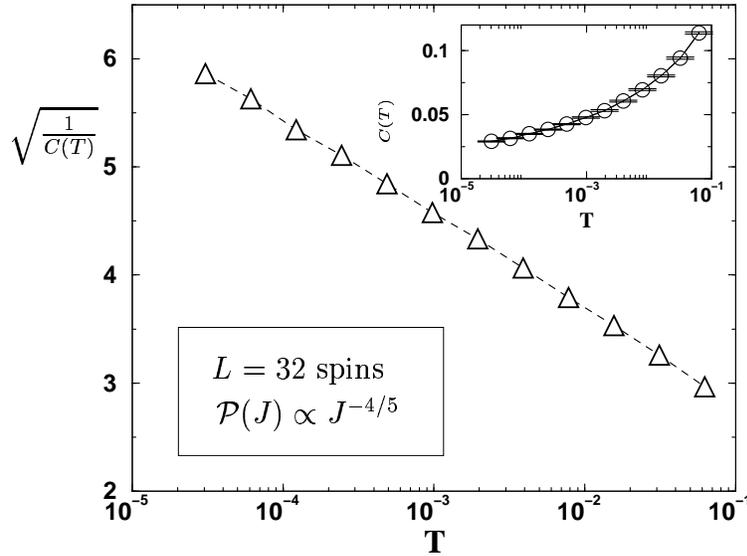


FIG. III.25 – Constante de Curie $C(T) = \chi(T) \times T$ moyennée sur 10^3 chaînes XXX de $L = 32$ spins $\frac{1}{2}$ avec couplages aléatoires distribués dans $\mathcal{P}(J)$ indiquée sur la figure. La procédure « β -doubling scheme » [210] a été utilisée pour descendre jusqu'à des températures de 2^{-15} . Sur la figure principale, $\sqrt{\frac{1}{C(T)}}$ exhibe un comportement linéaire en fonction de $\ln T$. En vignette, la constante de Curie tend lentement vers 0 lorsque $T \rightarrow 0$; les barres d'erreurs sont très faibles.

Sandvik [210], a été utilisée pour accéder à des températures $T < 10^{-4}$ tout en optimisant les procédures de thermalisation (nous détaillerons cette approche dans la section 1.3 a) du chapitre IV). Les résultats des simulations ont été moyennés sur 10^3 échantillons indépendants. La constante de Curie est représentée sur la figure III.25. Le choix d'un désordre très fort nous assure que le comportement universel du point fixe de désordre infini est observable, même sur un petit système. En effet la figure III.25 nous confirme que la dépendance en température de la constante de Curie calculée par SSE est bien conforme à l'équation (III.92).

Chapitre IV

Crossover et localisation dans les chaînes de spins $\frac{1}{2}$ désordonnées

Sommaire de ce chapitre

1	Phénomènes de crossover pour les fonctions de corrélation	62
1.1	L'universalité des corrélations de spin en question	62
	a) Confirmations de l'universalité	62
	b) Non universalité selon une étude en DMRG	62
	c) Commentaires	63
1.2	Étude par diagonalisations exactes des corrélations transverses dans la chaîne XX désordonnée	64
	a) Approche par les fermions libres	64
	b) Résultats numériques	64
	c) Analyse du crossover	66
1.3	Étude au point isotrope XXX par Monte Carlo quantique SSE	68
	a) Contrôle des fluctuations liées au désordre et conver- gence dans le fondamental	68
	b) Étude de la fonction de corrélation longitudinale au point isotrope	70
	c) Loi d'échelle et longueur de crossover	73
2	Transport de spin : localisation à une dimension	75
2.1	Étude de la rigidité de spin de la chaîne XX désordonnée . . .	76
	a) Investigations numériques par diagonalisations exactes	76
	b) Résultats	79
2.2	Transition de localisation	80
	a) Crossover entre le régime métallique pur et la phase localisée de singulets aléatoires	80
	b) Longueur de localisation	81
3	Conclusion	83

1 Phénomènes de crossover pour les fonctions de corrélation

Les propriétés de la phase de singulets aléatoires ont été décrites dans le chapitre III, à la page 40. En particulier, il a été montré par la bosonisation [23] ainsi que par renormalisation dans l'espace réel [6] que les fonctions de corrélation de spin présentent *en moyenne* une décroissance algébrique avec la distance,

$$C_{avg}^{\alpha}(r) = \overline{\langle S_i^{\alpha} S_{i+r}^{\alpha} \rangle}_{GS} \sim \frac{(-1)^r}{r^{\eta_{RSP}}}. \quad (\text{IV.1})$$

L'exposant universel, indépendant de la direction $\alpha = x, y, z$, vaut exactement $\eta_{RSP} = 2$. Datant de plus de dix ans, ces prédictions analytiques ont fait l'objet de nombreuses vérifications numériques à l'aide de diverses méthodes.

1.1 L'universalité des corrélations de spin en question

a) Confirmations de l'universalité

Tout d'abord, en 1993 des diagonalisations exactes par la méthode de Lanczos (voir la section 3.2 du chapitre III) ont été réalisées par Haas *et al.* [211] sur des petits systèmes ($L_{max} = 18$) décrits par le hamiltonien XXZ perturbé par un terme de désordre dans le plan XY :

$$\mathcal{H}_{XXZ}^{rand} = \sum_i [J_{\perp}(i)(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + \Delta S_i^z S_{i+1}^z]. \quad (\text{IV.2})$$

Le comportement universel des fonctions de corrélation a été vérifié pour des désordres de très grande intensité. Notons aussi que le diagramme des phases proposé par Doty et Fisher [23] (représenté sur la figure III.12), fut qualitativement retrouvé.

A l'aide de la transformation de Jordan-Wigner, la chaîne XX désordonnée a fait l'objet de plusieurs études par des diagonalisations exactes sur des grandes tailles, allant jusqu'à 1024 spins [212, 213]. Le comportement critique des fonctions de corrélation, étudiées pour des couplages aléatoires distribués uniformément dans l'intervalle $[0,1]$, s'est avéré être en très bon accord avec les prédictions analytiques¹.

Utilisant une approche par renormalisation dans l'espace réel, Hikihara *et al.* [215], a aussi confirmé le comportement universel des corrélations à longue distance.

Mentionnons aussi l'étude à température finie par Monte Carlo quantique de la chaîne antiferromagnétique désordonnée [216] dans laquelle des prédictions relatives à la thermodynamique, telles que le comportement de la susceptibilité magnétique $\chi(T) \sim \frac{1}{T(\ln T)^2}$ ont été vérifiées sur des systèmes allant jusqu'à 96 spins.

b) Non universalité selon une étude en DMRG

Alors que le comportement universel des fonctions de corrélation (III.49) ne semblait plus pouvoir être remis en question, tant toutes les études numériques

1. Il est important de noter que pour le problème relié de la chaîne d'Ising désordonnée en champ transverse, des calculs numériques similaires ont aussi confirmé le comportement universel sur des systèmes de taille finie ($L_{max} = 128$ spins) : voir la référence [214].

convergeaient vers une décroissance de $\mathcal{C}_{avg}(r)$ en loi de puissance avec un exposant universel $\eta_{RSP} = 2$, la récente publication de résultats obtenus en DMRG a ouvert un débat [217, 218]. Ces calculs, effectués sur des chaînes XXZ ouvertes avec désordre planaire [hamiltonien (IV.2)], ont considéré des réseaux allant jusqu'à 400 sites. Les distributions des couplages sont des lois uniformes centrées autour de 1 et de largeur $2W$. Les conclusions se sont alors dirigées vers une *non-universalité* des corrélations et une dépendance de η en fonction de Δ et de W a été avancée. Sur la figure IV.1, la corrélation transverse à distance r dans la chaîne est représentée² pour une anisotropie $\Delta = 0,5$ et un désordre $W = 0,1$. L'exposant de décroissance est évalué à $\eta \simeq 0,96 \pm 0,01$, bien différent de 2.

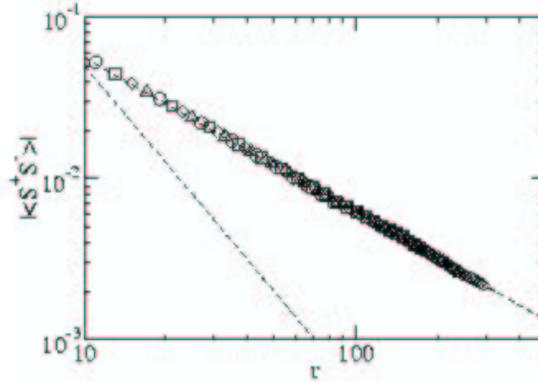


FIG. IV.1 – *Fonction de corrélation transverse $\langle S_0^+ S_r^- \rangle$ calculée par DMRG sur une chaîne ouverte (IV.2) à $\Delta = 0,5$ et $W = 0,1$ par Hamacher et al. [217]. Les différents symboles représentent les différentes tailles utilisées ($L = 120, 240, 320, 400$). La droite hachurée représente le comportement attendu dans la phase de singulets aléatoires, avec $\eta = 2$. Figure extraite de la référence [217].*

c) Commentaires

Ces résultats, en désaccord avec les prédictions du point fixe à désordre infini, doivent être interprétés à travers les effets de taille finie dont ils sont victimes. C'est pourquoi l'étude DMRG présentée dans la lettre [217] a par la suite fait l'objet d'un commentaire [218] afin d'éclaircir au mieux ces effets de taille finie. Une distance caractéristique ξ , dite de « crossover », a ainsi pu être dégagée et sa dépendance en fonction de la force du désordre \mathcal{D} a aussi été exprimée [218, 219]. Ainsi l'universalité des fonctions de corrélation a bien été vérifiée pour des tailles de systèmes $L \gg \xi$.

Dans la suite nous présentons les calculs numériques qui ont été effectués sur les chaînes désordonnées de tailles finies, afin de décrire quantitativement ce phénomène de crossover. Les résultats de diagonalisations exactes au point XX ($\Delta = 0$) seront d'abord exposés, suivis par la présentation de calculs par Monte Carlo quantique SSE au point isotrope XXX ($\Delta = 1$).

2. Notons que les auteurs précisent dans le légende de cette figure publiée [217] que seulement un huitième des données sont représentées, par mesure de clarté.

1.2 Étude par diagonalisations exactes des corrélations transverses dans la chaîne XX désordonnée

a) Approche par les fermions libres

Considérons pour commencer le modèle unidimensionnel XX de spins $\frac{1}{2}$ avec des couplages désordonnés $J(i)$. Ce problème est décrit par le hamiltonien suivant

$$\mathcal{H}_{XX}^{\text{rand}} = \sum_{i=1}^L J(i) (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y), \quad (\text{IV.3})$$

auquel nous imposons des conditions aux bords périodiques. Comme il a été vu page 23, la transformation de Jordan-Wigner [90] permet de transformer (IV.3) en un hamiltonien de fermions sans spin. L'avantage du point XX est que le terme d'interaction densité-densité de l'équation (III.15) disparaît, et l'on se retrouve avec des fermions libres décrits par

$$\mathcal{H}_{XX}^{\text{rand o}} = \sum_{i=1}^{L-1} \frac{J(i)}{2} (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i) - \frac{J(L)}{2} (c_L^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_L) \exp(i\pi\mathcal{N}). \quad (\text{IV.4})$$

Le second terme de droite, relatif aux conditions de bord, dépend du nombre total de fermions présents dans le système : $\mathcal{N} = \sum_{i=1}^L c_i^\dagger c_i$. Les conditions aux bords du problème fermionique sont donc antipériodiques si \mathcal{N} est pair alors que pour \mathcal{N} impair elles sont périodiques.

Dans le cas non désordonné, via une transformation de Fourier, le problème est analytiquement soluble [220]. Le hamiltonien est alors diagonal dans l'espace des k et s'écrit

$$\mathcal{H}_{XX}^{\text{pur}} = -J \sum_k c_k^\dagger c_k \cos(k). \quad (\text{IV.5})$$

L'état fondamental se trouve au demi-remplissage ($\mathcal{N} = L/2$, correspondant au secteur $S_{\text{total}}^z = 0$ du problème de spins). Dans notre étude avec couplages aléatoires, l'invariance par translation est brisée par le désordre. L'approche numérique a donc été privilégiée pour étudier les effets de taille finie sur les fonctions de corrélation. En suivant l'approche décrite par plusieurs auteurs [220, 221, 214, 212, 213], nous calculons la fonction de corrélation transverse à mi-distance $\mathcal{C}^x(L/2)$. Pour résumer, ce calcul nécessite l'évaluation des vecteurs propres d'une matrice $L \times L$ et d'un déterminant $L/2 - 1 \times L/2 - 1$, ce qui peut être facilement effectué à l'aide de routines usuelles d'algèbre linéaire, telle que LAPACK.

b) Résultats numériques

En l'absence de désordre, le comportement de $\mathcal{C}^x(L/2)$ est connu [221]:

$$\mathcal{C}^x(L/2) \sim \frac{1}{\sqrt{L}}. \quad (\text{IV.6})$$

Notons au passage que la corrélation longitudinale $\mathcal{C}^z(L/2)$ décroît plus rapidement, en L^{-2} . Mais étant donné que l'exposant attendu dans la phase de singulets aléatoires

est précisément $\eta_{RSP} = 2$, l'étude de \mathcal{C}^z ne nous permettrait pas de conclure sur la nature de la phase³.

Afin d'appréhender du mieux possible l'influence du désordre dans les couplages nous considérons la distribution carrée

$$\mathcal{P}(J) = \begin{cases} \frac{1}{2W} & \text{si } J \in [1 - W, 1 + W] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{IV.7})$$

où l'intensité du désordre est contrôlée par sa largeur $2W$. Ici le paramètre \mathcal{D} , défini par l'équation (III.44) page 36, est simplement donné par $\mathcal{D} = \frac{1}{3}W^2$. Afin de réduire les erreurs statistiques dues aux fluctuations entre échantillons, nous calculons la fonction de corrélation moyenne suivante $\mathcal{C}_{avg}^x(L/2) = \overline{\mathcal{C}^x(L/2)}$ où la moyenne (...) est effectuée sur un très grand nombre \mathcal{S} d'échantillons indépendants. De plus nous exploitons la périodicité des chaînes en effectuant pour chaque échantillon une moyenne le long de la chaîne; ce qui donne

$$\mathcal{C}_{avg}^x(L/2) = \frac{2}{L} \sum_{i=1}^{\frac{L}{2}} \overline{\langle S_i^x S_{i+\frac{L}{2}}^x \rangle}. \quad (\text{IV.8})$$

L'expression (IV.8) a été évaluée numériquement pour des tailles de systèmes $L = 2^q$ avec $q = 1, \dots, 12$ et des désordres $W = 0, 0,25, 0,5, 0,625, 0,75, 1$; le nombre d'échantillons \mathcal{S} étant de 5×10^4 pour $L \leq 1024$, 3000 pour $L = 2048$ et 500 pour $L = 4096$.

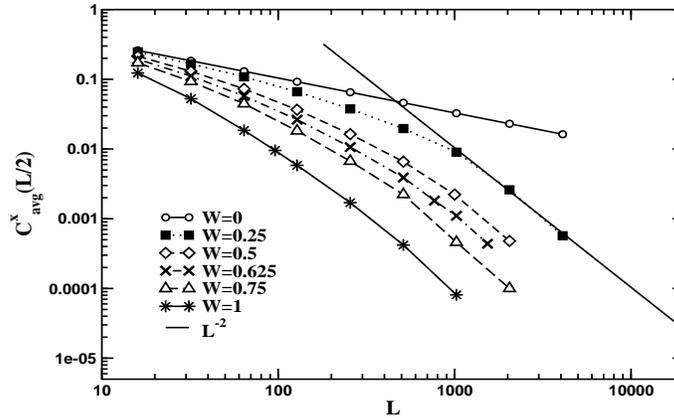


FIG. IV.2 – Fonction de corrélation transverse moyenne à mi-distance $\mathcal{C}_{avg}^x(L/2)$ calculée par des diagonalisations exactes au point XX et tracée en fonction de la taille L pour différents désordres W indiqués sur la figure. Les données pour le cas non désordonné $W = 0$ suivent une loi $\propto L^{-1/2}$ et la ligne pleine est la loi en L^{-2} prédite par Fisher [23, 6]. Figure extraite de la référence [219], publication n° 5.

3. Néanmoins il ne serait pas totalement inutile d'étudier les corrélations longitudinales car leur décroissance typique $\sim \exp(-A\sqrt{r})$, mentionnée page 41, reste une signature du point fixe de désordre infini.

Sur la figure IV.2, les résultats sont montrés pour $\mathcal{C}_{avg}^x(L/2)$ en fonction de L . Pour les petites tailles, la décroissance observée en échelle log-log s'effectue avec un exposant effectif η^{eff} clairement inférieur à la valeur 2 attendue. Mais lorsque L augmente, un phénomène de crossover est observé, entre un régime non universel avec un exposant dépendant de W : $\eta^{eff}(W) < 2$, et un régime asymptotique où l'exposant ne varie plus et vaut $\eta_{RSP} = 2$. Un tel comportement suggère qu'il existe une longueur caractéristique dans le système, dépendante du désordre, et contrôlant un crossover entre le point fixe sans désordre, instable, et le point fixe de désordre infini, attractif $\forall W > 0$.

c) Analyse du crossover

I. FONCTION D'ÉCHELLE

Définissons le paramètre sans dimension $x = L/\xi$ où ξ est la longueur de crossover. On peut alors identifier 3 régimes en fonction de x :

- (i) Si $x \ll 1$, le comportement critique du système pur ($J(i) = \text{constante}$) est dominant avec un exposant effectif de décroissance $\eta^{eff}(W) = 1/2$.
- (ii) Si $x \gg 1$, le régime asymptotique est atteint : les propriétés du point fixe à désordre infini sont observées, et en particulier $\eta^{eff}(W) = \eta_{RSP} = 2$.
- (iii) Dans le régime intermédiaire où $x \sim 1$, un crossover est attendu, caractérisé par un exposant non universel $1/2 < \eta^{eff}(W) < 2$.

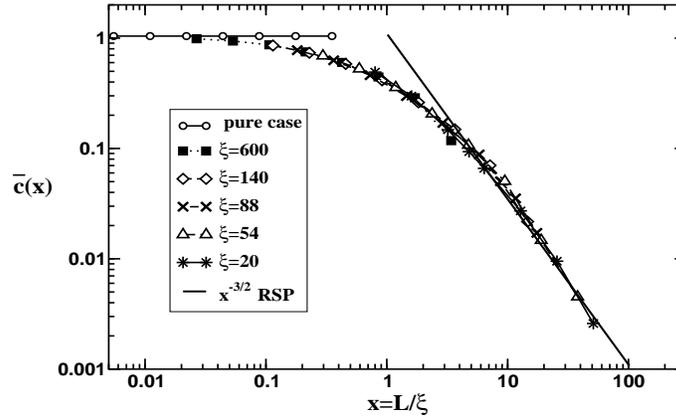


FIG. IV.3 – Fonction d'échelle $\tilde{c}(x)$ définie par (IV.9), obtenue pour les données de la figure IV.2 avec $\xi = 600, 140, 88, 54, 20$ pour $W = 0,25, 0,5, 0,625, 0,75$ et 1, respectivement. Les symboles sont identiques à ceux utilisés pour la figure IV.2. Figure extraite de la référence [219], publication n° 5.

Par conséquent, la loi d'échelle suivante est proposée :

$$\mathcal{C}_{avg}^x \left(\frac{L}{2} \right) = L^{-1/2} \tilde{c}(L/\xi), \quad (\text{IV.9})$$

avec une fonction d'échelle $\tilde{c}(x) = \text{constante}$ dans le régime (i) et $\tilde{c}(x) \rightarrow x^{-3/2}$ dans le régime (ii). Sur la figure IV.3, cette fonction a été obtenue par « l'écrasement »

des points de la figure IV.2 sur une même courbe, universelle et invariante d'échelle. Notons que $\xi(W = 1)$ a été choisie de façon à ce que la région de crossover (iii) soit centrée autour de $x \simeq 1$, les autres valeurs ont été ajustées graphiquement afin de produire le meilleur écrasement.

II. LONGUEUR DE CROSSOVER

La dépendance de ξ en fonction du désordre W (ou \mathcal{D}) est fort intéressante à étudier. En effet elle peut éventuellement nous renseigner sur l'existence d'un désordre critique \mathcal{D}_c dans le système car à la transition entre la phase pure et la phase désordonnée, on s'attend à ce que $\xi \rightarrow \infty$ lorsque $\mathcal{D} \rightarrow \mathcal{D}_c$.

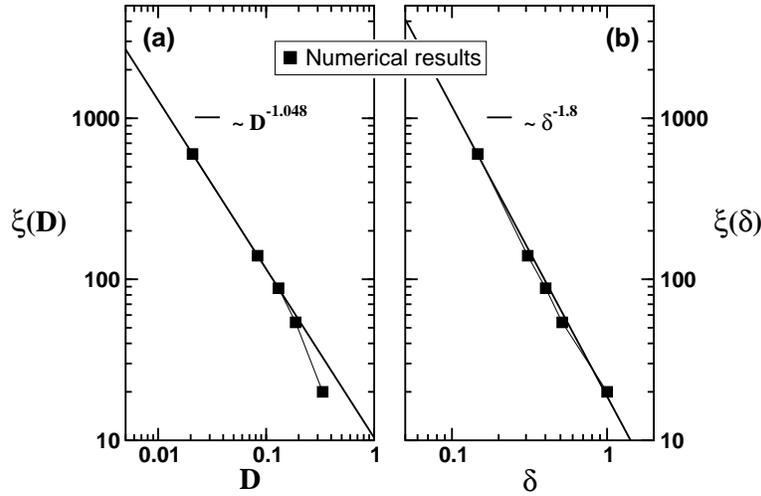


FIG. IV.4 – *Comportement de la longueur de crossover ξ en fonction du désordre. Les carrés noirs sont les estimations numériques, issues de la figure IV.3 et les lignes pleines sont des fits. (a) En fonction de \mathcal{D} , le fit est $\sim \mathcal{D}^{-1,05}$. En (b), le fit est $\xi(\delta) \sim \delta^{-1,8}$. Figure extraite de la référence [219], publication n° 5.*

On voit sur la figure IV.4 (a) que $\xi \rightarrow \infty$ pour $\mathcal{D} \rightarrow 0$. A faible désordre, la longueur de crossover peut être correctement décrite par une loi de puissance $\xi(\mathcal{D}) \propto \mathcal{D}^{-\gamma}$, avec un exposant $\gamma = 1 \pm 0.1$. Cette dépendance est en très bon accord avec le comportement trouvé par Doty et Fisher [23] pour la longueur caractéristique mentionnée page 38 : $\xi(\mathcal{D}) \sim \mathcal{D}^{\frac{1}{3-2K}}$, avec le paramètre de Luttinger $K = 1$ au point XX. En revanche, lorsque l'intensité du désordre devient plus importante, une déviation par rapport à la loi de puissance est nettement observée. Un tel comportement n'est pas surprenant car l'analyse perturbative de Doty et Fisher n'est valable qu'aux abords de la transition $\mathcal{D} \ll 1$.

Pour les forts désordres, l'approche perturbative dans l'espace réel (voir la section 2.1 b) du chapitre III) a prouvé l'existence d'un point fixe de désordre infini [6] où la distribution des couplages antiferromagnétiques est donnée par

$$\mathcal{P}_0(J) \propto (J)^{-1+\delta^{-1}}, \quad \delta \rightarrow \infty. \quad (\text{IV.10})$$

Une quantité qui apparaît alors naturelle pour caractériser le désordre fort (proche du point critique) est la variance du logarithme des couplages aléatoires, donnée par

$$\delta = \sqrt{\overline{(\ln J(i))^2} - \left(\overline{\ln J(i)}\right)^2}. \quad (\text{IV.11})$$

Le comportement de ξ en fonction de ce paramètre δ est représenté sur la figure IV.4 (b) où l'accord avec une loi de puissance du type

$$\xi(\delta) \propto \delta^{-\Phi} \quad (\text{IV.12})$$

est bon pour toute la gamme de désordres considérés ici. L'estimation numérique de l'exposant est $\Phi = 1,8 \pm 0,02$. δ peut aussi être relié à la largeur de la distribution carrée W par

$$\delta = \sqrt{1 - \frac{1 - W^2}{4W^2} \left[\ln\left(\frac{1 + W}{1 - W}\right) \right]^2}. \quad (\text{IV.13})$$

Aux faibles désordres, $W \ll 1$, on obtient $\delta \sim \sqrt{D}$. Par conséquent on peut s'attendre à ce que cet exposant Φ soit directement relié au paramètre de Luttinger K par la relation $\Phi = \frac{2}{3-2K}$, ce qui donne : $\Phi = 2$ au point XX.

Nous verrons plus loin dans la section b), qu'une telle prédiction est en fait bien robuste.

1.3 Étude au point isotrope XXX par Monte Carlo quantique SSE

Les principes généraux de l'algorithme SSE ont été présentés dans la section 3.3 du chapitre III. Dans cette partie nous allons utiliser cet algorithme pour étudier, comme précédemment au point XX, des fonctions de corrélation de spin dans la chaîne de Heisenberg isotrope désordonnée. Une attention particulière sera d'abord portée sur le contrôle rigoureux des fluctuations statistiques ainsi que les effets liés à la température finie. Les résultats seront ensuite présentés et analysés en termes d'effets de crossover. La longueur de crossover sera finalement étudiée en fonction de l'intensité du désordre dans les chaînes.

a) Contrôle des fluctuations liées au désordre et convergence dans le fondamental

L'évaluation précise des observables physiques à l'aide de simulations Monte Carlo souffre inévitablement d'erreurs statistiques dues à la finitude du nombre de pas Monte Carlo utilisés. De plus lorsque le système physique considéré est désordonné, les fluctuations entre les différents échantillons introduisent une nouvelle source d'erreurs. Les valeurs moyennes des observables doivent par conséquent être évaluées comme

$$\mathcal{O}_{avg} = \overline{\langle \mathcal{O} \rangle} = \sum_{\sigma=1}^{\mathcal{S}} \sum_{i=1}^{N_m} (\mathcal{O}_i)^\sigma, \quad (\text{IV.14})$$

où les différents échantillons sont étiquetés par $\sigma = 1, \dots, \mathcal{S}$ et les mesures Monte Carlo sont effectuées de $i = 1$ jusqu'à N_m .

Un autre ingrédient très important est la température $T = \beta^{-1}$ car l'algorithme SSE travaille à β fini. Puisque nous sommes intéressés par les propriétés de l'état fondamental de la chaîne de spin désordonnée, les températures nécessaires pour atteindre le fondamental seront extrêmement basses. En effet, comme indiqué par l'équation (III.56) page 41, le gap est exponentiellement petit avec la taille L . Pour ce faire, nous utilisons une méthode très efficace, appelée *β -doubling scheme*, qui a été développée par Sandvik pour l'étude du modèle de Heisenberg sur le réseau carré dépeuplé autour du seuil de percolation [210]. Cette technique est très puissante pour notre problème car elle va nous permettre d'atteindre des températures extrêmement basses assez rapidement tout en réduisant au cours du refroidissement le temps nécessaire pour obtenir une configuration Monte Carlo équilibrée.

Le point de départ est une chaîne de spins de longueur L , avec un tirage de couplages antiferromagnétiques aléatoires donné, que l'on simule à une température inverse $\beta_0 = 2^0 = 1$. Par simulation on entend que N_{eq} pas de thermalisation (sans mesure) sont d'abord effectués, suivis de N_m pas de mesure où les observables physiques sont éventuellement calculées. Notons que la configuration Monte Carlo à l'issue des $N_{eq} + N_m$ pas est donnée par un état $|\alpha\rangle$ et une chaîne d'opérateurs $S_{\mathcal{M}} = [a_1, b_1], \dots, [a_{\mathcal{M}}, b_{\mathcal{M}}]$. L'étape suivante consiste à diviser la température par deux : $\beta \mapsto 2 \times \beta$. On se retrouve alors à $\beta_1 = 2^1$ et l'on tire avantage du calcul précédent à β_0 en prenant comme configuration Monte Carlo de départ, l'état $|\alpha\rangle$ et la chaîne d'opérateurs suivante

$$S_{2\mathcal{M}} = [a_1, b_1], \dots, [a_{\mathcal{M}}, b_{\mathcal{M}}][a_{\mathcal{M}}, b_{\mathcal{M}}], \dots, [a_1, b_1]. \quad (\text{IV.15})$$

En effet, une configuration à priori équilibrée à β présente une chaîne d'opérateurs approximativement deux fois plus longue qu'à $\beta/2$ (rappelons nous que le nombre moyen d'opérateurs non identité est $\langle n \rangle \sim \beta L$). Le choix de $S_{2\mathcal{M}}$ nous fournit une bonne séquence d'opérateurs. La procédure est ensuite répétée jusqu'à une certaine température $\beta_{t_{max}} = 2^{t_{max}}$, et ceci pour chaque échantillon. On voit qu'au cours du refroidissement $t = 0, 1, \dots, t_{max}$, la configuration Monte Carlo devient de plus en plus équilibrée car la simulation tient compte de l'histoire du système. Par conséquent le nombre de pas nécessaires pour atteindre l'équilibre N_{eq} à chaque température β_t sera un nombre relativement petit étant donné que le nombre effectif de pas de thermalisation est en fait $N_{eq}^{eff} = (t + 1)(N_{eq} + N_m)$. Concernant le nombre de pas de mesures N_m , on peut vérifier numériquement que même pour $N_m \leq 100$, les fluctuations entre les divers échantillons sont plus importantes que les fluctuations statistiques dans les mesures, comme on peut le voir sur la figure IV.5 où les mesures de la fonction de corrélation longitudinale à mi-chaîne

$$C^z(L/2) = \frac{2}{L} \sum_{i=1}^{\frac{L}{2}} \langle S_i^z S_{i+\frac{L}{2}}^z \rangle \quad (\text{IV.16})$$

sont représentées.

La meilleure stratégie pour appréhender correctement de tels systèmes de spins désordonnés consiste à réaliser des simulations plutôt courtes (avec N_{eq} et N_m typiquement ≤ 100) sur un très grand nombre d'échantillons ($\mathcal{S} \geq 1000$) en utilisant

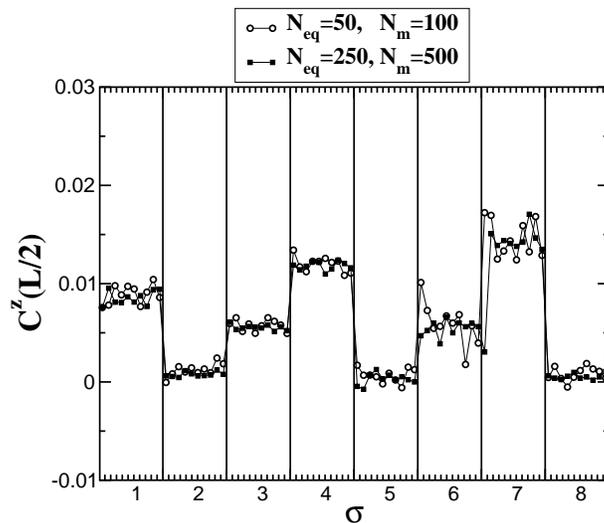


FIG. IV.5 – Fonction de corrélation longitudinale à mi-chaîne $C^z(L/2)$ calculée par SSE pour la chaîne de Heisenberg désordonnée (désordre carré $W = 1$) avec $L = 32$ sites à $\beta = 2048$ en utilisant le β -doubling scheme. 8 échantillons différents ont été utilisés ($\sigma = 1, \dots, 8$) et pour chacun, N_{eq} pas de thermalisation suivis de $10 \times N_m$ pas de mesure ont été effectués avec $N_{eq} = 50, N_m = 100$ (cercles) et $N_{eq} = 250, N_m = 500$ (carrés).

le β -doubling scheme. Sur la figure IV.6 (a), nous illustrons ceci par le calcul de $C_{avg}^z(L/2)$ en fonction de β_t ($t = 0, 1, \dots, 9$) sur une chaîne désordonnée (distribution carrée des couplages, de largeur $W = 0,5$) de $L = 16$ spins $\frac{1}{2}$ pour diverses valeurs du couple (N_{eq}, N_m) , la moyenne étant prise sur $\mathcal{S} = 1000$ échantillons.

En ce qui concerne les effets liés à la température, pour une observable \mathcal{O} donnée le choix de t_{max} s'effectue selon le critère suivant :

$$\overline{R_{\mathcal{O}}(t)} = \overline{\left(\frac{\langle \mathcal{O}(\beta_t) \rangle}{\langle \mathcal{O}(\beta_{t_{max}}) \rangle} \right)} \quad (\text{IV.17})$$

doit être tel que $\overline{R_{\mathcal{O}}(t_{max} - 1)} - 1$ est inférieur aux erreurs statistiques. De la figure IV.6 (b), on déduit que les propriétés du fondamental du système considéré sont atteintes pour $t \geq 6$ et que le choix d'un couple de valeurs $(N_{eq}, N_m) \gtrsim (25, 50)$ est suffisant.

b) Étude de la fonction de corrélation longitudinale au point isotrope

Nous étudions la chaîne antiferromagnétique désordonnée de spins $\frac{1}{2}$ au point isotrope, définie par le hamiltonien suivant

$$\mathcal{H}^{\text{rand}} = \sum_{i=1}^L J(i) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}. \quad (\text{IV.18})$$

Les couplages, tous positifs, sont tirés aléatoirement dans une distribution carrée définie par (IV.7) ou bien dans une distribution plus singulière, définie par la loi de

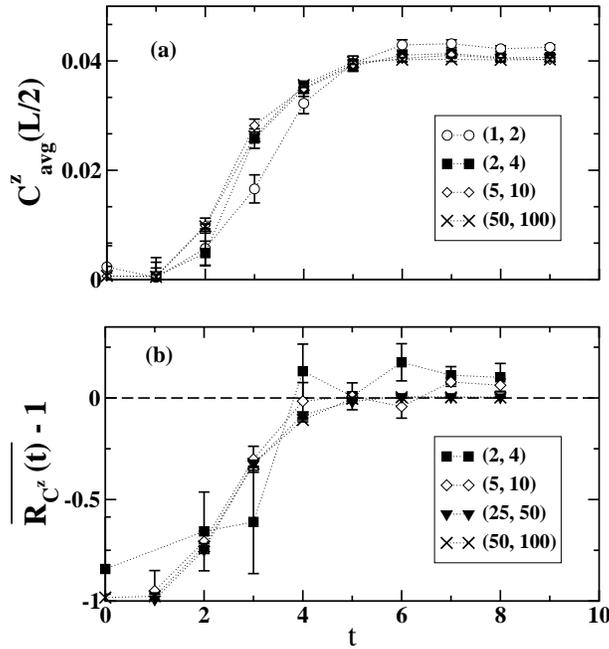


FIG. IV.6 – (a) Fonction de corrélation longitudinale moyenne $C^z_{avg}(L/2)$ calculée à mi-chaîne par SSE. Les paramètres sont : $L = 16$ spins $\frac{1}{2}$, désordre carré de largeur $W = 0,5$, $\mathcal{S} = 1000$ échantillons. En abscisses, t représente la température inverse suivant $\beta_t = 2^t$. Les différentes valeurs du couple (N_{eq}, N_m) sont indiquées sur la figure. (b) Rapport $R_{C^z}(t) - 1$ en fonction du paramètre de température inverse $t = \ln \beta / \ln 2$ calculé pour $t_{max} = 9$ sur le même système que (a) et pour des valeurs du couple (N_{eq}, N_m) indiquées sur la figure. La ligne brisée montre le zéro.

puissance $\mathcal{P}(J) = \frac{1}{\delta} J^{-1+\delta^{-1}}$ si $J \in [0,1]$ ou 0 sinon.

Rappelons d'abord que dans le cas non désordonné ($J(i)$ constant, $\forall i$), les fonctions de corrélation spin-spin décroissent de façon isotrope, asymptotiquement comme [99]

$$C^{\alpha}_{pur}(r) = \langle S_i^{\alpha} S_{i+r}^{\alpha} \rangle \rightarrow (-1)^r \frac{\sqrt{\ln r}}{(2\pi)^{3/2} r}, \text{ si } r \rightarrow \infty. \quad (\text{IV.19})$$

I. CONVERGENCE DANS LE FONDAMENTAL

Comme nous venons de le voir précédemment, nous allons utiliser la procédure de doublement de β pour accélérer la convergence dans le fondamental tout en tirant profit de ses effets thermalisants.

La figure IV.7 est le résultat de plusieurs calculs par SSE, effectués pour le modèle (IV.18) avec $L = 32, 48, 64$, et 96 , l'intensité du désordre étant ici donnée par $W = 0,6$. La convergence de $C^z_{avg}(L/2)$ vers sa valeur à $T = 0$ apparaît comme étant d'autant plus lente que L est grand. Cet effet est analysé à travers la quantité $\beta_{GS} = 2^{t_{GS}}$ définie telle que $R_{C^z}(t_{GS})$ ne soit plus distinguable de 1. Le comportement de β_{GS} en fonction de la taille L est tracé en vignette sur la figure IV.7 : un fit de la forme $\ln \beta_{GS}(L) \simeq 0,74 + \sqrt{L}$ est obtenu. Ceci implique que la température à atteindre

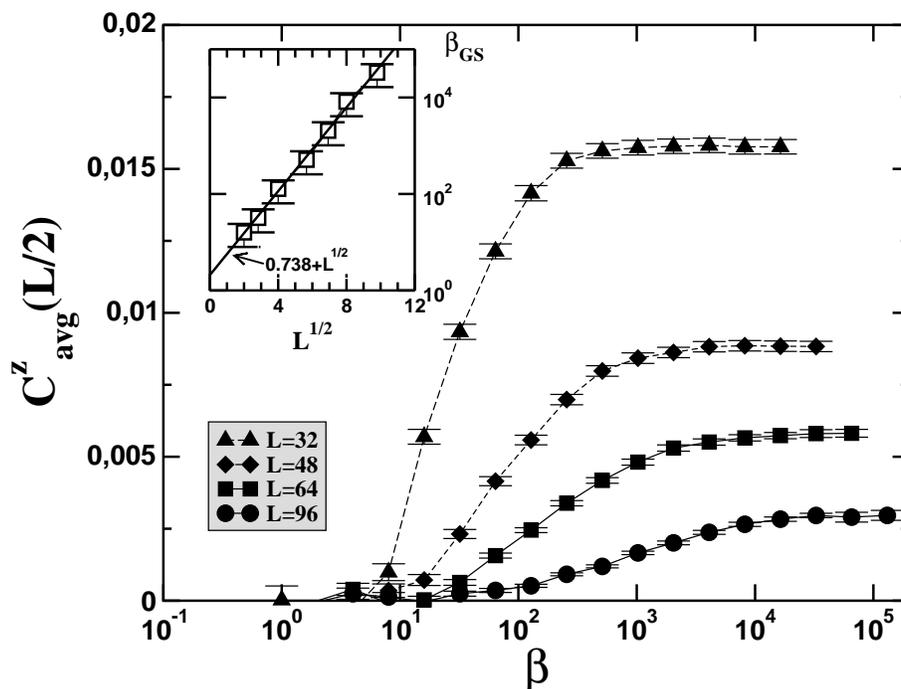


FIG. IV.7 – Convergence dans le fondamental de $C_{avg}^z(\frac{L}{2})$, calculée par SSE et tracée pour $L = 32, 48, 64$, et 96 en fonction de β . Simulations effectuées sur le modèle (IV.18) pour un désordre carré de largeur $W = 0,6$ en utilisant le β -doubling scheme. La moyenne sur le désordre est effectuée sur $\mathcal{S} = 1000$ échantillons et le couple (N_{eq}, N_m) est pris égal à $(50, 100)$. En vignette, la température inverse de convergence dans le fondamental (voir texte) β_{GS} est tracée en échelle logarithmique en fonction de \sqrt{L} pour 7 tailles différentes. Un fit de la forme $\ln \beta_{GS}(L) \simeq 0,74 + \sqrt{L}$ est obtenu (ligne pleine).

pour que le système soit dans son état fondamental décroît exponentiellement avec la racine carrée de la taille L , ce qui représente un défi au niveau numérique⁴. Il n'est cependant pas surprenant d'observer une telle loi d'échelle vu que le gap de taille fini obéit à $\ln \Delta_\epsilon \sim -\sqrt{L}$ dans la phase de singulets aléatoires [6]. Notons toutefois que la température de convergence de $C_{avg}^z(L/2)$ dans sa valeur à $T = 0$ est très certainement plus élevée que le « vrai » gap du système, mais son comportement en fonction de la taille L reste qualitativement valable⁵.

II. RÉSULTATS

Nous pouvons maintenant regarder le comportement de $C_{avg}^z(L/2)$ dans l'état fondamental en fonction de la taille des chaînes pour différentes intensités du désordre.

Les résultats, présentés dans la figure IV.8, vont dans le même sens que pour le

4. Dans le cas de la chaîne de spins 1 désordonnée, Bergkvist *et al.* [162] ont aussi du faire face à de tels effets.

5. Anders W Sandvik, communication privée.

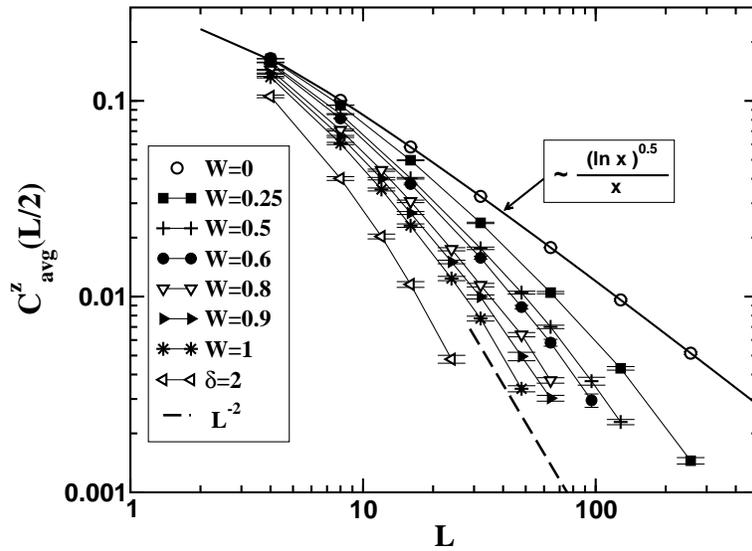


FIG. IV.8 – Fonctions de corrélation longitudinales moyennes à mi-distance $C_{avg}^z(L/2)$ tracées en fonction des tailles de chaînes L . Résultats de calculs Monte Carlo quantique SSE dans l'état fondamental de la chaîne XXX désordonnée avec $W = 0, 0,25, 0,5, 0,6, 0,8, 0,9, 1$, et $\delta = 2$ (de haut en bas). Pour chaque point, plus de 1000 échantillons ont été simulés. Les données pour le cas pur à $W = 0$, représentées par les cercles ouverts, suivent une loi $\propto \sqrt{\ln(L)}/L$ [équation (IV.19)] (courbe noire). La ligne brisée représente la loi de puissance attendue selon les prédictions de Fisher [6] avec un exposant $\eta_{RSP} = 2$. Figure extraite de la référence [219], publication n° 5.

cas XX étudié précédemment (voir la figure IV.2). En effet, on remarque que plus les tailles L sont petites et les intensités de désordre faibles, plus les courbes se rapprochent du comportement de la chaîne pure. À l'inverse, lorsque L et le désordre augmentent, les points tendent alors vers le comportement asymptotique en L^{-2} attendu dans la phase de singulets aléatoires [23, 6]. Par ailleurs, il est remarquable d'observer que même pour le plus fort désordre $\delta = 2$, correspondant à la distribution fortement singulière $\mathcal{P}(J) \sim J^{-1/2}$, un crossover entre le cas pur et la loi en L^{-2} est visible sur la figure IV.8. Toutefois à partir de $L \geq 16$, le comportement asymptotique est atteint. À l'instar de la chaîne XX, une telle caractéristique de crossover peut être étudiée à travers une loi d'échelle pour les fonctions de corrélation.

c) Loi d'échelle et longueur de crossover

La même démarche qu'en 1.2 c) est adoptée ici. En effet, définissant le paramètre sans dimension $x = L/\xi$, la fonction d'échelle $\tilde{c}(x) = C_{avg}^z(L)/C_{pur}^\alpha(L)$ est introduite. On peut alors récrire C_{avg}^z comme

$$C_{avg}^z(L) = \frac{\sqrt{\ln L}}{L} \tilde{c}(x), \quad (\text{IV.20})$$

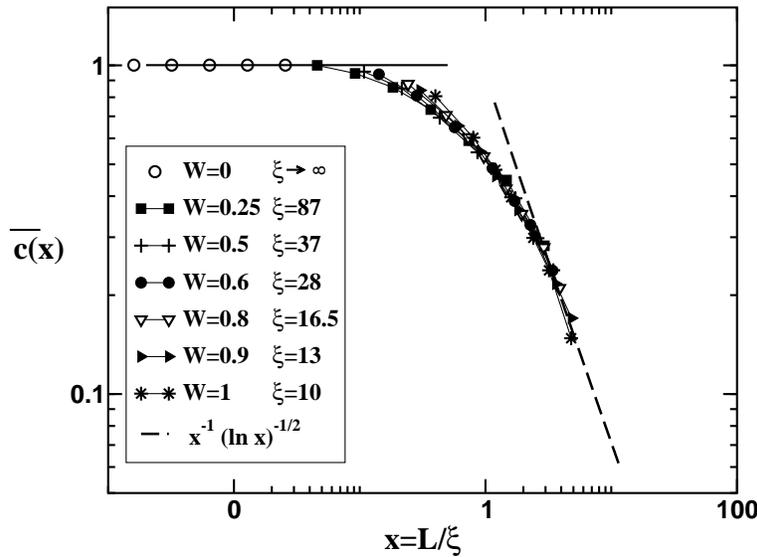


FIG. IV.9 – Fonction d'échelle $\tilde{c}(x)$, définie par (IV.20), obtenue par l'écrasement des données de la figure IV.8 en une courbe unique. Les longueurs de crossover ξ utilisées sont indiquées sur le graphe. La ligne pleine est associée au régime pur où $\tilde{c}(x) = 1$ et la courbe brisée correspond au point fixe de désordre infini avec $\tilde{c}(x) \sim (x\sqrt{\ln x})^{-1}$. Notons que $\tilde{c}(x)$ est normalisée à 1 pour $x \ll 1$. Figure extraite de la référence [219], publication n° 5.

où $\tilde{c}(x)$ va se comporter comme une constante dans le régime pur où $x \ll 1$ et dans le régime asymptotique $x \gg 1$, $\tilde{c}(x) \sim (x\sqrt{\ln x})^{-1}$. Entre les deux, un régime de crossover est attendu. Comme vu précédemment pour la chaîne XX, la longueur ξ , dépendant du désordre, va contrôler le crossover entre un point fixe pur instable et le point fixe de désordre infini, attractif. Sur la figure IV.9, la loi d'échelle (IV.20) est obtenue pour les données de la figure IV.8. Les longueurs de crossover ont été soigneusement adaptées pour chaque W afin d'obtenir le meilleur écrasement des données. $\xi(W = 1)$ a été choisie de façon à ce que la région de croisement entre les deux régimes soit centrées autour de $x \simeq 1$.

Le comportement de ξ en fonction du désordre, représenté sur la figure IV.10, est clairement divergent lorsque l'intensité du désordre tend vers 0. Le paramètre \mathcal{D} , mesurant le second moment des couplages aléatoires [équation (III.44)], est utilisé en (a) afin de comparer nos résultats numériques aux prédictions issues de la bosonisation [23], résumées page 36. L'analogie entre la longueur caractéristique de Doty et Fisher [équation (III.50)] et la longueur de crossover pour les corrélations spin-spin s'est révélée être très satisfaisante pour la chaîne XX. Dans le cas présent, où le désordre est distribué de façon isotrope sur la chaîne XXX [hamiltonien(IV.18)], on s'attend à ce que la prédiction (III.50) ne soit pas parfaitement vérifiée à cause de la présence du terme aléatoire dans la direction (Oz): $J(i)S_i^z S_{i+1}^z$. En effet, bien que marginalement non pertinent [222], ce dernier va introduire des corrections lo-

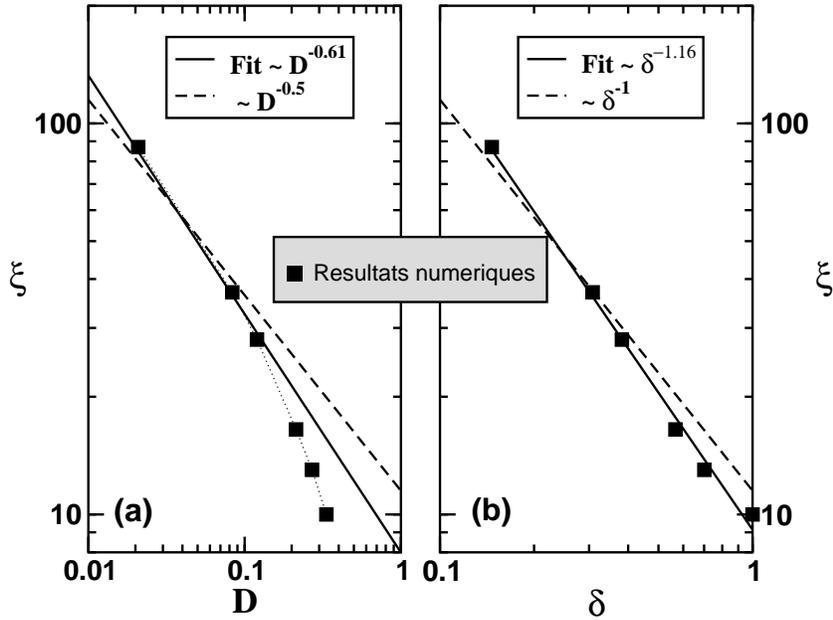


FIG. IV.10 – Dépendance de la longueur de crossover ξ en fonction de l'intensité du désordre pour la chaîne XXX gouvernée par le hamiltonien (IV.18). Les carrés noirs sont les données numériques tirées de l'écrasement des points sur la figure IV.9. (a) En fonction du paramètre \mathcal{D} , la loi de puissance $\xi \sim \mathcal{D}^{-0.61 \pm 0.1}$ (ligne pleine) est un fit pour les faibles désordres. La ligne brisée représente la loi de puissance (III.50) au point XXX : $\xi \sim \mathcal{D}^{-1/2}$. (b) En fonction de δ , les données numériques sont approchées par le fit $\xi \sim \delta^{-1.16 \pm 0.2}$ (ligne pleine). La ligne brisée représente la loi $\xi \sim \delta^{-\Phi}$ avec $\Phi = 1$ au point XXX.

garithmiques à l'exposant⁶. Nous observons sur la figure IV.10 (a) qu'effectivement, $\xi(\mathcal{D}) \sim \mathcal{D}^{-\gamma}$ lorsque $\mathcal{D} \rightarrow 0$ avec $\gamma > (3 - 2K_{XXX})^{-1} = 1/2$. Un fit des données numériques donne $\gamma = 0,6 \pm 0,1$. En fonction du paramètre δ , défini par (IV.11), nous voyons sur la figure IV.10 (b) que pour toute la gamme de désordres considérés ici, la loi de puissance $\xi(\delta) \sim \delta^{-\gamma'}$ décrit correctement les données numériques, avec $\gamma' \simeq 2\gamma$.

2 Transport de spin : localisation à une dimension

Dans cette partie, l'attention est portée sur les propriétés de transport de spin dans les chaînes antiferromagnétique de spins $\frac{1}{2}$ désordonnées. Nous avons vu dans la section 1.2 c) du chapitre III que la chaîne XXZ sans désordre exhibe une transition de type *Métal-Isolant* suivant un mécanisme de Mott [108] au point isotrope $\Delta = 1$. En effet la rigidité de spin, définie par l'équation (III.24), possède une valeur finie pour $0 \leq \Delta \leq 1$ (régime métallique dans le langage fermionique) et chute brutalement à 0 dès que $\Delta > 1$ (régime isolant).

6. Edmond Orignac, communication privée

Lorsque le système n'est plus homogène, la situation change de façon dramatique. Par exemple si seulement une constante d'échange dans la chaîne est légèrement plus faible que toutes les autres, le comportement critique de la chaîne de spin devient alors équivalent à celui d'une chaîne ouverte [223, 224], bloquant ainsi le transport de spin. Cette propriété a été vérifiée numériquement par Byrnes *et al.* [225] qui ont trouvé une rigidité de spin tendant vers 0 dans la limite thermodynamique.

Dans le cas où les couplages sont des nombres aléatoires tirés dans une distribution $\mathcal{P}(J)$, caractérisée par le second moment des couplages \mathcal{D} (III.44), nous avons vu dans la section 2.1 du chapitre III que le régime antiferromagnétique critique pur ($0 \leq \Delta \leq 1$, $\mathcal{D} = 0$) est déstabilisé par le désordre, $\forall \mathcal{D} > 0$ [23]. Les calculs numériques des fonctions de corrélation, présentés au début de ce chapitre, ont aussi validé ce fait. La transition de phase à $\mathcal{D} = 0$ peut être vue comme une transition de localisation [226] des fermions de Jordan-Wigner. En effet, Doty et Fisher [23] ont montré que les propriétés de la chaîne XXZ de spins $\frac{1}{2}$ perturbée par des termes aléatoires préservant la symétrie XY appartiennent à la classe d'universalité de Giamarchi-Schulz pour la localisation à une dimension [143]. Dans la phase localisée, la rigidité s'annule à la limite thermodynamique [147, 227] et pour un système fini de taille L , une fonction d'échelle

$$\rho_S(L) = g(L/\xi^*) \quad (\text{IV.21})$$

est attendue, avec $g(L/\xi^*) \rightarrow 0$ pour $L \gg \xi^*$. La longueur caractéristique associée à la transition d'Anderson est la longueur de localisation ξ^* . La connaissance d'une telle quantité peut se révéler essentielle pour une bonne compréhension des effets de taille finie et de crossover [217, 218, 219, 228].

D'une façon plus générale, les problèmes de transport unidimensionnel dans les milieux désordonnés [25, 229] ainsi que les effets de localisation et de courants permanents dans les anneaux désordonnés ont motivés récemment un grand nombre d'études théoriques [230, 147, 227, 231, 148, 232]. Dans le contexte de la physique mésoscopique, la compréhension de l'effet provoqué par le désordre sur le transport dans les systèmes finis est en effet cruciale [102, 101, 100]

2.1 Étude de la rigidité de spin de la chaîne XX désordonnée

a) Investigations numériques par diagonalisations exactes

I. CONDITIONS AUX BORDS « TWISTÉES »

Reprenons le hamiltonien de la chaîne XX désordonnée [équation (IV.3)] auquel nous imposons maintenant des conditions aux bords dites « twistées » [équation (III.23)]. On obtient

$$\mathcal{H}_{XX}^{\text{rand}}(\phi) = \sum_{i=1}^{L-1} \left[\frac{J(i)}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + \text{h.c.}) \right] + h_L(\phi), \quad (\text{IV.22})$$

où le terme de bord est $h_L(\phi) = \frac{J(L)}{2}(S_L^+ S_1^- e^{-i\phi} + \text{h.c.})$. En utilisant la transformation de Jordan-Wigner [équation (III.14)], le hamiltonien se réécrit

$$\mathcal{H}_{XX}^{\text{rand}}(\phi) = \sum_{i=1}^{L-1} \left[\frac{J(i)}{2} (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i) \right] - e^{i\pi\mathcal{N}} \frac{J(L)}{2} (c_L^\dagger c_1 e^{-i\phi} + c_1^\dagger c_L e^{i\phi}). \quad (\text{IV.23})$$

Le nombre total de fermions dans le système est $\mathcal{N} = \sum_{i=1}^L c_i^\dagger c_i$. L'état fondamental se trouve au demi-remplissage $\mathcal{N} = L/2$, correspondant au secteur de spin $S_{\text{tot}}^z = 0$. En choisissant un nombre total de sites $L = 4l$ (avec l entier), on s'assure que \mathcal{N} est pair. Il convient aussi de définir un angle de twist par site $\delta\phi = \phi/L$.

Dans le cas non désordonné, l'énergie par site du fondamental en fonction de $\delta\phi$ est donnée par [111]

$$\epsilon_0(L, \delta\phi) = -\frac{J}{L} \sum_p \cos\left(\frac{2\pi p}{L} + \delta\phi\right) = -\frac{J \cos \delta\phi}{L \sin \frac{\pi}{L}}, \quad (\text{IV.24})$$

d'où l'on peut extraire facilement la rigidité de spin

$$\rho_S(L) = \left. \frac{\partial^2 \epsilon_0(L, \delta\phi)}{\partial (\delta\phi)^2} \right|_{\phi=0} \quad (\text{IV.25})$$

$$= J \left(L \sin\left(\frac{\pi}{L}\right) \right)^{-1}. \quad (\text{IV.26})$$

II. ÉVALUATION NUMÉRIQUE DE LA RIGIDITÉ

Lorsque les couplages sont désordonnés, l'invariance par translation étant brisée, nous diagonalisons numériquement le hamiltonien (IV.23), à l'instar du calcul précédent pour les fonctions de corrélation. Notons toutefois que le calcul de l'énergie du fondamental nécessite uniquement d'évaluer les $L/2$ valeurs propres les plus basses de la matrice hamiltonienne ($L \times L$), celle-ci étant écrite dans une base appropriée. L'obtention de la rigidité de spin s'effectue via une dérivée numérique : en effet l'équation (IV.25) peut être exprimée de façon discrète comme

$$\rho_S \simeq 2 \frac{\epsilon_0(\phi) - \epsilon_0(0)}{(\delta\phi)^2}, \text{ pour } \phi \rightarrow 0. \quad (\text{IV.27})$$

Par conséquent, pour chaque échantillon, le calcul de ρ_S nécessite d'évaluer l'énergie deux fois : une à ϕ fini et une à $\phi = 0$. Toutefois, le choix de ϕ est assez délicat, comme l'illustre la figure IV.11 (a) sur laquelle les résultats numériques des corrections de taille finie $\rho_S(L) - \rho_S(\infty)$ sont montrés dans le cas pur pour trois valeurs différentes de $\delta\phi$. La précision du calcul numérique de $\rho_S(L)$ via l'expression (IV.27) est en effet très sensible au choix de $\delta\phi$. Le désaccord entre les simulations et le résultat exact (IV.26), observé pour $\delta\phi/\pi = 10^{-3}$ et $\delta\phi/\pi = 10^{-5}$ peut être interprété comme suit. Utilisant l'expression (IV.24) on peut réécrire (IV.27) comme

$$\rho_S \simeq 2 \frac{1 - \cos \delta\phi}{(\delta\phi)^2} J \left(L \sin \frac{\pi}{L} \right)^{-1}. \quad (\text{IV.28})$$

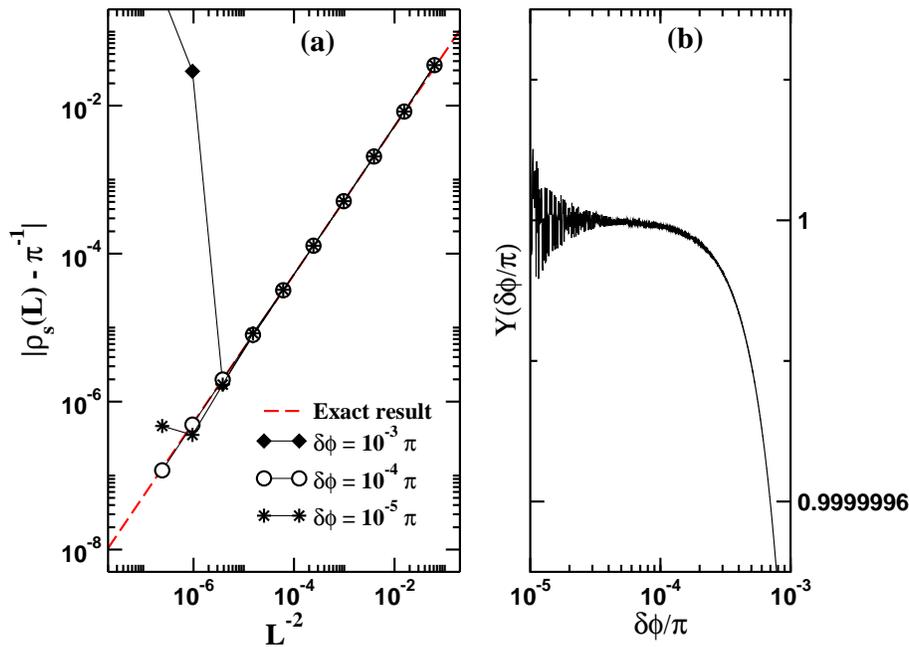


FIG. IV.11 – (a) Valeur absolue des corrections de taille finie de la rigidité de spin $|\rho_s(L) - \pi^{-1}|$ pour différentes valeurs de $\delta\phi$ calculées pour la chaîne XX pure. La ligne brisée est l'expression exacte $L \sin(\frac{\pi}{L})^{-1} - \pi^{-1}$ et les différents symboles représentent les résultats numériques d'un calcul en double précision de (IV.27) pour les trois valeurs de $\delta\phi$ indiquées sur le graphe. (b) Fonction $Y(\delta\phi) = 2(1 - \cos \delta\phi)/(\delta\phi)^2$ calculée numériquement en double précision. Figure extraite de la référence [228], publication n° 6.

La fonction $Y(\delta\phi) = 2(1 - \cos \delta\phi)/(\delta\phi)^2$ vaut exactement 1 pour $\delta\phi = 0$ et décroît lentement lorsque $\delta\phi$ augmente. Pourtant l'évaluation numérique de $Y(\delta\phi)$ est intrinsèquement limitée par la précision de l'ordinateur. En effet, il apparaît sur la figure IV.11 (b) que même en double précision, une instabilité numérique s'installe dès $\delta\phi/\pi < 10^{-4}$, caractérisée par des oscillations indésirables. Ceci impose donc à la procédure numérique une frontière pour la valeur minimale de $\delta\phi$ susceptible de fournir de bons résultats, ce qui est bien illustré par la figure IV.11 (a) pour la valeur $\delta\phi/\pi = 10^{-5}$. Par contre, lorsque $\delta\phi > 10^{-4}$ la fonction Y s'écarte de la valeur 1 de façon significative, eut égard à la précision requise par le calcul des corrections de taille finie. Pour $\delta\phi/\pi = 10^{-3}$, l'évaluation numérique de la rigidité présente en fait une précision inférieure à 10^{-6} . Par conséquent, les meilleurs résultats du calcul numérique de la dérivée discrète (IV.27) en double précision, sont obtenus pour $\delta\phi \simeq 10^{-4}\pi$. Dans la suite, nous utiliserons par conséquent la valeur $\delta\phi = 10^{-4}\pi$. Néanmoins, il est clair qu'un tel niveau de précision ($\leq 10^{-7}$) pour évaluer la rigidité de spin de la chaîne désordonnée ne semble pas être absolument nécessaire car les fluctuations dues au désordre seront très certainement plus importantes.

b) Résultats

I. COMPORTEMENT DE LA RIGIDITÉ MOYENNE

Utilisant la méthode numérique présentée précédemment, nous étudions maintenant le comportement de la rigidité de spin de la chaîne XX de spins $\frac{1}{2}$ (IV.22) dont les couplages aléatoires sont tirés dans une distribution carrée de largeur W (IV.7). Nous considérons une large plage pour les tailles de chaînes, de $L_{min} = 8$ jusqu'à $L_{max} = 2048$, ainsi que pour les intensités de désordre, prises entre $W_{min} = 0,025$ et $W_{max} = 1$. Afin de réduire au maximum les fluctuations entre échantillons, un très grand nombre de chaînes sont simulées : de $\mathcal{S} = 10^3$ pour la plus grande taille, et jusqu'à $\mathcal{S} = 10^5$ pour les plus petits systèmes. Ainsi, la rigidité moyenne est calculée

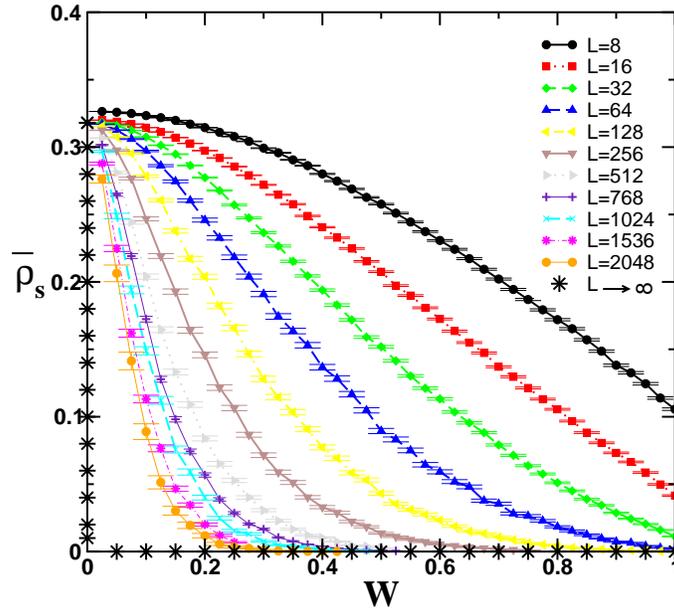


FIG. IV.12 – Valeur moyenne de la rigidité de spin $\bar{\rho}_S$ en fonction de l'intensité du désordre W , tracée pour différentes tailles de chaînes, indiquées sur le graphe. Résultats de simulations numériques par diagonalisations exactes, moyennés sur $\mathcal{S} = 10^3$ échantillons indépendants pour la plus grande taille et jusqu'à $\mathcal{S} = 10^5$ pour les plus petites. Les barres d'erreurs, très petites, sont visibles sur le graphe. Le comportement attendu à la limite thermodynamique est représenté par les étoiles noires. Figure extraite de la référence [228], publication n° 6.

numériquement suivant une somme sur tous les échantillons σ :

$$\bar{\rho}_S = \frac{2}{\mathcal{S}(\delta\phi)^2} \sum_{\sigma=1}^{\mathcal{S}} (\epsilon_0(\phi) - \epsilon_0(0))^\sigma. \quad (\text{IV.29})$$

A la limite thermodynamique elle subit une discontinuité à la transition à $W = 0$:

$$\bar{\rho}_S(\infty) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} & \text{si } W = 0 \\ 0 & \text{si } W \neq 0. \end{cases} \quad (\text{IV.30})$$

Pour les chaînes de tailles finies par contre, on voit clairement sur la figure IV.12 que $\rho_S(L, W) \rightarrow 0$ lorsque L augmente et ce d'autant plus vite que l'intensité du désordre W est grande.

II. ANALYSE D'ÉCHELLE POUR LA PHASE LOCALISÉE

La dimension physique de la rigidité (ou densité superfluide) est donnée, en dimension D , par l'inverse de (longueur $^{D-2} \times \xi_\tau$) [106], où ξ_τ est la longueur de corrélation temporelle. Pour un système de taille finie L , on s'attend donc à ce que dans la phase de singulets aléatoires, la rigidité obéisse à la loi d'échelle

$$\rho_S(L) \sim L^{2-D-z}, \quad (\text{IV.31})$$

où z est l'exposant dynamique et $D = 1$ pour la chaîne. Or, la phase de singulets aléatoires est caractérisée par un exposant dynamique formellement infini, impliquant ainsi que $\rho_S \rightarrow 0$ quand $L \rightarrow \infty$. Plus précisément, on a vu que le gap de taille finie $\Delta_\epsilon \sim L^{-z}$ est tel que $\ln \Delta_\epsilon \sim -\sqrt{L}$. Par conséquent, dans la phase localisée on prévoit que la rigidité de la chaîne de spins $\frac{1}{2}$ désordonnée se comporte, à des corrections logarithmiques près, comme

$$\ln \rho_S(L) \sim -\sqrt{L}. \quad (\text{IV.32})$$

III. FONCTION DE DISTRIBUTION

Pour vérifier une telle loi d'échelle, il est intéressant de regarder la fonction de distribution de la rigidité dans un régime où le désordre est suffisamment élevé pour vérifier le comportement asymptotique IV.32. Pour un désordre $W = 0,5$, les histogrammes des valeurs de ρ_S sont construits pour des tailles allant de $L = 16$ à $L = 512$ avec pour chaque taille $\mathcal{S} = 10^4$ échantillons indépendants. Sur la figure IV.13 (a), les distributions des logarithmes de ρ_S sont tracées et un élargissement des courbes à mesure que L augmente est observé, confirmant ainsi le fait que $z = \infty$. L'équation (IV.32) nous suggère que la quantité $\ln \rho_S(L)/\sqrt{L}$ est un invariant, ce qui est bien vérifié sur la figure IV.13 (b) où la distribution $P(\ln \rho_S(L)/\sqrt{L})$ exhibe un comportement universel, invariant d'échelle.

2.2 Transition de localisation

A partir des données numériques présentées sur la figure IV.12, nous pouvons maintenant analyser en détail la transition vers la phase localisée qui a lieu à $W = 0$, en regardant le comportement de $\overline{\rho_S}$ en fonction de la taille L , et ce pour des désordres faibles.

a) Crossover entre le régime métallique pur et la phase localisée de singulets aléatoires

Sur la figure IV.14, on observe que la rigidité de spin moyenne tend vers 0 lorsque la taille des chaînes augmente. Le régime asymptotique (IV.32) apparaît manifestement dès $L \simeq 100$ pour les désordres $W \geq 0,3$. Cependant nous voyons que le régime pur $\rho_S \simeq 1/\pi$ demeure robuste jusqu'à de très grandes tailles lorsque

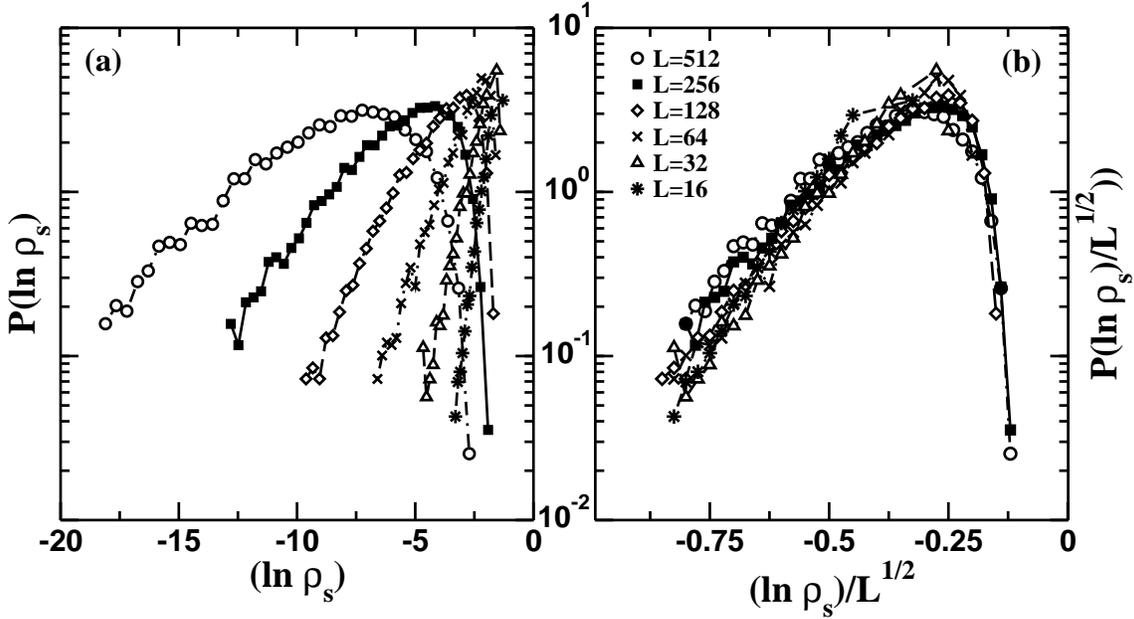


FIG. IV.13 – Distribution de la rigidité de spin ρ_s obtenue pour 10^4 échantillons avec $W = 0,5$. Les différentes tailles utilisées sont indiquées sur le graphe. (a) Pour les différents L , les $P(\ln \rho_s)$ sont tracées en fonction de $\ln \rho_s$ en échelle log-linéaire. (b) Écrasement des données montrées en (a) sur la courbe $P(\ln \rho_s / \sqrt{L})$, invariante d'échelle. Figure extraite de la référence [228], publication n° 6.

$W \rightarrow 0$. Ceci est typique d'un comportement de crossover, à l'image des fonctions de corrélations de spin étudiées en section 1. Afin de mieux décrire ce phénomène de crossover, la fonction d'échelle $g(x)$, écrite en (IV.21), est étudiée. En fonction de $x = L/\xi^*$, $\xi^*(W)$ étant la longueur de localisation, trois régimes sont à considérer :

- (i) Si $x \ll 1$, le système semble délocalisé avec $g \simeq \pi^{-1}$.
- (ii) Si $x \gg 1$, le comportement est celui de la phase localisée : $\ln g \sim -\sqrt{x}$.
- (iii) Dans la région intermédiaire où $x \sim 1$, un crossover entre le point fixe pur, répulsif, et le point fixe de désordre infini, attractif, est attendu.

La fonction $g(x)$, obtenue par l'écrasement des données de la figure IV.14, est représentée sur la figure IV.15. Notons que pour $W = 0,225$ nous avons choisi $\xi^* = 100$ de façon à ce que la région (ii) de crossover soit centrée autour de $x = L/\xi^* \simeq 1$. Les autres estimations de ξ^* ont été soigneusement ajustées afin d'obtenir le meilleur écrasement des données sur une courbe unique. Les trois régimes mentionnés plus haut sont alors parfaitement visibles

b) Longueur de localisation

Le comportement de la longueur de localisation ξ^* , extraite de la figure IV.15, est représenté en fonction du désordre sur la figure IV.16. Les résultats numériques, tracés en fonction de $\mathcal{D} = W^2/3$ sur la figure IV.16 (a), sont comparés à la loi de puissance $\xi^* \sim \mathcal{D}^{-1}$ prédite par la bosonisation. Pour $\mathcal{D} < 0,1$, l'accord est

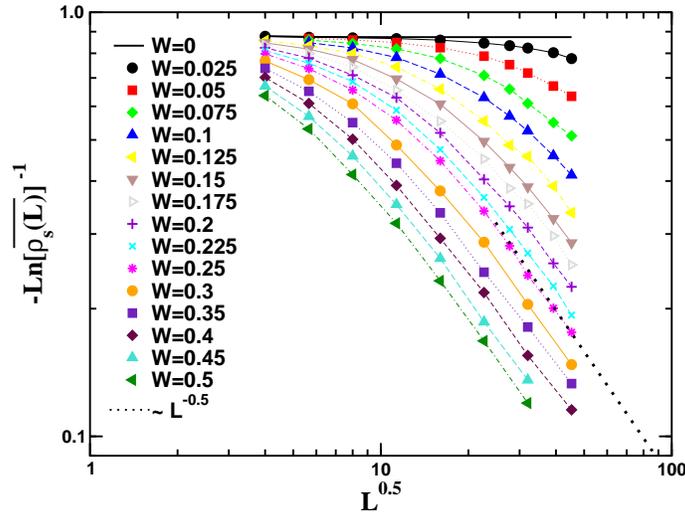


FIG. IV.14 – Inverse du logarithme de la rigidité de spin moyennée sur 10^4 échantillons tracée en fonction de \sqrt{L} pour différentes valeurs du désordre W , indiquées sur le graphe. Les barres d'erreurs plus petites que les tailles de symboles ont été effacées pour une plus grande clarté. La courbe continue représente le cas pur et la ligne en pointillés le comportement asymptotique (IV.32) dans la phase de singulets aléatoires. Figure extraite de la référence [228], publication n° 6.

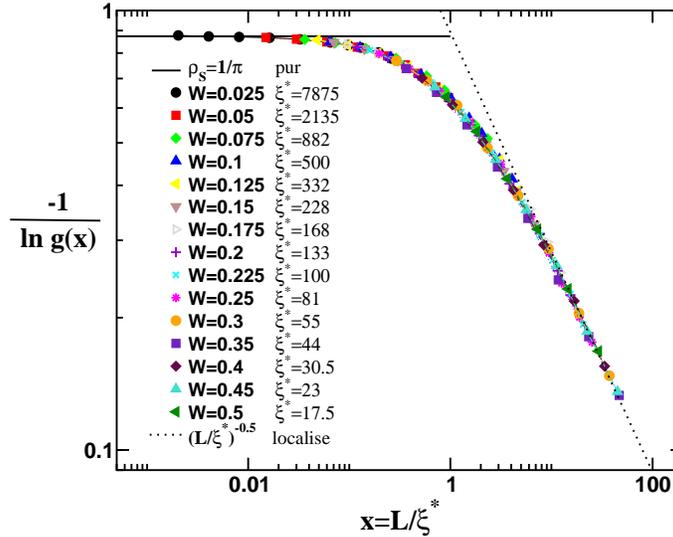


FIG. IV.15 – Fonction d'échelle $g(x)$ obtenue par l'écrasement des données de la figure IV.14. Les ξ^* sont indiquées sur le graphes pour chaque intensité de désordre. Les comportements pur et localisé sont respectivement représentés par les lignes pleine et pointillée. Figure extraite de la référence [228], publication n° 6.

excellent mais à l'instar de la longueur de crossover étudiée dans la section 1.2 c), une déviation à la loi de puissance est observée lorsque $\mathcal{D} > 0.1$. En revanche, en fonction du paramètre δ , on voit sur la figure IV.16 (b) que l'accord avec la loi de

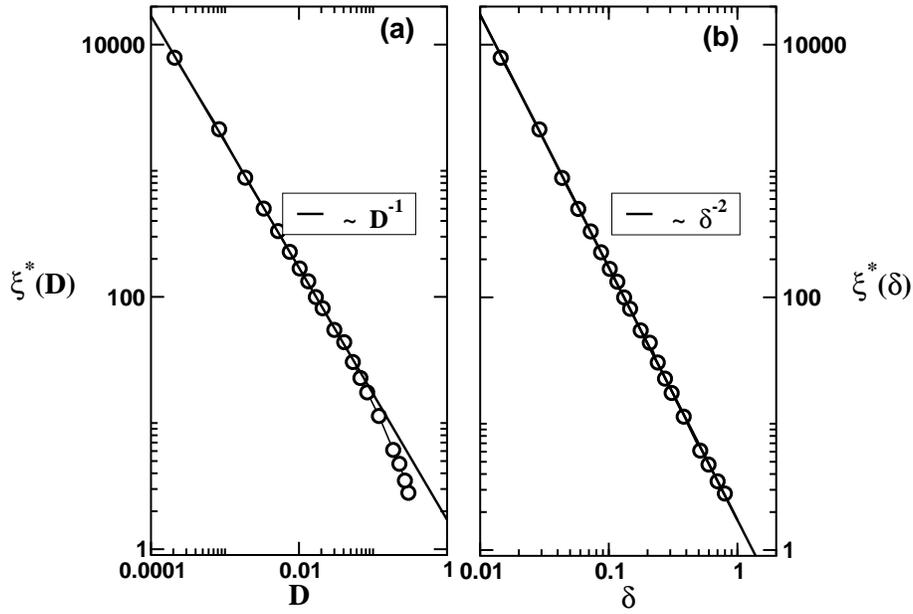


FIG. IV.16 – Comportement de la longueur de localisation ξ^* de la chaîne XX désordonnée en fonction de l'intensité du désordre. Les résultats des simulations numériques sont représentés par (\circ) et les droites sont des lois de puissances, explicitées sur le graphe. (a) En fonction du paramètre \mathcal{D} et (b) en fonction de δ . Figure extraite de la référence [228], publication n° 6.

puissance

$$\xi^* \sim \delta^{-2} \quad (\text{IV.33})$$

est parfait pour toute la gamme de désordre considérée ici.

3 Conclusion

Dans ce chapitre, les effets de taille finie ont été analysés dans des chaînes de spins $\frac{1}{2}$ désordonnées. Que ce soit par des diagonalisations exactes au point XX à l'aide d'un mapping vers des fermions libres, ou par des simulations Monte Carlo quantique SSE au point isotrope XXX , les conclusions pour la dépendance en taille des fonctions de corrélation sont similaires. En effet, nous avons montré que dans un système de longueur L , à $T = 0$ le régime asymptotique où

$$c_{avg}^\alpha \left(\frac{L}{2} \right) \sim \frac{1}{L^2},$$

caractéristique de la phase de singulets aléatoire, ne peut être observé que si $L \gg \xi$. Cette longueur d'échelle ξ , appelée *longueur de crossover* a ainsi pu être identifiée sans ambiguïté. De plus, sa dépendance en fonction de l'intensité du désordre \mathcal{D} a pu être exprimée et comparée avec succès à la longueur d'échelle émergeant des calculs de bosonisation [176]; la divergence de ξ lorsque $\mathcal{D} \rightarrow 0$ démontrant notamment la pertinence de la phase de singulets aléatoires $\forall \mathcal{D} > 0$.

Une analogie entre la transition magnétique vers la *phase de singulets aléatoires* et la transition métal-isolant vers une *phase localisée* a aussi été explorée. Il est apparu que la longueur de localisation ξ^* , caractéristique de la transition d'Anderson, et la longueur de crossover ξ , contrôlant la renormalisation vers le point fixe de désordre infini, représentent en fait l'unique longueur d'échelle qui caractérise la transition entre une phase pure-métallique et une phase infiniment désordonnée-localisée.

A faible désordre, cette distance caractéristique est divergente comme

$$\xi(\mathcal{D}) \sim \mathcal{D}^{-\gamma} \quad (\text{IV.34})$$

où $\gamma = \frac{1}{3-2K}$, K étant le paramètre de Luttinger. En revanche, pour des intensités du désordre plus importantes, la loi précédente n'est plus valable et, à l'aide du nouveau paramètre de désordre δ , la variation suivante

$$\xi(\delta) \sim \delta^{-\frac{2}{3-2K}} \quad (\text{IV.35})$$

semble décrire parfaitement la divergence. Signalons tout de même que dans le cas de la chaîne XXX désordonnée de façon isotrope, la présence du terme d'Ising, marginal, introduit des corrections logarithmiques.

Outre les résultats qui viennent d'être mentionnés, cette étude numérique peut revêtir un caractère plus général dans le contexte des systèmes magnétiques désordonnés. En effet, nombreux sont les modèles pour lesquels une intensité finie du désordre $\mathcal{D}_c \neq 0$ est nécessaire pour y observer une transition vers la phase de singulets aléatoires. Par exemple les systèmes possédant un gap de spin comme les chaînes de spins 1 ou les échelles de spins, voient leur gap demeurer robuste face au faible désordre, ainsi qu'une phase de type Griffiths pour des désordres intermédiaires. Une identification précise de la valeur critique du désordre \mathcal{D}_c serait très certainement facilitée en analysant la divergence de ξ lorsque $\mathcal{D} \rightarrow \mathcal{D}_c^+$.

Chapitre V

Impuretés non magnétiques dans des chaînes de spins $\frac{1}{2}$ frustrées faiblement couplées

Sommaire de ce chapitre

1	Introduction	86
2	Prise en compte des effets bidimensionnels	86
2.1	Chaînes faiblement couplées	86
a)	Champ moyen auto-cohérent	87
b)	Convergence du champ moyen	88
c)	Diagramme des phases	90
2.2	Echange à 4 spins	91
a)	Rappels sur l'échange cyclique	91
b)	Traitement en champ moyen : équivalence avec un modèle spin-phonon	92
c)	Diagramme des phases	94
d)	Dégénérescence de l'état fondamental	95
3	Effets des impuretés non magnétiques	96
3.1	Le cas d'une seule impureté	97
a)	Formation de moments locaux	97
b)	Longueur de confinement du soliton	98
3.2	Le cas de deux impuretés non magnétiques	100
a)	Couplage effectif entre solitons	100
b)	Vers un modèle effectif	101
4	Conclusion partielle	104

1 Introduction

L'effet créé par l'introduction d'impuretés non magnétiques dans des systèmes spin-Peierls a été abordé pour trois modèles unidimensionnels dans la section 2.2 du chapitre III. Le rôle joué par les phonons a par ailleurs fait l'objet de nombreuses études théoriques [120, 181, 182]. Il a notamment été montré que le mécanisme de formation de moments magnétiques localisés aux voisinages des impuretés était lié au couplage avec le réseau et aux effets interchaînes [184].

Dans le cas du composé spin-Peierls CuGeO_3 (voir la revue expérimentale du chapitre II), la valeur relativement importante de l'interaction antiferromagnétique interchaîne $J_{\perp} \simeq 0,1J_1$ est bien admise [35], J_1 étant le couplage entre spins $\frac{1}{2}$ plus proches voisins dans la direction des chaînes. L'interaction frustrante αJ_1 entre seconds voisins est aussi un élément important. Des estimations théoriques [39, 38] pour CuGeO_3 suggèrent par exemple que $\alpha \sim 0,3 > \alpha_c \simeq 0,24$.

Ce chapitre est consacré à l'étude théorique d'un modèle de chaînes de spins $\frac{1}{2}$ où la frustration ainsi que les couplages interchaînes sont pris en compte simultanément. Dans la section 2.1, une approche de type champ moyen est d'abord introduite afin de traiter les petits couplages bidimensionnels. Des diagonalisations exactes par la méthode de Lanczos, couplées au champ moyen, nous permettent alors de simuler des systèmes relativement grands (16×8), pour lesquels le diagramme des phases dans le plan frustration-couplage transverse est construit. L'effet d'un échange cyclique à 4 spins J_4 , introduit dans le système de chaînes couplées, est analysé en section 2.2, dans la limite des faibles couplages. Le diagramme des phases, ainsi que les propriétés de l'état fondamental dimérisé, sont ensuite présentés en fonction de J_4 . La seconde partie est consacrée à l'étude d'une ou plusieurs impuretés non magnétiques introduites dans la phase dimérisée. Dans le cas d'une seule impureté, traité en section 3.1, la formation d'un spin $\frac{1}{2}$ effectif localisé est analysée à travers le mécanisme de confinement du soliton. Ce dernier se révèle être contrôlé par le couplage à 4 spins. Pour des concentrations finies en impuretés, chaque impureté libère un spin effectif. C'est à des échelles d'énergies inférieures au gap que l'interaction effective entre ces spins se met en place. Le calcul pour deux impuretés, présenté dans la section 3.2, nous permet de construire un modèle effectif pour lequel seules quelques échelles de longueurs et d'énergies suffisent à décrire le comportement à toute distance d'un ensemble d'impuretés aléatoirement distribuées.

2 Prise en compte des effets bidimensionnels

2.1 Chaînes faiblement couplées

Le modèle bidimensionnel de départ est le suivant :

$$\mathcal{H}_{2D}(J_1, \alpha, J_{\perp}) = \sum_{i=1}^L \sum_{a=1}^M [J_1 \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a} + \alpha J_1 \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+2,a} + J_{\perp} \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i,a+1}]. \quad (\text{V.1})$$

J_1 est le couplage entre premiers voisins, α est le terme de frustration et J_\perp est le couplage interchaînes. L'indice i indexe les spins $S = \frac{1}{2}$ le long des chaînes de longueur L et a est l'indice dans la direction transverse où M chaînes sont couplées. L et M sont pairs et des conditions aux bords périodiques sont choisies dans les deux directions: $\vec{S}_{i,a} = \vec{S}_{i+L,a}$ et $\vec{S}_{i,a} = \vec{S}_{i,a+M}$.

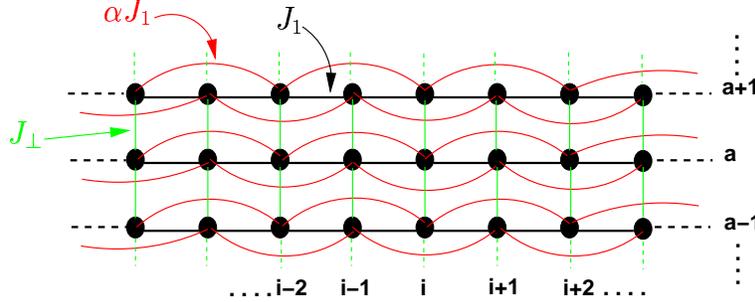


FIG. V.1 – Représentation schématique du système de chaînes de spins $\frac{1}{2}$ frustrées et couplées. Dans la direction des chaînes, indexées par i , les couplages sont respectivement notés J_1 (en noir) pour les premiers voisins et αJ_1 (en rouge) pour les seconds voisins. J_\perp (en vert) désigne l'interaction dans la direction transverse, indexée par a . Les cercles noirs représentent les sites magnétiques portant chacun un spin $S = \frac{1}{2}$.

Bien évidemment un tel modèle pourrait être étudié directement par diagonalisations exactes sur le réseau bidimensionnel de taille $L \times M$ mais, comme nous en avons discuté précédemment (section 3.2 du chapitre III), la taille de l'espace de Hilbert croît exponentiellement avec le nombre de spins. A l'heure actuelle, le nombre maximal de spins $\frac{1}{2}$ que l'on peut simuler exactement par la méthode de lanczos ne dépasse pas 40 en utilisant toutes les symétries et en fournissant un effort très conséquent en terme de programmation [197]. C'est pourquoi nous allons approximer le hamiltonien (V.1) afin de pouvoir simuler des réseaux de plus grandes tailles.

a) Champ moyen auto-cohérent

I. PRINCIPE

Dans la limite où les chaînes sont faiblement couplées, le terme transverse du hamiltonien (V.1) peut être traité en champ moyen. A l'origine, une telle approche fut appliquée par Schulz [233] à l'étude de l'instabilité antiferromagnétique dans les chaînes de spins $\frac{1}{2}$ faiblement couplées. Dans la limite où $J_\perp \ll J_1$, on applique le champ moyen au hamiltonien (V.1) qui devient

$$\mathcal{H}_{2D}^{\text{CM}}(J_1, \alpha, J_\perp) = \sum_{i=1}^L \sum_{a=1}^M [J_1 \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a} + \alpha J_1 \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+2,a} + h_{i,a} S_{i,a}^z - J_\perp \langle S_{i,a}^z \rangle \langle S_{i,a+1}^z \rangle], \quad (\text{V.2})$$

où

$$h_{i,a} = J_\perp (\langle S_{i,a+1}^z \rangle + \langle S_{i,a-1}^z \rangle) \quad (\text{V.3})$$

est défini comme un champ magnétique effectif auto-cohérent.

En l'absence d'impureté, il y a invariance par translation dans les deux directions: toutes les chaînes sont alors équivalentes. Le système de chaînes couplées se réduit donc à une seule chaîne plongée dans un champ magnétique alterné $h_i = \pm 2(-1)^i J_\perp m$ où m est le paramètre d'ordre antiferromagnétique défini par

$$\langle S_{i,a}^z \rangle = (-1)^{i+a} m.$$

Le hamiltonien effectif unidimensionnel s'écrit alors

$$\mathcal{H}_{1D}^{\text{eff}}(J_\parallel, \alpha, J_\perp) = \sum_{i=1}^L [J_\parallel \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \alpha J_\parallel \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2} + 2m J_\perp (-1)^i S_i^z] + \text{constante.} \quad (\text{V.4})$$

En l'absence de frustration $\alpha = 0$, Schulz a montré que la mise en ordre antiferromagnétique est immédiate $\forall J_\perp > 0$, $m \sim \sqrt{J_\perp}$ [233].

II. EXEMPLE

Dans le cas où $\alpha \neq 0$, l'équation d'auto-cohérence du champ moyen $m = (-1)^i \langle S_i^z \rangle$, est résolue numériquement sur des chaînes de taille finie par la méthode de Lanczos. Par exemple au point MG où $\alpha = 0,5$, la mise en ordre antiferromagnétique ne s'établit que pour des valeurs $J_\perp > J_\perp^c \simeq 0,107$ comme le montre la figure V.2 (les corrections de taille finie étant négligeables dans ce cas). Notons aussi que le paramètre d'ordre antiferromagnétique se comporte de façon continue au point critique, ce qui suggère une transition du second ordre.

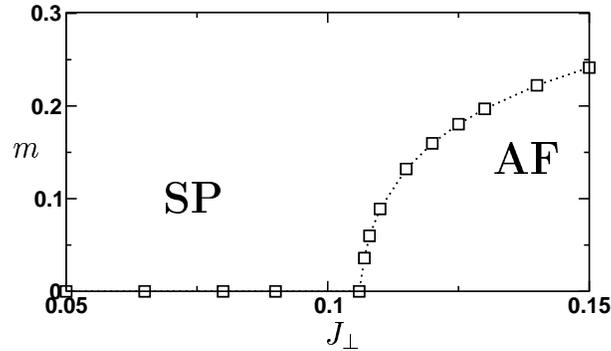


FIG. V.2 – Paramètre d'ordre antiferromagnétique m calculé par diagonalisations exactes sur des chaînes MG ($\alpha = 0,5$) couplées de longueurs $L = 12$, tracé en fonction du couplage transverse J_\perp . Les phases antiferromagnétique et spin-Peierls sont respectivement notées AF et SP.

b) Convergence du champ moyen

La technique numérique utilisée consiste simplement à appliquer l'algorithme de Lanczos pour diagonaliser exactement une chaîne frustrée de spins $\frac{1}{2}$ soumise à un champ magnétique variable. La convergence de la procédure vers l'état fondamental requiert de diagonaliser plusieurs fois (V.4), jusqu'à ce que l'équilibre soit

atteint. A chaque étape p , la chaîne est diagonalisée et le paramètre d'ordre anti-ferromagnétique $m(p)$ est calculé exactement puis, réinjecté à l'étape suivante dans le « nouveau » champ magnétique $h_i(p) = 2(-1)^i J_\perp m(p)$. La procédure est ainsi répétée jusqu'à ce que $m(p)$ converge vers une valeur constante m^* (point fixe).

Le point de départ du calcul numérique est une valeur arbitraire $m(0) \neq 0$ et la convergence vers m^* est alors étudiée en fonction du nombre p d'itérations. Empiriquement, une loi exponentielle de la forme

$$m(p) - m^* \propto \exp(-p/\xi_\tau) \quad \text{si } p \gg \xi_\tau, \quad (\text{V.5})$$

est trouvée. On identifie alors ξ_τ comme l'échelle de temps caractéristique de la convergence du champ moyen (voir la figure V.3). En effet, si l'on définit la vitesse de convergence du champ moyen comme $v(p) = |m(p+1) - m(p)|$, on voit en vignette sur la figure V.3 que cette quantité exhibe une décroissance vers 0 de la forme

$$v(p) \propto \exp(-t) \quad \text{avec } t = \frac{p}{\xi_\tau} \gg 1. \quad (\text{V.6})$$

Notons de surcroît que l'on peut qualifier la convergence du champ moyen d'universelle dans le sens où le choix de $m(0) \neq 0$ n'a pas d'influence sur le comportement aux temps $p \gg \xi_\tau$.

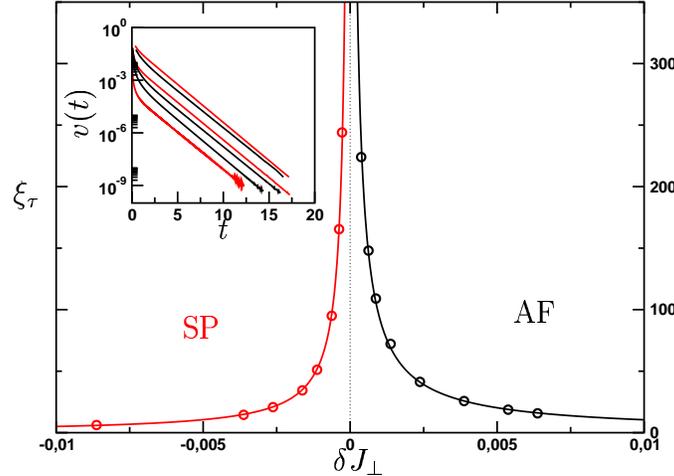


FIG. V.3 – Comportement de l'échelle de temps caractéristique ξ_τ , associée à la convergence du champ moyen interchaîne, en fonction de la distance au point critique $\delta J_\perp = J_\perp - J_\perp^c$. Résultats de simulations Lanczos sur une chaîne MG ($\alpha = 0,5$) représentés par (\circ) pour la phase spin-Peierls (SP) et par (\circ) pour la phase antiferromagnétique (AF). Les lignes sont des lois de puissances $\xi_\tau \sim |\delta J_\perp|^{-\mu}$ avec $\mu \simeq 1$, discutée dans le texte. En vignette, décroissance universelle de la vitesse de convergence de la procédure champ moyen $v(t)$ en fonction de l'indice d'itération renormalisé $t = \frac{p}{\xi_\tau}$. Résultats de simulations Lanczos sur le modèle (V.4) avec $L = 12$ et $\alpha = 0,5$ et, de haut en bas, $J_\perp = 0,075; 0,13; 0,1; 0,11; 0,108; 0,106$. Les lignes rouges sont utilisées pour la phase spin-Peierls ($m(t) \rightarrow m^* = 0$) et les noires pour la phase antiferromagnétique ($m(t) \rightarrow m^* \neq 0$).

Le comportement de la longueur temporelle caractéristique ξ_τ en fonction de la distance au point critique $\delta J_\perp = J_\perp - J_\perp^c$ est remarquable, comme le montre la figure V.3. Le point critique séparant les phases spin-Peierls et AF étant donné par $J_\perp^c \simeq 0,107$ pour $\alpha = 0,5$ (voir figure V.2), on observe clairement que l'échelle de temps caractéristique ξ_τ diverge à l'approche de cette frontière. On peut caractériser cette divergence par une loi de puissance de la forme

$$\xi_\tau \sim |\delta J_\perp|^{-\mu} \quad \text{si } \delta J_\perp \rightarrow 0,$$

avec les valeurs $\mu \simeq 1,06$ si $\delta J_\perp < 0$ et $\mu \simeq 0,95$ si $\delta J_\perp > 0$ extraites de fits numériques (voir figure V.3). Ceci suggère fortement que l'exposant dynamique à l'approche de la transition est $z = 1$, corroborant ainsi le fait que la transition est d'ordre deux¹.

D'un point de vue purement technique, on voit que près d'un point critique quantique, la procédure de champ moyen interchaînes subit un ralentissement critique qui se traduit au niveau numérique par des temps de calcul qui explosent au voisinage de la transition SP-AF. Par exemple, l'obtention du couplage critique J_\perp^c avec une précision de 10^{-4} requiert environ 1000 diagonalisations exactes successive d'une chaîne.

c) Diagramme des phases

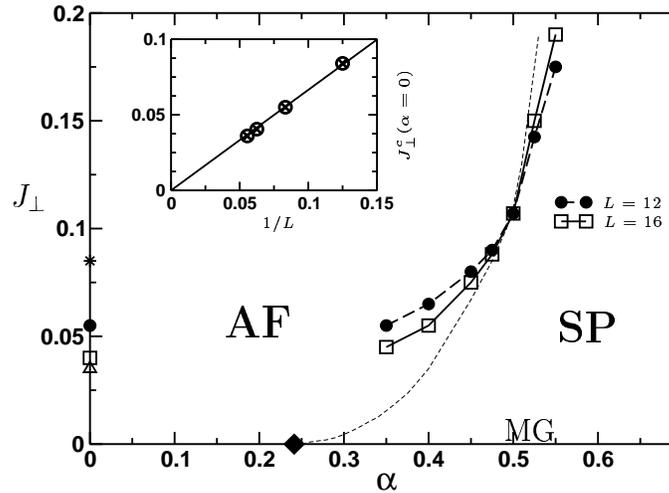


FIG. V.4 – Diagramme des phases du modèle (V.4) dans le plan (α, J_\perp) . Les points, issus de calculs Lanczos sur des systèmes de tailles finies ($L = 12$ et $L = 16$), séparent une phase dimérisée spin-peierls (SP) d'une phase ordonnée antiferromagnétique (AF). Le losange noir montre le point critique à $\alpha_c \simeq 0,24$ et le point à $\alpha = 0,5$ est signifié par MG. La ligne brisée représente le comportement attendu à la limite thermodynamique. Le long de la ligne $\alpha = 0$, les différents symboles représentent $J_\perp^c(L, \alpha = 0)$ pour, de haut en bas, $L = 8, 12, 16, 18$. En vignette, le comportement de $J_\perp^c(L, \alpha = 0)$ est tracé en fonction de $1/L$.

¹ P. Lecheminant, communication privée

Nous présentons maintenant le diagramme des phases dans le plan (α, J_{\perp}) sur la figure V.4, calculé en diagonalisations exactes via le champ moyen interchaîne pour $L = 12$ et $L = 16$ sites dans la direction des chaînes. Notons d'abord que dans tout le regime où $\alpha < \alpha_c \simeq 0.24$, pour les tailles finies L , la mise en ordre antiferromagnétique s'établit à $J_{\perp}^c(L) \rightarrow 0$ comme $1/L$ lorsque $L \rightarrow \infty$ (voir la vignette sur la figure V.4 pour le cas $\alpha = 0$). Par contre si $\alpha > \alpha_c$, une ligne de transition $J_{\perp}^c(\alpha) \neq 0$ apparaît². Les résultats de simulations Lanczos sur des chaînes de tailles finies nous permettent de tracer cette ligne critique sur la figure V.4. Il est remarquable de voir que les effets de tailles finies sont absents au point MG ce qui confère à ce point un statut particulier sur lequel nous allons nous appuyer par la suite pour nos calculs numériques sur des systèmes finis.

2.2 Echange à 4 spins

a) Rappels sur l'échange cyclique

Bien que notre but ne soit pas de présenter ici une revue sur les échanges cycliques, il convient toutefois de rappeler brièvement quelques éléments importants. Étudiés depuis très longtemps dans les films d'³He [235], les échanges multiples ont récemment connu un regain d'intérêt dans la thématique du magnétisme frustré, à travers notamment le problème de l'échange multiple pour le modèle de Heisenberg sur le réseau triangulaire [236]. De plus, dans certains oxydes de cuivre, la pertinence d'un échange à 4 spins a été démontrée sans ambiguïté, comme dans le matériau bidimensionnel La_2CuO_4 [237, 238]. Citons aussi le composé à échelle de spins $\text{La}_x\text{Ca}_{14-x}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ qui, suite à la découverte expérimentale d'un échange cyclique non négligeable [239], a motivé de nombreuses investigations théoriques [240, 241, 242, 243, 244].

Le couplage cyclique dans une plaquette de 4 spins, schématisée sur la figure V.5, se décompose en plusieurs termes bilinéaires et biquadratiques comme

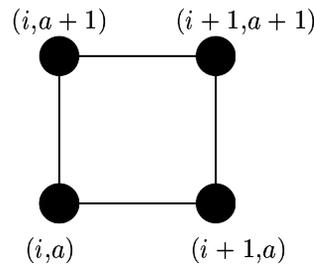


FIG. V.5 – Représentation schématique d'une plaquette de 4 spins.

2. Bien que les calculs numériques sur des systèmes de tailles finies ne permettent pas d'appréhender quantitativement le comportement de cette ligne critique près de α_c , les résultats analytiques obtenus par Fabrizio *et al.* [234] sur un modèle relié peuvent être utilisés ici. En effet, la chaîne $J_1 - J_2$ isolée plongée dans un champ alterné h_a exhibe une ligne critique qui s'ouvre pour $\alpha > \alpha_c$ comme $h_a^c \sim \Delta_s^{3/2}$ [234], Δ_s étant le gap de spin de la chaîne $J_1 - J_2$ dont l'ouverture s'effectue comme $\exp(-\text{const}/(\alpha - \alpha_c))$.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{\text{cyc}} = & \frac{1}{4} J_4 \left(\vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a} + \vec{S}_{i+1,a+1} \cdot \vec{S}_{i,a+1} \right. \\
 & + \vec{S}_{i+1,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a+1} + \vec{S}_{i,a+1} \cdot \vec{S}_{i,a} \\
 & + \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a+1} + \vec{S}_{i+1,a} \cdot \vec{S}_{i,a+1} \\
 & + 4(\vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a})(\vec{S}_{i+1,a+1} \cdot \vec{S}_{i,a+1}) \\
 & + 4(\vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i,a+1})(\vec{S}_{i+1,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a+1}) \\
 & \left. - 4(\vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a+1})(\vec{S}_{i+1,a} \cdot \vec{S}_{i,a+1}) \right) \\
 & + \text{constante}, \tag{V.7}
 \end{aligned}$$

où J_4 est la constante d'échange cyclique. Interressons-nous à l'effet d'un tel couplage sur notre système bidimensionnel de chaînes frustrées, schématisé par la figure V.6. On peut déjà inclure l'effet des termes bilinéaires intrachaîne (première ligne de l'équation (V.7)) en redéfinissant J_1 . Le hamiltonien s'écrit alors, à une constante près,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{2D}(J_1, \alpha, J_\perp, J_4) = & \sum_{i=1}^L \sum_{a=1}^M \left(J_1 \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a} + \alpha J_1 \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+2,a} + (J_\perp + \frac{J_4}{2}) \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i,a+1} \right. \\
 + & J_4 [(\vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a})(\vec{S}_{i+1,a+1} \cdot \vec{S}_{i,a+1}) + (\vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i,a+1})(\vec{S}_{i+1,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a+1}) \\
 - & \left. (\vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a+1})(\vec{S}_{i+1,a} \cdot \vec{S}_{i,a+1}) + \frac{1}{4} \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a+1} + \frac{1}{4} \vec{S}_{i,a+1} \cdot \vec{S}_{i+1,a} \right]. \tag{V.8}
 \end{aligned}$$

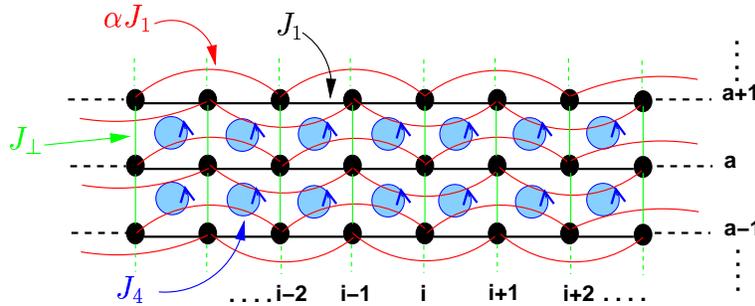


FIG. V.6 – Représentation schématique du système de chaînes de spins $\frac{1}{2}$ frustrées et couplées, similaire à la figure V.1, avec ici le couplage cyclique J_4 représenté en bleu.

b) Traitement en champ moyen : équivalence avec un modèle spin-phonon

I. HAMILTONIEN EN CHAMP MOYEN

Bien qu'il existe certains composés où J_4/J_1 n'est pas négligeable [242], on s'attend généralement à ce que les effets d'échanges cycliques soient des effets perturbatifs du 4^{ème} ordre, d'amplitude faible. Nous allons par conséquent appliquer la même

procédure de champ moyen interchaîne que précédemment au système gouverné par le hamiltonien (V.8), dans la limite où $J_4 \ll J_1$ et $J_\perp \ll J_1$.

Les termes bilinéaires interchaînes sont alors remplacés par

$$S_{i,a}^z \left[J_\perp (\langle S_{i,a+1}^z \rangle + \langle S_{i,a-1}^z \rangle) + \frac{J_4}{4} (\langle S_{i-1,a+1}^z \rangle + 2\langle S_{i,a+1}^z \rangle + \langle S_{i+1,a+1}^z \rangle + \langle S_{i-1,a-1}^z \rangle + 2\langle S_{i,a-1}^z \rangle + \langle S_{i+1,a-1}^z \rangle) \right]$$

Or dans la phase homogène (sans impureté), $\langle S_{i,a}^z \rangle = -\langle S_{i\pm 1,a}^z \rangle$. On peut par conséquent réduire la longue expression précédente sous la forme $S_{i,a}^z h_{i,a}$, où le champ magnétique effectif est simplement donné par

$$h_{i,a} = J_\perp (\langle S_{i,a+1}^z \rangle + \langle S_{i,a-1}^z \rangle). \quad (\text{V.9})$$

Les termes biquadratiques, eux, conduisent dans l'approximation de champ moyen interchaîne, à $J_4 \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a} (\langle \vec{S}_{i,a+1} \cdot \vec{S}_{i+1,a+1} \rangle + \langle \vec{S}_{i,a-1} \cdot \vec{S}_{i+1,a-1} \rangle)$. Finalement, le modèle (V.8) peut s'écrire

$$\mathcal{H}_{2D}^{CM}(J_1, \alpha, J_\perp, J_4) = \sum_{i,a} [J_1 (1 + \delta_{i,a}) \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a} + \alpha J_1 \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+2,a} + h_{i,a} S_{i,a}^z], \quad (\text{V.10})$$

où $h_{i,a}$ est défini par (V.9) et $\delta_{i,a}$ se présente comme un terme de modulation du couplage intrachaîne aux premiers voisins et est donné par

$$\delta_{i,a} = \frac{J_4}{J_1} (\langle \vec{S}_{i,a+1} \cdot \vec{S}_{i+1,a+1} \rangle + \langle \vec{S}_{i,a-1} \cdot \vec{S}_{i+1,a-1} \rangle). \quad (\text{V.11})$$

II. INTERPRÉTATION PHYSIQUE DU TERME DE MODULATION

Nous venons de voir que le terme de modulation $\delta_{i,a}$ peut être rigoureusement relié à un échange cyclique, dans l'approximation de champ moyen. Néanmoins, une telle quantité peut aussi apparaître via le développement perturbatif du terme $J_\perp \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i,a+1}$ [245] ainsi qu'en considérant un couplage magnéto-élastique [184]. Dans ce dernier cas, on peut même montrer qu'il y a équivalence parfaite avec le modèle spin-phonon étudié par Dobry et al. [184], donné par le hamiltonien (III.63), les modulations $\delta_{i,a}$ provenant (au moins en partie) des déplacements relatifs des ions. La rigidité du réseau est alors prise en compte dans la direction des chaînes dans le terme $\frac{1}{2} K_\parallel \sum_{i,a} \delta_{i,a}^2$ et dans la direction transverse par $K_\perp \sum_{i,a} \delta_{i,a} \delta_{i,a+1}$ [246]. Ainsi, l'équation (V.11) est remplacée [183] par,

$$K_\parallel \delta_{i,a} + K_\perp (\delta_{i,a+1} + \delta_{i,a-1}) = J_1 \langle \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a} \rangle. \quad (\text{V.12})$$

On peut ainsi monter que pour des chaînes non dopées, les équations de champ moyen (V.11) et (V.12) sont équivalentes si l'on pose

$$2J_4/J_1 = J_1/K_{\text{eff}} \quad (\text{V.13})$$

avec $K_{\text{eff}} = K_\parallel - 2|K_\perp|$ [120, 184].

c) Diagramme des phases

Revenons maintenant au modèle magnétique (V.10) dont le diagramme des phases est tracé sur la figure V.7 pour plusieurs valeurs de $J_4 \geq 0$. L'un des résultats essentiel est que le terme en J_4 stabilise la phase dimérisée au détriment de la phase ordonnée antiferromagnétique. En effet, on voit que les lignes de transitions³ se déplacent vers la gauche à mesure que le paramètre J_4 augmente.

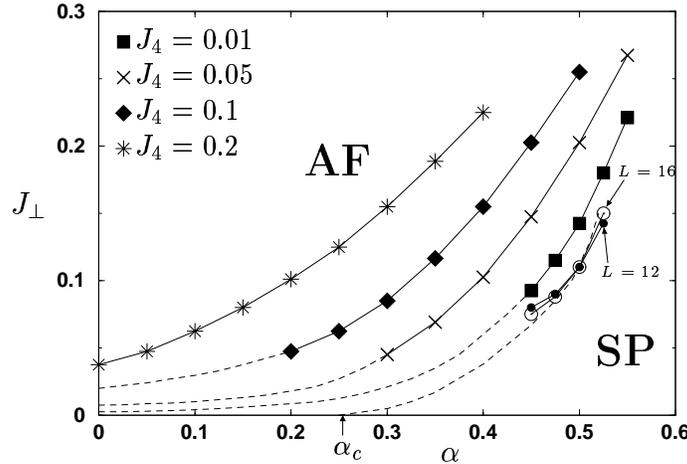


FIG. V.7 – Diagramme des phases du modèle (V.10) dans le plan (α, J_\perp) où les phases antiferromagnétique (AF) et spin-Peierls (SP) sont signifiées. Les différents symboles correspondent aux différentes valeurs du couplage J_4 indiquées sur le graphe. Les points pour $J_4 > 0$ sont les résultats de calculs Lanczos sur des systèmes de taille $L = 16$. Les corrections de taille finie sont plus petites que la taille des symboles. Les points issus du calcul sont prolongés par des tentatives de lignes de transitions (courbes brisées) dans les domaines où les effets de taille finie deviennent importants. Pour $J_4 = 0$ quelques points issus de la figure V.4 ont été tracés au voisinage du point MG pour $L = 12$ et $L = 16$. Figure extraite de la référence [131], publication n° 2.

Un tel comportement est en fait tout à fait naturel eu égard au fait que la modulation du couplage entre premiers voisins produite par J_4 entraîne une instabilité de Peierls [121] dans les chaînes, favorisant ainsi un état dimérisé. Cette instabilité de Peierls est aussi mise en évidence sur la ligne $\alpha = 0$ où, contrairement au cas $J_4 = 0$, une valeur finie de J_\perp est maintenant nécessaire pour que l'ordre antiferromagnétique s'installe dans le système [247].

3. Bien que notre étude n'ait pas porté en détails sur la transition SP-AF, nous pouvons toutefois faire état ici de certaines conclusions quant à la nature de cette transition de phase quantique. Dans le cas où J_4 était nul, nous avons vu sur la figure V.2 que le paramètre d'ordre antiferromagnétique ne subissait pas de discontinuité à la transition. Par contre lorsque $J_4 \neq 0$, une discontinuité est clairement observée à la transition. Ceci suggère que la transition SP-AF est du premier ordre si $J_4 \neq 0$ alors que pour $J_4 = 0$ elle est d'ordre deux.

d) Dégénérescence de l'état fondamental

A ce stade de la discussion, il est intéressant de se demander si la phase spin-Peierls présente un quelconque ordre dans la configuration des dimères. Dans le cas d'une chaîne MG ($\alpha = 0,5$) isolée, l'état fondamental présente deux fonctions d'ondes dégénérées $|\Phi_1\rangle$ et $|\Phi_2\rangle$ [équations (III.39-III.40)]. Lorsque M chaînes sont couplées, définissons les états parfaitement dimérisés suivants : celui où les dimères forment une configuration en colonne

$$|COL\rangle = |\Phi_1\rangle_{a=1} \otimes |\Phi_1\rangle_{a=2} \otimes \dots \otimes |\Phi_1\rangle_{a=M} \text{ ou } |\Phi_2\rangle_{a=1} \otimes |\Phi_2\rangle_{a=2} \otimes \dots \otimes |\Phi_2\rangle_{a=M}, \quad (\text{V.14})$$

représentée sur la figure V.8 (b), et celui où les dimères s'arrangent de façon alternée

$$|ALT\rangle = |\Phi_1\rangle_{a=1} \otimes |\Phi_2\rangle_{a=2} \otimes \dots \otimes |\Phi_2\rangle_{a=M} \text{ ou } |\Phi_2\rangle_{a=1} \otimes |\Phi_1\rangle_{a=2} \otimes \dots \otimes |\Phi_1\rangle_{a=M}, \quad (\text{V.15})$$

comme le montre la figure V.8 (c).

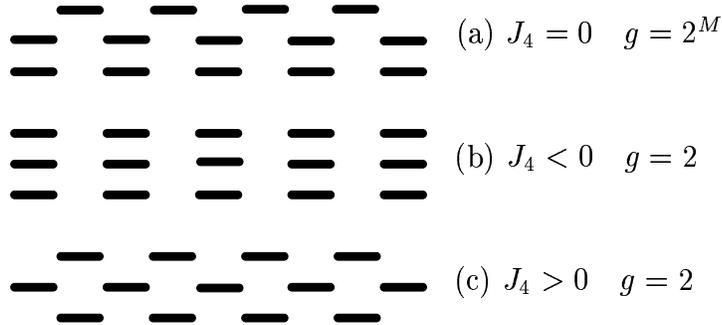


FIG. V.8 – Représentation schématique des différentes configurations de dimères obtenues dans la phase spin-Peierls pour le modèle (V.10) de chaînes frustrées couplées, en fonction du signe de J_4 . (a) Si $J_4 = 0$, chaque chaîne est deux fois dégénérée, indépendamment des autres : il n'y a pas de mise en ordre interchaîne des dimères. (b) Si $J_4 < 0$, c'est la configuration en colonnes qui représente l'état fondamental. (c) Si $J_4 > 0$, une alternance des dimères entre chaînes voisines est la configuration de plus basse énergie.

Si on regarde maintenant des chaînes faiblement couplées, au point MG le hamiltonien (V.10) va favoriser un état fondamental du type $|COL\rangle$ si $J_4 < 0$ alors que si $J_4 > 0$ ce sera un état du type $|ALT\rangle$. En effet, considérant la chaîne a , on voit que si ses chaînes voisines $a \pm 1$ abritent chacune un dimère au lien $(i, i + 1)$, le couplage sur la chaîne a au lien $(i, i + 1)$ est donné par $1 + \delta_{i,a} = 1 - \frac{3J_4}{2}$ qui est un lien faible si $J_4 > 0$, favorisant ainsi une configuration du type $|ALT\rangle$, alors que si $J_4 < 0$, $1 + \delta_{i,a} = 1 + \frac{3|J_4|}{2}$ est un lien fort, favorisant plutôt la configuration $|COL\rangle$.

La différence d'énergies $\Delta_{ALT-COL}$, normalisée par site, entre ces deux types d'états, calculée par Lanczos sur des chaînes de $L = 12$ sites avec $\alpha = 0,5$ et $J_\perp = 0,1$, est représentée en fonction de J_4 sur la figure V.9. Le raisonnement précédent y est validé : on obtient $\Delta_{ALT-COL} < 0$ si $J_4 > 0$ et $\Delta_{ALT-COL} > 0$ si $J_4 < 0$. A la frontière $J_4 = 0$ on voit que $\Delta_{ALT-COL} = 0$, ce qui entraîne que chaque

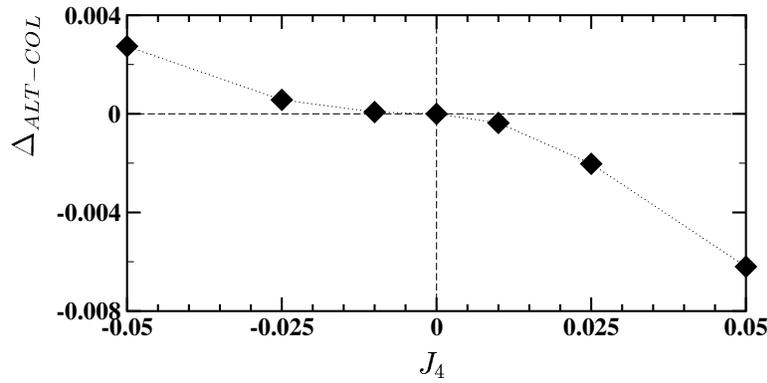


FIG. V.9 – Différence d'énergie $\Delta_{ALT-COL}$ par site entre les états de plus basse énergie présentant une configuration de dimères respectivement alternés (voir figure V.8 (c)) et en colonnes (voir figure V.8 (b)). $\Delta_{ALT-COL}$ est tracé en fonction de J_4 pour le modèle (V.10) avec $\alpha = 0,5$, $J_{\perp} = 0,1$ et $L = 12$. Figure extraite de la référence [196], publication n° 8.

chaîne se comporte indépendamment des autres, vis à vis de la dimérisation, comme suggéré par la figure V.8 (a). Par conséquent on déduit que la dégénérescence de l'état fondamental vaut $g = 2^M$ pour $J_4 = 0^4$ et $g = 2$ lorsque $J_4 \neq 0$.

3 Effets des impuretés non magnétiques

Dans la section 2.2 du chapitre III, l'effet provoqué par l'introduction d'une impureté non magnétique dans des chaînes dimérisées isolées a été présenté. Nous avons vu que pour un modèle purement unidimensionnel, seul un terme de modulation rigide δ du couplage aux premiers voisins provoquait l'apparition d'un potentiel attractif de confinement entre l'impureté et le spin $\frac{1}{2}$ alors libéré [178, 130]. Dans le cas d'un couplage élastique avec le réseau, les effets bidimensionnels introduits dans le modèle (III.63) sont nécessaires pour qu'apparaisse un moment effectif, localisé au voisinage de l'impureté.

Dans cette partie nous allons nous intéresser à l'effet produit par les impuretés non magnétiques dans le système de chaînes frustrées et couplées [hamiltonien (V.10)] précédemment étudié. Introduire une impureté non magnétique dans le système de chaînes couplées représenté sur la figure V.6 revient à remplacer un spin $S_{i_1, a_1} = \frac{1}{2}$ par un site inactif $S_{i_1, a_1} = 0$. Dans toute la suite, nous focalisons sur le modèle en question avec des paramètres raisonnables pour CuGeO_3 : $J_{\perp} = J_1/10$ et $\alpha = 0,5$. Certes cette dernière est légèrement supérieur aux valeurs estimées dans CuGeO_3 mais le choix de travailler au point MG est très avantageux car les effets de taille finie y sont très faibles et l'image physique fournie par le singulet exact de MG est très facile à manier. En ce qui concerne la constante du couplage à 4 spins J_4 , elle nous servira de variable, dans la limite champ moyen $J_4 \ll J_1$. En résumé le

4. Cette dégénérescence est en fait levée par des effets en J_{\perp}^2 , non pris en compte dans le traitement en champ moyen.

hamiltonien que nous allons considérer dans la suite s'écrit

$$\mathcal{H}(J_4) = \sum_{i=1}^L \sum_{a=1}^M \left[(1 + \delta_{i,a}(J_4)) \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a} + \frac{1}{2} \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+2,a} + h_{i,a} S_{i,a}^z \right], \quad (\text{V.16})$$

le couplage aux premiers voisins J_1 ayant été posé égal à l'unité. $h_{i,a}$ et $\delta_{i,a}(J_4)$ sont respectivement donnés par les équations du champ moyen (V.9) et (V.11)

3.1 Le cas d'une seule impureté

a) Formation de moments locaux

I. RÉSULTATS NUMÉRIQUES

La formation d'un moment magnétique effectif au voisinage de l'impureté peut être étudiée à l'aide de l'aimantation alternée locale

$$\mathcal{M}_{i,a}^{\text{alt}} = \frac{1}{4} (-1)^{i+a} (2\langle S_{i,a}^z \rangle - \langle S_{i+1,a}^z \rangle - \langle S_{i-1,a}^z \rangle). \quad (\text{V.17})$$

On observe sur la figure V.10 que, en l'absence de J_4 , le profil de $\mathcal{M}_{i,a}^{\text{alt}}$ est symé-

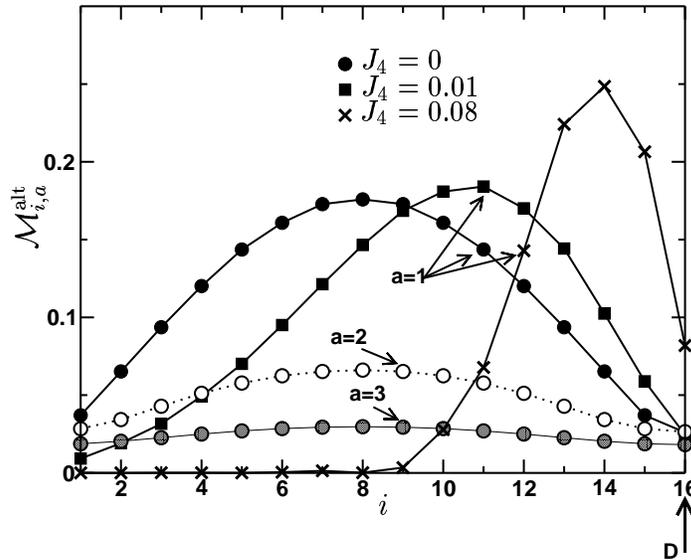


FIG. V.10 – Aimantation alternée locale $\mathcal{M}_{i,a}^{\text{alt}}$ pour $L \times M = 16 \times 8$ chaînes couplées avec une impureté D (signifiée par la flèche) située en $a_1 = 1$, $i_1 = 16$. Résultats de simulations Lanczos effectuées sur le modèle (V.16). Les cercles correspondent au cas $J_4 = 0$ (jusqu'à la troisième chaîne voisine de la chaîne dopée) et les carrés (les croix) au cas $J_4 = 0,01$ ($J_4 = 0,08$). Notons que le couplage J_2 qui enjambe l'impureté a été posé égal à 0 par commodité pour la convergence du champ moyen (voir la note 5, en bas de la page 100). Figure extraite de la référence [131], publication n° 2.

trique par rapport au centre de la chaîne dopée $a_1 = 1$, ce qui nous indique qu'il n'y a pas de confinement du soliton. Notons par ailleurs que l'effet des corrélations

antiferromagnétique interchaînes est nettement visible sur les chaînes proches voisines $a = 2$ et $a = 3$. En revanche, lorsque $J_4 \neq 0$, la situation change radicalement car le profil solitonique n'est plus symétrique. Le spin $\frac{1}{2}$ libéré est alors attiré par l'impureté : il y a confinement.

II. LIEN AVEC LA DÉGÉNÉRESCENCE DES CHAÎNES

D'un point de vue qualitatif, on peut utiliser l'image physique offerte par les singulets de MG en reprenant la figure schématique V.8. On voit en effet que si l'on introduit une lacune non magnétique dans un chaîne, un singulet se brise et libère ainsi un spin $\frac{1}{2}$. Dans le cas où la dégénérescence est $g = 2^M$ (figure V.8 (a)), comme il n'y a pas de configuration de dimères spécialement favorisée, la situation est totalement équivalente à une chaîne MG isolée dans laquelle le soliton est déconfiné (voir figure III.16 (a)). Par contre lorsque $J_4 \neq 0$, la dégénérescence chute à $g = 2$ et par conséquent, l'arrangement alterné des singulets (figure V.8 (c)) ou en colonne (figure V.8 (b)) va créer un potentiel de confinement pour le soliton de façon à minimiser la région où les dimères seraient arrangés dans la « mauvaise » configuration, à l'image de la figure III.17 pour la chaîne explicitement dimérisée. Nous résumons schématiquement ces propriétés sur la figure V.11.

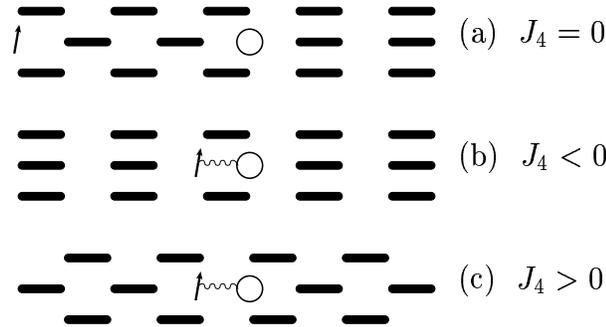


FIG. V.11 – Représentation schématique du mécanisme de confinement du soliton induit par le couplage J_4 . L'impureté non magnétique est représentée par (o) et le soliton par (↑).

b) Longueur de confinement du soliton

Une autre façon de caractériser le confinement, et d'en mesurer l'intensité, consiste à évaluer la longueur intrachaîne de confinement ξ_{\parallel} que nous définissons comme

$$\xi_{\parallel} = \frac{\left| \sum_{i=1}^L (i - i_1) |\langle S_i^z \rangle| \right|}{\sum_{i=1}^L |\langle S_i^z \rangle|}. \quad (\text{V.18})$$

Cette quantité mesure, dans la chaîne dopée a_1 , la « distance moyenne » entre le soliton et l'impureté non magnétique localisée en (i_1, a_1) . En l'absence de confinement, le soliton étant situé en milieu de chaîne, on a $\xi_{\parallel} = L/2$. En revanche la formation d'un moment localisé est signalée par la convergence de ξ_{\parallel} vers une valeur finie à la limite thermodynamique. Afin de quantifier le rôle joué par le couplage J_4 dans le méca-

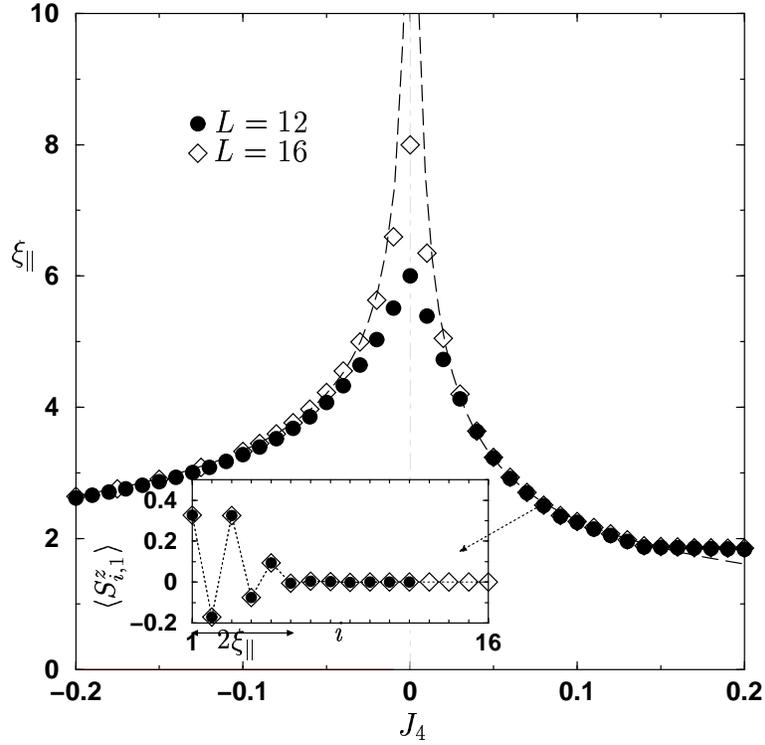


FIG. V.12 – Distance moyenne soliton-impureté $\xi_{||}(J_4)$ [équation (V.18)] calculée par Lanczos sur des systèmes $L \times M = 12 \times 6$ (●) et 16×8 (◇) et tracée en fonction de J_4 . Les courbes en ligne brisée sont des fits en loi de puissance (voir le texte). En vignette est représenté le profil d'aimantation de la chaîne dopée $\langle S_{i,1}^z \rangle$ pour les 2 tailles de systèmes considérées, avec $J_4 = 0,08$ correspondant à $\xi_{||} = 2,5$. Figure extraite de la référence [131], publication n° 2.

nisme de confinement, $\xi_{||}(J_4)$ a été calculée numériquement pour $-0,2 \leq J_4 \leq 0,2$ sur des systèmes de $M = 6$ ou 8 chaînes couplées avec $L = 12$ ou 16 sites, l'impureté étant localisée en $i_1 = L$, $a_1 = 1$. Les résultats de ces simulations Lanczos sont visibles sur la figure V.12. Tout d'abord on voit clairement que le confinement est contrôlé par le couplage J_4 car $\xi_{||}(J_4 = 0) = L/2$. De plus il est remarquable de noter que les effets de taille finie sont très vite négligeables lorsque J_4 augmente. Le comportement de la longueur de confinement peut être décrit par une loi de puissance $\xi_{||}(J_4) \sim J_4^{-\eta}$ avec $\eta \simeq 0,33$ si $J_4 < 0$ et $\eta \simeq 0,5$ si $J_4 > 0$. Une telle asymétrie provient du fait que le couplage effectif aux premiers voisins subit une renormalisation opposée suivant le signe de J_4 . En effet si $J_4 < 0$, $\delta J_{i,a} > 0$ et le couplage aux plus proches voisins est en moyenne plus grand que pour le cas $J_4 > 0$ où $\delta J_{i,a} < 0$. Par conséquent la frustration effective $\alpha^{\text{eff}} < \frac{1}{2}$ si $J_4 < 0$ et $\alpha^{\text{eff}} > \frac{1}{2}$ si $J_4 > 0$. L'estimation analytique de Nakamura [248] donnant pour la chaîne frustrée explicitement dimérisée [équation (III.66)] la longueur de localisation du soliton $\xi \sim \delta^{-1/3}$ dans le régime $\alpha_c \leq \alpha \leq 1/2$ est alors retrouvée si $\alpha^{\text{eff}} \leq 1/2$, contrairement au cas où $\alpha^{\text{eff}} \geq 1/2$.

3.2 Le cas de deux impuretés non magnétiques

Venons en maintenant au cas de deux impuretés introduites dans le système bidimensionnel de chaînes couplées (voir figure V.13⁵). Chaque dopant va libérer un spin $\frac{1}{2}$ effectif, localisé dans son voisinage à une distance $\sim \xi_{\parallel}$, contrôlée par la force du couplage à 4 corps J_4 .

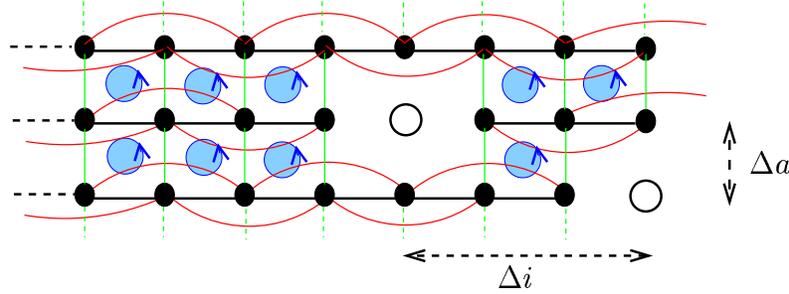


FIG. V.13 – Représentation schématique du système de chaînes de spins $\frac{1}{2}$ frustrées et couplées de la figure V.6 dans lequel 2 impuretés non magnétiques (\circ) ont été introduites. Les séparations relatives entre impuretés sont notées sur le schéma : Δi dans la direction des chaînes et Δa dans la direction transverse. Notons que les couplages qui enjambaient les impuretés ont été supprimés par commodité⁵.

a) Couplage effectif entre solitons

I. DÉFINITION

L'interaction effective entre les moments localisés J^{eff} est donnée par le coût, ou gain énergétique associé au passage de la configuration singulet ($S = 0$) à la configuration triplet ($S = 1$). Autrement dit,

$$J^{\text{eff}} = E(S = 1) - E(S = 0). \quad (\text{V.19})$$

On voit que si un triplet (singulet) est l'état fondamental, l'interaction effective entre solitons est ferromagnétique (antiferromagnétique). Comme indiqué sur la figure V.13, les distances séparant les 2 impuretés sont notées Δi (Δa) dans la direction intrachaîne (transverse). Nous allons chercher à décrire la dépendance de l'interaction effective entre impuretés en fonction de leurs séparations respectives. Pour cela, dans notre système périodique de taille finie $L \times M$, il faut considérer les $(L/2 + 1) \times (M/2 + 1)$ positions relatives, c'est à dire $\Delta i = 0, 1, 2, \dots, L/2$ et $\Delta a = 0, 1, 2, \dots, M/2$.

L'un des résultats essentiel réside dans le caractère non frustrant de l'interaction effective entre impuretés. En effet, si la séparation est paire ($\Delta a + \Delta i$ est un nombre pair) les 2 impuretés appartiennent au même sous-réseau et le couplage effectif est ferromagnétique. Si à l'inverse, les 2 dopants sont situés sur les sous-réseaux opposés, on trouve que l'interaction effective est antiferromagnétique.

5. Les couplages aux seconds voisins qui enjambent les impuretés ont été posés égaux à zéro afin d'obtenir une convergence de la procédure de champ moyen interchaînes vers un état unique.

II. EXEMPLE DE DEUX IMPURETÉS SUR DES CHAÎNES VOISINES

Dans cet exemple nous nous intéressons au cas où $\Delta a = 1$, avec un couplage $J_4 = 0,08$ (correspondant à $\xi_{\parallel} = 2,5$). Pour Δi impair, l'interaction effective entre les nuages de solitons est ferromagnétique et décroît rapidement lorsque la séparation entre impuretés augmente. En revanche si Δi est pair, J^{eff} est antiferromagnétique et exhibe un comportement croissant pour $\Delta i \leq 2\xi_{\parallel}$ puis décroissant ensuite. Cet effet à courtes distances, illustré par la figure V.14, est lié au fait que dans le cas antiferromagnétique, lorsque les impuretés s'éloignent le recouvrement des nuages solitoniques augmente d'abord pour atteindre un maximum lorsque $\Delta i \simeq 2\xi_{\parallel}$. Une fois ce recouvrement maximal passé, en séparant encore les impuretés, l'interaction effective décroît alors rapidement. La figure V.15 montre les aimantations alternées

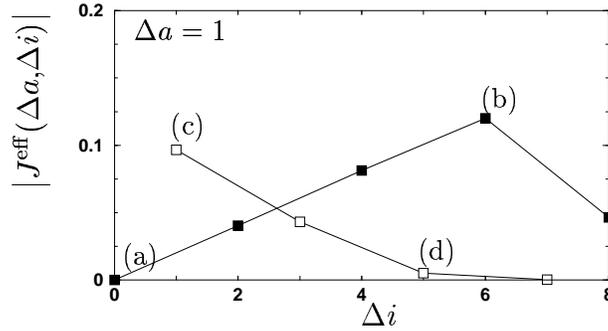


FIG. V.14 – Valeur absolue de l'interaction effective $|J^{\text{eff}}|$ entre deux impuretés localisées sur deux chaînes proches voisines ($\Delta a = 1$) en fonction de leur séparation relative Δi . Les symboles pleins (vides) correspondent à une interaction antiferromagnétique ($J^{\text{eff}} > 0$) (ferromagnétique $J^{\text{eff}} < 0$). Résultats de simulations Lanczos sur le modèle (V.16) avec $L \times M = 16 \times 8$ et $J_4 = 0,08$. Les profils magnétiques correspondant à $\Delta i = 0$ (a), $\Delta i = 6$ (b), $\Delta i = 1$ (c) et $\Delta i = 5$ (d) sont montrés sur la figure V.15. Figure extraite de la référence [131], publication n° 2.

locales $\mathcal{M}_{i,1}^{\text{alt}}$ et $\mathcal{M}_{i,2}^{\text{alt}}$ pour différentes configurations spatiales des impuretés. On voit en (a) que lorsque $\Delta i = 0$, les solitons se situent chacun de part et d'autre de leur impureté, entraînant ainsi un très faible recouvrement antiferromagnétique. Par contre, on voit en (b) que pour une séparation $\Delta i = 6$ le recouvrement est optimal. Dans les cas ferromagnétiques (c) et (d), les solitons étant situés du même côté de leur impureté, la séparation effective entre les solitons est directement liée à la séparation entre les dopants. En fait, on peut aussi comprendre qu'un tel phénomène est forcé par la configuration interchaîne des dimères (ici alternée).

b) Vers un modèle effectif

Bien que le modèle microscopique sous-jacent (V.16) soit frustré, l'interaction effective entre les impuretés n'est pas frustrante. De plus, le comportement à longue distance est contrôlé par un petit nombre de paramètres effectifs qui dépendent uniquement des constantes de couplage du modèle initial, à savoir la frustration α ,

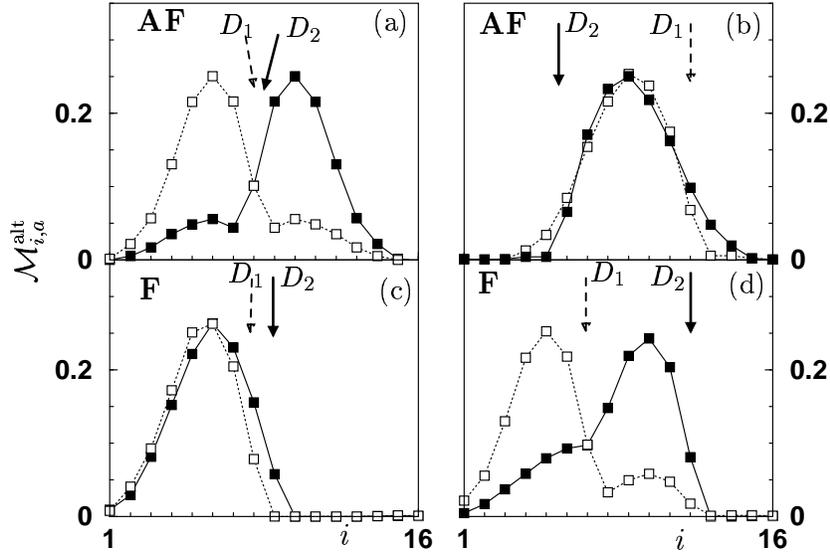


FIG. V.15 – Aimantations locales alternées $\mathcal{M}_{i,a}^{\text{stag}}$ pour la chaîne $a = 1$ (symboles vides) dopée par l'impureté D_1 et pour la chaîne $a = 2$ (symboles pleins) dopée par l'impureté D_2 . Les positions des dopants sont signifiées par les flèches. Résultats obtenues pour les 4 séparations Δi notées de (a) à (d) sur la figure V.14. Figure extraite de la référence [131], publication n° 2.

le couplage interchaîne J_{\perp} et le couplage à 4 corps J_4 .

I. IMPURETÉS DANS UNE MÊME CHAÎNE

Lorsque $\Delta a = 0$, deux situations distinctes doivent être considérées.

(i) Si les deux lacunes appartiennent au même sous-réseau, du fait que le couplage frustrant enjambant l'impureté ait été posé égal à zéro (voir la note 5, en bas de la page 100), les spins $\frac{1}{2}$ ne peuvent se recombinaer à travers une impureté afin de minimiser l'énergie magnétique. Par conséquent on trouve que les solitons libérés se comportent essentiellement comme des spins $\frac{1}{2}$ effectifs libres. Plus exactement, leur interaction est légèrement ferromagnétique, mais avec une amplitude négligeable $|J^{\text{eff}}| < 10^{-3}$.

(ii) Si les deux impuretés sont situées sur des sous-réseaux différents (figure V.16), l'interaction effective est antiferromagnétique. Par contre l'amplitude est de l'ordre de grandeur du gap de spin et la décroissance en fonction de Δi est lente, comme l'indique la figure V.17 (a). D'un point de vue simplement qualitatif, la figure V.16 donne une représentation schématique d'un triplet $S = 1$ (a) et du singulet $S = 0$ (b) lorsque la séparation entre les impuretés est suffisamment faible pour que la création d'une paire soliton-antisoliton ne soit pas favorable. On voit que la différence d'énergies entre ces deux configurations sera alors donnée par un terme constant positif, de l'ordre du gap de spin, auquel on va retrancher un terme proportionnel à l'extension spatiale Δi de la région entre les deux impuretés où la dimérisation en colonnes engendre un potentiel attractif entre les impuretés (dimères

représentés en gris sur la figure V.16 (b)).

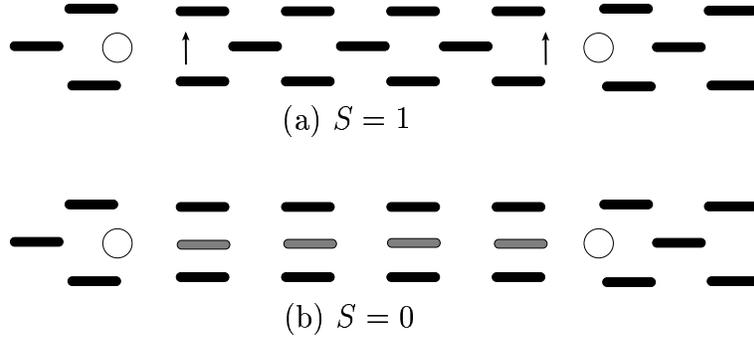


FIG. V.16 – Représentation schématique du cas où deux impuretés sont localisées sur la même chaîne et sur des sous-réseaux différents. (a) Configuration triplet $S = 1$. (b) Configuration singulet $S = 0$

En fait, ce potentiel d'attraction, dû aux chaînes voisines, est simplement donné par $V(\Delta i) \simeq \frac{3}{4}J_4\Delta i/2$, où l'on a supposé que l'état était parfaitement dimérisé donnant ainsi une contribution de $-\frac{3}{4}$ par dimère. On s'attend donc à ce que le couplage effectif dans ce cas ait la forme $J^{\text{eff}}(\Delta i) = J_0 - a\Delta i$ avec $a(J_4) \simeq \frac{3}{8}J_4$ et J_0 de l'ordre du gap de spin. Les résultats pour $J_4 = 0,08$ sont représentés sur la figure V.17 (a). Un fit donne $J_0 \simeq 0,52$ et $a \simeq 0,03$ que l'on peut comparer à $\frac{3}{8}J_4 = 3/100$. Un tel comportement reste valable pour une gamme de valeurs de J_4 assez grande.

Pour résumer, l'interaction effective dans la configuration où deux impuretés appartiennent à une même chaîne est donnée par

$$J^{\text{eff}}(\Delta i, 0) = \begin{cases} J_0(1 - \frac{\Delta i}{\xi_{\parallel}^0}) & \text{si } \Delta i \text{ pair et } \Delta i < \xi_{\parallel}^0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{V.20})$$

avec $J_0 \simeq 0,52$ et $\xi_{\parallel}^0 \simeq 17,3$ dans le cas où $J_4 = 0,08$. L'équation (V.20) est représentée sur la figure V.17 (a).

II. IMPURETÉS SUR DES CHAÎNES DIFFÉRENTES

Examinons maintenant la configuration, déjà abordée plus haut, où les deux impuretés sont situées sur des chaînes différentes. Les résultats de calculs Lanczos pour les configurations où $\Delta a = 1, 2$ et 3 sont représentés sur les figures V.17 (b), (c) et (d). On retrouve le comportement décrit page 101 pour le cas où $\Delta a = 1$. A partir de ces données numériques, des lois mathématiques assez simples peuvent être dérivées, à l'instar du cas $\Delta a = 0$ [équation (V.20)].

Avec seulement un paramètre pour l'échelle d'énergie et deux pour les échelles de longueurs, on peut décrire l'interaction effective entre impuretés situées sur des chaînes différentes par

$$J^{\text{eff}}(\Delta i, \Delta a) = -J'_0 \exp\left(-\frac{\Delta i}{\xi_{\parallel}}\right) \exp\left(-\frac{\Delta a}{\xi_{\perp}}\right), \quad (\text{V.21})$$

si $\Delta i + \Delta a$ est pair alors que dans le cas impair,

$$J^{\text{eff}}(\Delta i, \Delta a) = \begin{cases} J'_0 \frac{\Delta i}{2\xi_{\parallel}} \exp(-\frac{\Delta a}{\xi_{\perp}}) & \text{si } \Delta i \leq 2\xi_{\parallel} \\ J'_0 \exp(-\frac{\Delta i - 2\xi_{\parallel}}{\xi_{\parallel}}) \exp(-\frac{\Delta a}{\xi_{\perp}}) & \text{si } \Delta i > 2\xi_{\parallel}. \end{cases} \quad (\text{V.22})$$

Pour $J_4 = 0,08$ les valeurs suivantes ont été utilisées : $J'_0 = 0,3$, $\xi_{\perp} = 1$ et $\xi_{\parallel} = 2,5$. Les équations (V.21) et (V.22) sont représentées avec ces paramètres sur les figures V.17 (b), (c) et (d).

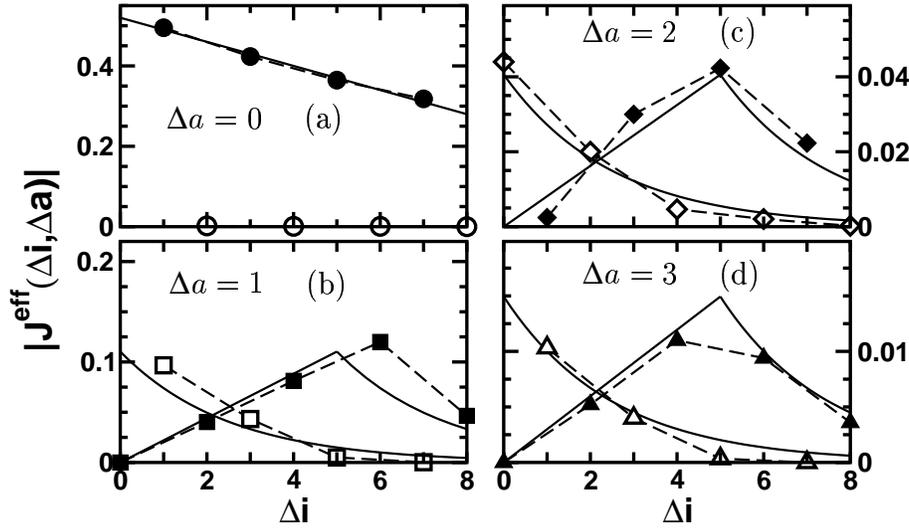


FIG. V.17 – Valeur absolue de l'interaction effective $|J^{\text{eff}}|$ entre deux impuretés séparées de Δa dans la direction transverse, tracée en fonction de leur séparation relative Δi dans la direction intrachaîne. Les symboles pleins (vides) correspondent à une interaction antiferromagnétique $J^{\text{eff}} > 0$ (ferromagnétique $J^{\text{eff}} < 0$). Résultats de simulations Lanczos sur le modèle (V.16) avec $L \times M = 16 \times 8$ et $J_4 = 0,08$. Les courbes en traits pleins sont des expressions mathématiques discutées dans le texte. Figure extraite de la référence [249], publication n° 9.

La signification et la pertinence physique de ces paramètres ont été testées pour d'autres valeurs de J_4 ainsi que du couplage interchaînes J_{\perp} . Le couplage J'_0 est en fait directement proportionnel à J_{\perp} , la longueur caractéristique de l'interaction effective dans la direction transverse ξ_{\perp} est une fonction de J_{\perp} et dans la direction des chaînes nous avons gardé la même notation que pour la longueur de confinement ξ_{\parallel} car c'est en fait la même quantité. Pour finir il est important de souligner que le comportement alterné de J^{eff} est crucial et garantie que les couplages effectifs entre spins $\frac{1}{2}$ localisés ne sont pas frustrants.

4 Conclusion partielle

Dans ce chapitre, l'effet produit par l'introduction d'une ou plusieurs impuretés non magnétiques dans un système de chaînes de spins $\frac{1}{2}$ frustrées couplées a été

analysé à l'aide de simulations numériques par la méthode de Lanczos combinée à un champ moyen auto-cohérent. Dans le cas non dopé, l'étude de la compétition entre la frustration et les interactions antiferromagnétiques interchaîne nous a permis de construire un diagramme des phases sur lequel apparaissent une phase antiferromagnétique ordonnée et une phase spin-Peierls dimérisée.

Dans la phase spin-Peierls, la formation de moments magnétiques localisés au voisinage des impuretés résulte de l'apparition d'un potentiel d'attraction soliton-impureté, contrôlé par la dimérisation des chaînes voisines. Nous avons vu en outre que cette dernière pouvait être stabilisée par un couplage interchaîne à 4 spins provoquant une modulation des interactions aux premiers voisins. Par ailleurs, il a été établi que dans la limite des faibles couplages, une modulation semblable pouvait aussi provenir d'un couplage avec le réseau.

L'interaction effective entre deux impuretés, intervenant à des échelles d'énergies inférieures au gap de spin, a été calculée et l'un des résultats essentiels réside dans son caractère non frustrant, malgré le fait que le modèle microscopique sous-jacent soit explicitement frustré. Bien que le nombre de configurations relatives pour les positions des impuretés soit très important, seules quelques lois phénoménologiques permettent de décrire le comportement à longue distance de l'interaction effective qui, hormis le cas particulier où les impuretés sont sur une même chaîne, est de la forme

$$J^{\text{eff}}(\Delta i, \Delta a) \propto (-1)^{\Delta i + \Delta a + 1} J'_0 \exp\left(-\frac{\Delta i}{\xi_{\parallel}} - \frac{\Delta a}{\xi_{\perp}}\right), \quad (\text{V.23})$$

les paramètres J'_0 , ξ_{\parallel} et ξ_{\perp} pouvant être directement calculés à partir du modèle microscopique de départ.

En raison du caractère alterné du couplage, on peut s'attendre à ce que les spins $\frac{1}{2}$ effectifs s'ordonnent à longue distance, comme il a été observé pour le modèle (III.63) de chaînes spin-Peierls couplées via des interactions magnéto-élastiques [184]. C'est ce que nous allons explorer maintenant, dans le chapitre VI, où le modèle effectif que nous venons de construire va être étudié sur de très grands systèmes, à l'aide de simulations en Monte Carlo quantique SSE ainsi que par une méthode originale de renormalisation des couplages dans l'espace réel.

Chapitre VI

Modèle effectif désordonné de chaînes spin-Peierls couplées dopées

Sommaire de ce chapitre

1	Introduction	108
2	Mise en ordre induite par le dopage	109
2.1	Présentation du modèle effectif bidimensionnel	109
2.2	Étude de la mise en ordre antiferromagnétique par Monte Carlo quantique	110
	a) Convergence dans le fondamental	110
	b) Mise en ordre bidimensionnelle à $T = 0$	111
	c) Température de Néel	112
2.3	Susceptibilité de Curie	114
	a) L'exemple de l'échelle à deux montants dopée	114
	b) Constante de Curie du système de chaînes spin-Peierls dopées	116
	c) Températures intermédiaires: discussion	117
3	Étude du régime basse température par renormalisation dans l'espace réel	118
3.1	Procédure de décimation des couplages	118
	a) Équations de renormalisation	119
	b) Approche numérique	120
3.2	Formation de grands spins effectifs et susceptibilité de Curie	121
	a) Formation des moments effectifs	121
	b) Étude de la constante de Curie	124
3.3	Discussion concernant la validité de l'approche perturbative	125
	a) Arguments qualitatifs	125
	b) Comparaison directe avec le Monte Carlo quantique	126
3.4	Régime critique	127
	a) Régime critique du modèle unidimensionnel	127
	b) Détermination des exposants	128
4	Conclusion	133

1 Introduction

Dans les systèmes dopés possédant un gap de spin, le comportement de l'interaction entre les moments effectifs libérés par les impuretés est, de façon générale, donné par l'équation (V.23) [250, 184, 251, 252, 253, 130]. Dans les systèmes spin-Peierls, la coexistence entre une phase dimérisée et un ordre antiferromagnétique, observée expérimentalement pour de très faibles concentrations en impuretés [5, 45, 44], reste à l'heure actuelle un challenge pour les théoriciens. En effet, l'existence ou non d'une concentration critique en impuretés, nécessaire pour que la mise en ordre entre les moments effectifs ait lieu, est un problème non trivial qui n'est pas entièrement résolu.

Plusieurs approches théoriques ont vu le jour par le passé, visant à décrire la mise en ordre antiferromagnétique qui apparaît dans la phase dimérisée soumise au dopage. Bien que certaines observations expérimentales aient pu être correctement décrites à travers des modèles effectifs fortement désordonnés, ces approches étaient souvent limitées par la non prise en compte de certains effets microscopiques. Par exemple un modèle purement unidimensionnel considérant l'interaction effective entre solitons aléatoirement distribués dans une chaîne [254, 255] n'intégrait pas l'effet des corrélations antiferromagnétiques interchaîne, pourtant très importantes dans CuGeO_3 . Par ailleurs, des approches analytiques tenant compte des effets interchaînes, ont été appliquées à des modèles de spins avec des couplages aléatoires antiferromagnétiques. Que ce soit en utilisant la renormalisation dans l'espace réel [256], ou une transformation vers un problème effectif de fermions de Dirac avec masse aléatoire [257], l'origine microscopique et de fait, le caractère non frustrant des interactions effectives entre solitons, ne sont pas considérés dans ces calculs. Notons aussi que ces auteurs concluent sur l'existence d'une concentration critique x_c nécessaire à l'apparition de la mise en ordre antiferromagnétique alors que la plupart des résultats expérimentaux suggèrent plutôt le contraire [45, 44, 43].¹

Ce chapitre est consacré à l'étude d'un modèle effectif désordonné décrivant l'interaction entre les spins $\frac{1}{2}$ libérés par des impuretés, aléatoirement distribuées dans des chaînes dimérisées couplées. Le point de départ résulte de la détermination des interactions effectives entre impuretés, effectuée à l'aide des simulations Lanczos explicitées au chapitre précédent. Dans une première section, le modèle effectif est construit et simulé à l'aide de l'algorithme Monte Carlo quantique SSE sur des systèmes de très grandes tailles. La mise en ordre antiferromagnétique est étudiée à $T = 0$ pour le modèle bidimensionnel ainsi qu'à $T_N \neq 0$ pour le problème quasi-bidimensionnel. Le comportement à basse température de la susceptibilité uniforme est ensuite analysé et mis en comparaison avec le problème des échelles de spins à deux montants dopées. Dans la deuxième section, le même modèle désordonné est étudié à l'aide de la technique de renormalisation des couplages dans l'espace réel. Le comportement critique du système y est décrit à travers la formation de

1. Comme souligné dans [256], une telle modélisation du dopage en terme de couplages antiferromagnétiques d'intensités aléatoires, convient certainement mieux à la description du dopage hors chaîne de CuGeO_3 avec du silicium remplaçant le germanium.

*clusters*² corrélés présentant des grands spins effectifs. La validité de cette approche perturbative est aussi discutée et une comparaison directe avec les résultats des résultats Monte Carlo quantique est présentée. Pour finir, une série d'exposants critiques est aussi proposée et comparée au modèle unidimensionnel de spins $\frac{1}{2}$ couplés aléatoirement via des échanges ferromagnétiques ou antiferromagnétiques.

2 Mise en ordre induite par le dopage

2.1 Présentation du modèle effectif bidimensionnel

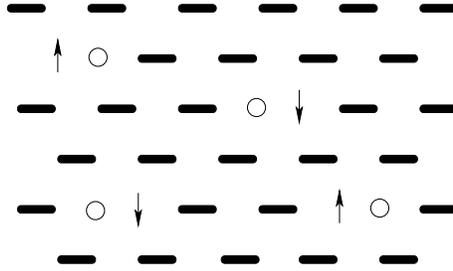


FIG. VI.1 – Représentation schématique du système dimérisé désordonné par la présence d'impuretés non magnétiques (\circ), chaque impureté libérant un spins $\frac{1}{2}$ (\uparrow). Les dimères sont représentés par les larges traits noirs.

Le modèle microscopique de chaînes de spins frustrées couplées, gouverné par le hamiltonien (V.16), étudié au chapitre précédent va nous servir de point de départ à la construction d'un hamiltonien effectif bidimensionnel désordonné décrivant les propriétés de basse énergie d'un système spin-Peierls dopé.

Considérons un ensemble de chaînes de spins frustrées ($\alpha = 0,5$) et couplées entre elles, via des échanges antiferromagnétiques et cycliques d'intensités respectives $J_{\perp} = 0,1$ et $J_4 = 0,08$. Notons dès maintenant que toutes les échelles d'énergies seront exprimées en unité de J_1 , constante d'échange aux premiers voisins. En l'absence d'impureté, un tel système présente un état fondamental dimérisé du type alterné (voir la figure V.8 (c)) et un gap de spin $\Delta_S \simeq 0,46$. Lorsque l'on dope un tel système avec une faible concentration x d'impuretés non magnétiques, la physique de basse énergie (i.e. à des températures inférieures au gap de spin) est gouvernée par les spins effectifs libérés par les impuretés [250, 258, 184]. En effet, chaque lacune introduite dans le système gappé brise un dimère et libère ainsi un spin $\frac{1}{2}$ effectif (voir la figure VI.1), décrit dans le chapitre précédent en terme de soliton. Ce dernier, localisé au voisinage de l'impureté, interagit avec les autres solitons localisés lorsque la température s'abaisse. Dans l'optique d'analyser le comportement à très basse température de ce système spin-Peierls soumis à du désordre de dilution, nous ne considérons que la seule interaction entre impuretés, les dimères étant considérés

2. Après plusieurs hésitations pour traduire ce terme en français, entre *amas*, *groupements*, *ensemble...*, le choix s'est finalement porté vers le terme anglais.

comme gelés à ces échelles d'énergies. Le hamiltonien effectif correspondant décrit l'interaction entre des spins $\frac{1}{2}$, aléatoirement distribués sur un réseau carré de taille $L \times L$:

$$\mathcal{H}^{\text{eff}} = \sum_{\vec{r}_1, \vec{r}_2} \epsilon_{\vec{r}_1} \epsilon_{\vec{r}_2} J^{\text{eff}}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{S}_{\vec{r}_1} \cdot \vec{S}_{\vec{r}_2}. \quad (\text{VI.1})$$

Le facteur d'occupation est $\epsilon_{\vec{r}} = 1$ (0) avec une probabilité x ($1-x$), où $x = N_s/L^2$ est la concentration en impuretés, N_s étant le nombre de spins $\frac{1}{2}$. L'interaction effective J^{eff} , non frustrante et décroissante à longue distance, est donnée par les expressions (V.20), (V.21) et (V.22).

2.2 Étude de la mise en ordre antiferromagnétique par Monte Carlo quantique

Le modèle effectif (VI.1) est maintenant étudié à l'aide de la méthode Monte Carlo quantique SSE que nous avons présenté dans la section 3.3 du chapitre III. Néanmoins l'algorithme utilisé ici tient compte du couplage non frustrant à longue distance entre tous les spins. Développé initialement dans le cadre du modèle d'Ising en champ transverse avec des interactions à distances arbitraires [202], Anders Sandvik a par la suite adapté cet algorithme au problème qui nous est posé ici [259].

a) Convergence dans le fondamental

Afin d'étudier la mise en ordre antiferromagnétique induite par le dopage, nous nous intéressons au facteur de structure alterné, normalisé par site

$$s(\pi, \pi) = \frac{1}{L^4} \langle (\sum_{i=1}^{N_s} (-1)^i S_i^z)^2 \rangle. \quad (\text{VI.2})$$

Les indices i indexent les N_s sites magnétiques actifs du réseau $L \times L$. Dans un état antiferromagnétique ordonné, on s'attend à ce que $s(\pi, \pi)$ converge vers une valeur finie à la limite thermodynamique.

Le caractère aléatoire des positions des impuretés sur le réseau nous impose d'effectuer des simulations sur un grand nombre \mathcal{S} d'échantillons indépendants, après quoi les valeurs moyennes des observables sont calculées. Par exemple pour le facteur de structure alterné par site, on évalue

$$\overline{s(\pi, \pi)} = \frac{1}{\mathcal{S}} \sum_{\sigma=1}^{\mathcal{S}} (s(\pi, \pi))^\sigma, \quad (\text{VI.3})$$

où les différents échantillons sont indexés par σ . Comme il en a déjà été discuté dans la section 1.3 a) du chapitre IV à propos des chaînes de spins $\frac{1}{2}$ avec couplages aléatoires, le contrôle des fluctuations liées au désordre ainsi que la convergence de l'algorithme SSE dans le fondamental sont des points cruciaux pour les systèmes désordonnés, nécessitant un traitement rigoureux. A l'instar du calcul des fonctions de corrélation de spin de la chaîne désordonnée, nous mettons ici en oeuvre la méthode *β -doubling scheme* [210] jusqu'à des températures $\beta_{\text{max}}^{-1} = 2^{-18} \simeq 3,8 \times 10^{-6}$

pour $N_s = 256$ spins. Nous avons de plus considéré jusqu'à $\mathcal{S} = 2000$ échantillons pour calculer $s(\pi, \pi)$ sur des réseaux allant de 56×56 à 96×96 avec $N_s = 256$ spins. La convergence vers le fondamental pour ces systèmes est représentée sur la figure VI.2. Bien évidemment il aurait été intéressant de pouvoir accéder à des

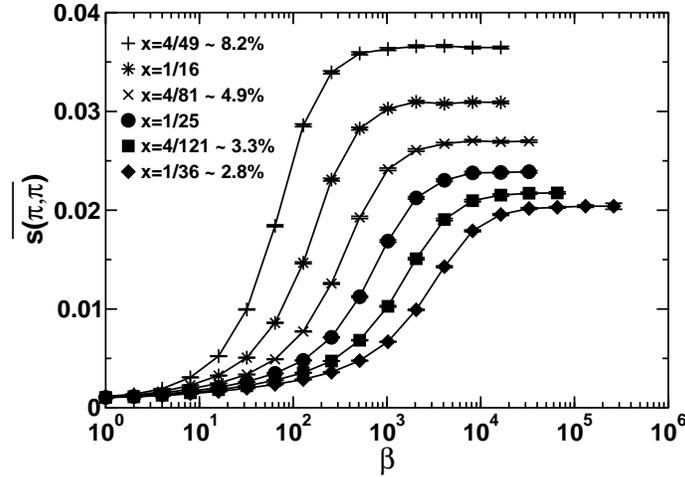


FIG. VI.2 – *Facteur de structure alterné par site en fonction de la température inverse β , calculé numériquement par Monte Carlo quantique SSE en utilisant le β -doubling scheme. Résultats moyennés sur 2000 échantillons avec $N_s = 256$ spins distribués aléatoirement sur des réseaux carrés de tailles 56×56 , 64×64 , 72×72 , 80×80 , 88×88 et 96×96 (de haut en bas), correspondant aux concentrations x indiquées sur le graphe. Figure extraite de la référence [259], publication n° 4.*

concentrations plus basses encore, mais la température inverse nécessaire pour obtenir la convergence dans le fondamental se comportant comme³ $\ln \beta_{GS} \sim 1/\sqrt{x}$, l'obtention des propriétés à température nulle pour des concentrations $x < 2,78\%$ aurait demandé un effort numérique vraiment trop important. Notons toutefois que les propriétés à température finie ont été étudiées jusqu'à $x \simeq 0,4\%$, comme nous verrons dans la suite.

b) Mise en ordre bidimensionnelle à $T = 0$

Une fois que nous nous sommes assurés que les propriétés de l'état fondamental sont atteintes, le paramètre d'ordre antiferromagnétique par site à $T = 0$ m_{AF} est obtenu en utilisant

$$(m_{AF})^2 = 3 \overline{\langle s(\pi, \pi) \rangle}, \quad (\text{VI.4})$$

le facteur 3 venant de l'invariance $SU(2)$ [208]. Étant donné qu'à deux dimension, la mise en ordre antiferromagnétique ne s'établit qu'à $T = 0$ [75], nous extrapolons d'abord m_{AF} à sa valeur dans le fondamental ($\beta \rightarrow \infty$) pour les systèmes de taille finie (figure VI.3 (b)). Ensuite, à l'aide de fonctions polynomiales en $1/\sqrt{N_s}$ (seulement jusqu'à l'ordre 2), l'extrapolation vers la limite thermodynamique $N_s \rightarrow \infty$ est

3. Remarquons à ce titre que la distance moyenne séparant deux impuretés étant $\sim 1/\sqrt{x}$, le couplage moyen entre impuretés voisines se comporte comme $\langle \ln |J^{\text{eff}}| \rangle \sim -1/\sqrt{x}$.

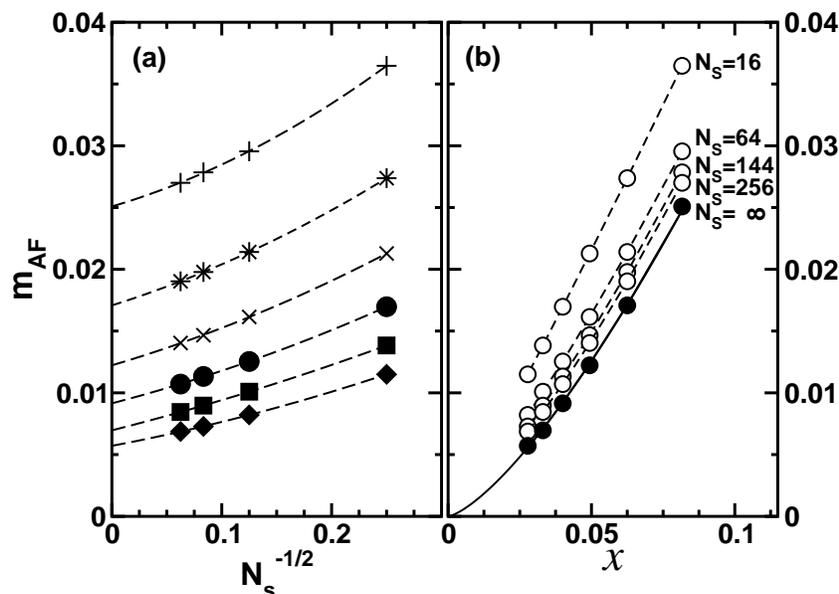


FIG. VI.3 – Aimantation alternée par site m_{AF} , moyennée sur $\mathcal{S} = 2000$ échantillons. Étant plus petites que les tailles de symboles (voir la figure VI.2), les barres d'erreurs sont absentes afin d'améliorer la lecture du graphe. (a) Extrapolation vers la limite thermodynamique de $m_{AF}(N_s)$ pour des dopages identiques à ceux de la figure VI.2 : $1/36 \leq x \leq 4/49$ (les symboles utilisés sont les mêmes que pour la figure VI.2). (b) Comportement de m_{AF} en fonction du dopage pour $N_s = 16, 64, 144, 256$ spins, et à la limite thermodynamique (cercles pleins). La courbe solide est un fit de la forme $m_{AF} \sim x^\mu$, discuté dans le texte. Figure extraite de la référence [259], publication n° 4.

réalisée, comme le montre la figure VI.3(a). Le comportement de $m_{AF}(N_s \rightarrow \infty)$ en fonction de x est représentée sur la figure VI.3(b). Si l'on suppose une dépendance en loi de puissance, le meilleur fit donne $m_{AF} \sim x^\mu$, avec $\mu \simeq 1.38 > 1$ (courbe solide sur la figure VI.3(b)). Néanmoins, avec moins d'une décade entière, il est difficile de trancher entre une loi de puissance et un comportement exponentiel, comme suggéré par certains résultats expérimentaux [43].

La conclusion essentielle que l'on tire de la figure VI.3 est que la mise en ordre s'établit $\forall x > 0$: il n'existe donc pas de concentration critique nécessaire à l'établissement d'un ordre antiferromagnétique.

c) Température de Néel

I. APPROXIMATION RPA

La température de mise en ordre tridimensionnelle peut être évaluée à l'aide d'un raisonnement RPA (*Random Phase Approximation* [260]). En effet si l'on suppose un faible couplage λ_{3D} entre les plans, la température de Néel est simplement donnée

par

$$\chi_{\text{alt}}(T_N) = \frac{\zeta}{|\lambda_{3D}|}. \quad (\text{VI.5})$$

Nous prendrons pour simplifier $\zeta = 1^4$, et comme couplage tridimensionnel, $\lambda_{3D} = 10^{-2}$ (valeur tout à fait consistante avec l'estimation pour CuGeO_3 [35]). La susceptibilité magnétique alternée χ_{alt} , normalisée par site

$$\chi_{\text{alt}}(T) = \frac{1}{L^2} \sum_{i,j} (-1)^{i-j} \int_0^\beta \langle S_i^z(\tau) S_j^z(0) \rangle d\tau, \quad (\text{VI.6})$$

est représentée sur la figure VI.4 (a) pour $0,69\% < x \leq 4\%$. $\mathcal{S} = 2000$ échantillons indépendants ont été utilisés ici et les résultats sont des moyennes sur tous ces échantillons. Notons dès à présent la divergence de $\chi_{\text{alt}}(T)$ lorsque $T \rightarrow 0$ (carac-

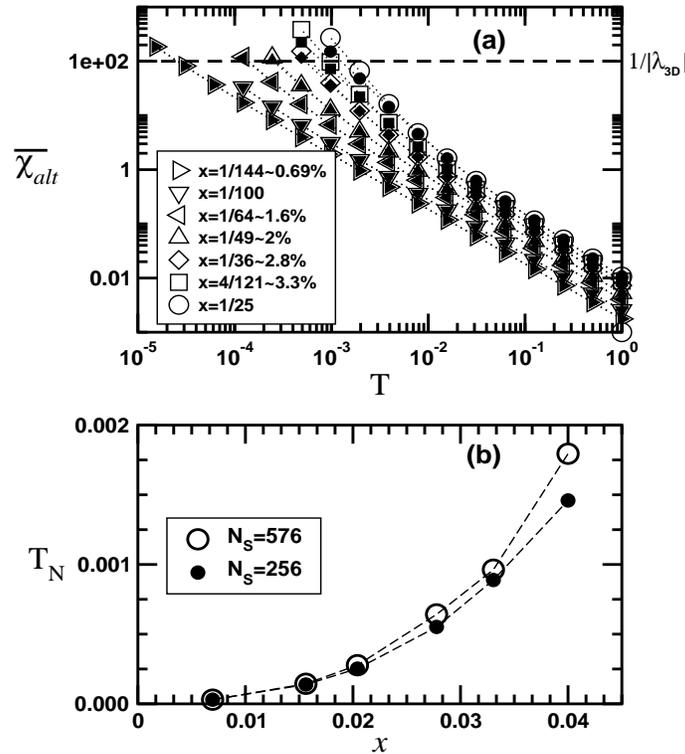


FIG. VI.4 – (a) Dépendance en température de la susceptibilité alternée moyenne $\chi_{\text{alt}}(T)$ par site, calculée par Monte Carlo quantique SSE pour 2000 échantillons, avec $N_s = 256$ (symboles pleins) et $N_s = 576$ (symboles ouverts). Les différentes concentrations x sont indiquées sur le graphe. La droite hachurée représente $1/\lambda_{3D} = 100$. (b) Température de Néel $T_N(x)$ tracée en fonction de la concentration en impuretés non magnétiques x pour un couplage tridimensionnel $\lambda_{3D} = 1/100$ traité par RPA. Figure extraite de la référence [259], publication n° 4.

4. Le critère RPA habituel donnerait $\zeta = 2$ dans le cas présent mais le travail récent de Yasuda *et al.* [261] propose un critère RPA modifié donnant ici $\zeta \simeq 1,3$.

téristique de l'instabilité antiferromagnétique) que nous analyserons plus en détail dans la section 3.4 b).

II. TEMPÉRATURE DE NÉEL

La température critique de mise en ordre antiferromagnétique est évaluée graphiquement par l'intersection de $\overline{\chi_{\text{alt}}}$ et $1/\lambda_{3D} = 100$. Les résultats sont visibles sur la partie (b) de la figure VI.4. Le comportement de $T_N(x)$ révèle clairement la décroissance rapide de la température critique lorsque $x \rightarrow 0$ et suggère, à l'instar des conclusions tirées pour $m_{\text{AF}}(x)$, l'absence de concentration critique x_c non nulle.

Les données numériques, obtenus jusqu'à des concentrations $x \simeq 0,007$ pour $N_s = 256$ et 576 spins, peuvent être décrites par une loi de puissance $T_N(x) \sim x^\nu$ avec $\nu \simeq 2,5$. Notons toutefois qu'un comportement exponentiel du type $T_N(x) \sim \exp(-B/x)$, suggéré par des résultats expérimentaux sur $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{GeO}_3$ [43] (voir page 11), ne peut pas être exclu.

Dans tous les cas, le résultats essentiel réside dans l'absence de concentration critique $x_c \neq 0$ pour la mise en ordre tridimensionnelle : $\forall x > 0, T_N(x) > 0$.

2.3 Susceptibilité de Curie

Expérimentalement (voir le chapitre II), il a été observé que dans plusieurs composés possédant un gap de spin, le dopage avec des impuretés provoque, à basse température, la divergence de la susceptibilité uniforme par site selon une loi de Curie

$$\chi(T) = \frac{C}{T}, \quad (\text{VI.7})$$

où la constante de Curie est proportionnelle à la concentration en impuretés : $C(x) \propto x$. Un tel comportement signale que chaque impureté libère un spin effectif qui, dans un certain régime de températures, inférieures au gap de spin, contribue à la loi de Curie. En revanche, lorsque la température décroît, les moments effectifs commencent à se corréliser, réduisant ainsi la densité de spins libres, et la constante de Curie d'autant ; mais pour la plupart des composés, une mise en ordre antiferromagnétique apparaît finalement, à très basse température, du à un couplage tridimensionnel. Toutefois, il est très intéressant d'explorer le régime de température $T_N < T < \Delta_s$ où la constante de Curie subit une réduction, comme nous allons le voir.

a) L'exemple de l'échelle à deux montants dopée

Les travaux de Sigrist et Furusaki [250], portant sur les propriétés thermodynamiques d'une échelle de spins $\frac{1}{2}$ à deux montants, dopée par des impuretés non magnétiques (en concentration $x \ll 1$) ont fait date. A basse énergie, l'interaction entre les impuretés, aléatoirement distribuées dans l'échelle, est décrite par un modèle effectif de spins $\frac{1}{2}$ en interaction aux plus proches voisins, aléatoirement ferromagnétique ou antiferromagnétique.

Il a été montré que la constante de Curie présente trois régimes bien distincts, schématisés sur la figure VI.5 :

(i) A haute température $T \gg \Delta_s$, tous les spins sont paramagnétiques et contribuent alors chacun librement à la loi de Curie : c'est le régime appelé « *free spins* » sur la figure VI.5, avec

$$C = \frac{1}{3}S(S + 1) = \frac{1}{4}.$$

(ii) Lorsque la température devient inférieure au gap $T < \Delta_s$, la phase liquide de spin est « gelée » et seuls les moments effectifs libérés par les impuretés contribuent à la susceptibilité : c'est le régime « *free impurity spins* », où

$$C = \frac{x}{4}.$$

(iii) Aux échelles d'énergies plus basses encore, les moments effectifs, qui sont couplés via des interactions aléatoirement ferromagnétique ou antiferromagnétique, commencent à s'apparier. Le caractère aléatoire en signe et en amplitude des couplages entraîne, via un argument de marche aléatoire, que l'état fondamental d'un échantillon de L sites voit son moment effectif total croître comme $(S_{\text{tot}}^{\text{eff}})^2 = xL/4$. On s'attend ainsi à observer dans ce régime de basse température, appelé « *correlated impurity spins* », une constante de Curie réduite d'un facteur 3 :

$$C = \frac{x}{12}.$$

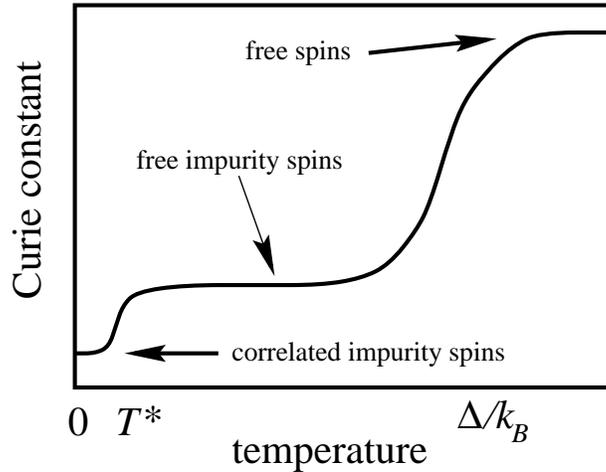


FIG. VI.5 – Représentation schématique des trois régimes attendus pour la constante de Curie par site de l'échelle à deux montants dopée par des impuretés non magnétiques. Δ est le gap de spin et T^* est l'échelle de température à partir de laquelle les impuretés commencent à être corrélées. Figure extraite de Sigrist et Furusaki [250].

Le composé $\text{Sr}(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)_2\text{O}_3$, exhibe bien les deux premiers régimes pour $T > T^*$ mais la réduction de $1/3$ n'est pas observée à cause de la mise en ordre tridimensionnelle [62]. Par contre, cette réduction de C a vraisemblablement été observée sur le composé $(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$ [69]. En effet ce dernier correspond plus à la situation d'une échelle isolée, le couplage tridimensionnel entre les échelles étant extrêmement faible.

b) Constante de Curie du système de chaînes spin-Peierls dopées

Parmi les très nombreux travaux théoriques portant sur l'influence du dopage sur la susceptibilité uniforme dans les systèmes possédant un gap de spin, la plupart se sont concentrés sur les échelles [250, 262, 263, 264, 265, 266] et seulement quelques uns se sont penchés sur d'autres types de liquides de spins⁵, comme des chaînes spin-Peierls [251] ou des chaînes de Haldane [267, 56].

C'est pourquoi dans la suite nous proposons de nous concentrer sur le comportement de la susceptibilité du modèle effectif bidimensionnel (VI.1) d'impuretés en interactions. Utilisant l'expression

$$c = \frac{1}{N_s} \left\langle \left(\sum_{i=1}^{N_s} S_i^z \right)^2 \right\rangle \quad (\text{VI.8})$$

pour évaluer la constante de Curie *par impureté*, les résultats des simulations Monte Carlo SSE pour c , moyennée sur le désordre, sont représentés sur la figure VI.6 en fonction de la température $T = \beta^{-1}$, pour des concentrations $0,7\% \leq x \leq 8,2\%$.

Le modèle effectif que nous étudions ici ne décrit que les degrés de liberté des impuretés, intervenant à des échelles d'énergies inférieures au gap de spin. Par conséquent, pour établir une comparaison avec l'échelle dopée, le régime où $T \gg 1$ sur la figure VI.6 correspond au régime (ii) appelé « *free impurity spins* » sur la figure VI.5. En effet dans cette gamme de températures, chaque spin se comporte librement, donnant ainsi une contribution de $\frac{1}{4}$ par impureté à la susceptibilité. Ensuite lorsque la température devient comparable à l'échelle d'énergie des spins les plus fortement couplés, ces derniers deviennent corrélés entre eux et c subit ainsi une réduction, à mesure que T décroît. Ce phénomène est clairement mis en évidence sur la figure VI.6 où l'on observe que la constante de Curie par spin $c(T)$ décroît lorsque la température s'abaisse.

A mesure que $T \rightarrow 0$, de plus en plus de spins se gèlent dans des clusters de taille n . Comme les interactions sont aléatoirement ferromagnétiques ou antiferromagnétiques au sein de ces clusters, un argument de marche aléatoire similaire au cas de l'échelle peut être invoqué. On s'attend en effet à ce que, en moyenne, le spin total d'un cluster de taille n se comporte comme [250]

$$\overline{S_{\text{tot}}^{\text{eff}}} = \frac{\sqrt{n}}{2}, \quad \text{pour } n \gg 1. \quad (\text{VI.9})$$

Par conséquent, à très basse température un régime de saturation apparaît, à l'instar de l'échelle dopée, avec $c = \frac{1}{3} \left(\overline{S_{\text{tot}}^{\text{eff}}} \right)^2 / n \rightarrow 1/12$ lorsque $T \rightarrow 0$.

Bien que le modèle effectif décrivant l'interaction entre les impuretés dans l'échelle dopée [250, 157, 158] soit bien différent⁶ du modèle effectif traité ici, la saturation de la constante de Curie vers la valeur de 1/12 est observée dans les deux cas. En

5. Par liquides de spins, nous entendons les composés possédant un fondamental non magnétique séparé de la première excitation de spin par un gap fini.

6. La connectivité est formellement infinie, alors que pour l'échelle elle vaut seulement 2.

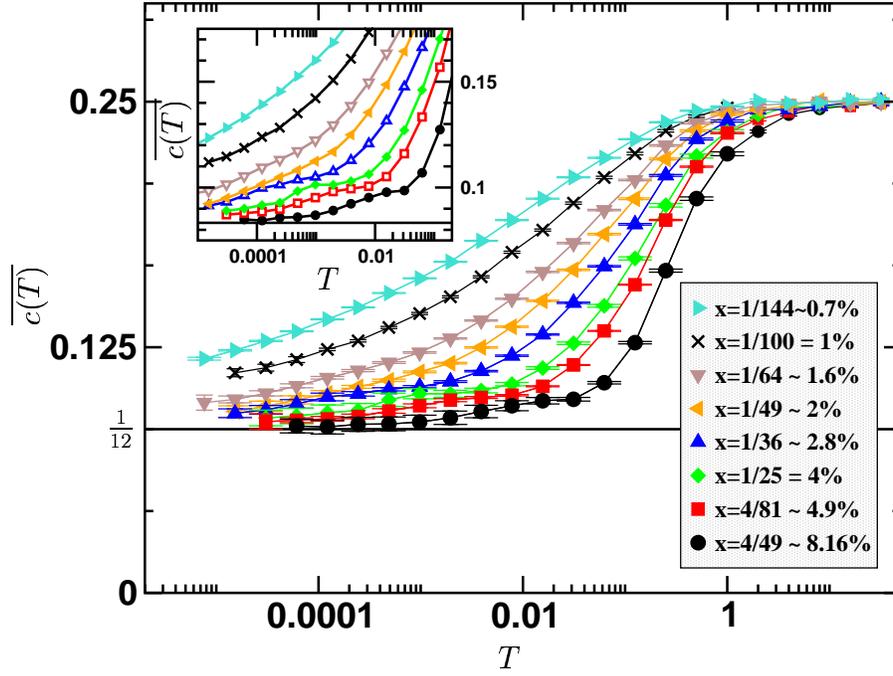


FIG. VI.6 – Constante de Curie par impureté, calculée par Monte Carlo quantique SSE en utilisant le β -doubling scheme. $N_s = 256$ spins ont été simulés sur $10^3 \leq \mathcal{S} \leq 10^4$ échantillons pour chacune des 8 concentrations x indiquées sur le graphe. \bar{c} est tracée en fonction de la température T , la ligne pleine représentant la valeur de saturation à $\frac{1}{12}$. En vignette, un zoom est effectué sur un régime de températures intermédiaires. Figure extraite de la référence [192], publication n° 7.

effet, que les spins $\frac{1}{2}$ en interaction aléatoirement ferromagnétique ou antiferromagnétique soient couplés aux premiers voisins ou à longue distance sur un réseau bidimensionnel dilué, les comportements, à priori similaires, trouvent dans les deux cas leur origine dans la formation de clusters ayant un grand spin. L'analyse de ces grands moments effectifs sera menée plus en détail dans la section 3 par une approche en renormalisation dans l'espace réel.

c) Températures intermédiaires : discussion

La décroissance de $\bar{c}(T)$ vers le régime de saturation est observée pour des températures d'autant plus basses que la concentration en impuretés est faible. Un tel phénomène se comprend aisément car le couplage entre impuretés décroît très rapidement avec la distance. Or la séparation moyenne inter-impuretés se comportant comme $\sim 1/\sqrt{x}$, il est naturel de devoir atteindre des températures d'autant plus faibles que x est petit pour que les spins deviennent corrélés.

Néanmoins, il est intéressant de regarder de plus près le régime de températures intermédiaires, représenté en vignette sur la figure VI.6. On y observe que pour les plus grandes concentrations $x \geq 2,8\%$, un régime de *plateau* pour la constante de Curie semble se dessiner ; d'autant plus marqué que x est grand. En revanche, pour

les concentrations plus faibles, un tel comportement n'apparaît pas, \bar{c} décroissant de façon régulière vers $1/12$.

Afin d'interpréter qualitativement cette apparition d'un plateau dans la constante de Curie, il convient d'abord d'analyser les différents régimes de dopage de notre modèle. Définissons une connectivité moyenne à courte distance \tilde{z} , comme étant le nombre de voisins moyens « fortement couplés » à chaque spin. Par fortement couplés, nous entendons couplés à l'intérieur d'une région caractéristique, dont les dimensions sont données par les distances naturelles qui émergent des couplages effectifs (V.20), (V.21) et (V.22), i.e. ξ_{\parallel} , ξ_{\parallel}^0 et ξ_{\perp} . Cette connectivité moyenne dépend de x de façon linéaire

$$\tilde{z}(x) \simeq \tilde{\mathcal{N}}x, \quad (\text{VI.10})$$

$\tilde{\mathcal{N}}$ étant le nombre de sites contenus dans la région caractéristique. Avec les paramètres de notre modèle, nous trouvons la valeur de $\tilde{\mathcal{N}} = 65$ sites. Ainsi, nous pouvons définir deux régimes de dopage bien distincts :

(i) Si $\tilde{z} < 1$, autrement dit $x < 1,6\%$, la probabilité pour qu'un cluster de spins fortement couplés se forme tend vers 0 avec la taille du cluster. Ce régime est appelé *régime fortement dilué*.

(ii) Si $\tilde{z} > 2$, autrement dit $x > 3\%$, chaque spin est, en moyenne, fortement couplé à au moins deux voisins : un « seuil de percolation » est donc atteint et l'on s'attend à ce que des groupements de taille infinie se forment à la limite thermodynamique. Ce régime est nommé le *régime faiblement dilué*.

Dans le régime faiblement dilué, quand le système est refroidi, les clusters de spins fortement couplés deviennent corrélés lorsque la température atteint le couplage « typique » entre impuretés voisines. A cette échelle d'énergie, la constante de Curie subit une réduction brutale car chaque cluster de taille n a été « gelé » dans son état fondamental de spin total $0 \leq S_{\text{total}}^{\text{eff}} \leq n/2$. Ces nouveaux degrés de liberté sont ensuite corrélés à des échelles d'énergies bien plus basses que le couplage « typique » mentionné plus haut. C'est pourquoi on observe une gamme de température où ces moments effectifs se comportent essentiellement librement, produisant ainsi ce régime de plateau, transitoire, observé en vignette sur la figure VI.6.

Dans la suite, nous verrons que cette connectivité à courte distance $\tilde{z}(x)$, ainsi que les deux régimes de dilution évoqués plus haut, sont physiquement pertinents. Ils nous permettront en outre de justifier l'application du groupe de renormalisation dans l'espace réel dans le régime fortement dilué.

3 Étude du régime basse température par renormalisation dans l'espace réel

3.1 Procédure de décimation des couplages

Le pertinence et l'efficacité de la méthode de renormalisation des forts couplages, initiée par Ma, Dasgupta et Hu [149, 150] ont été démontrées dans de très nombreux cas, comme nous en avons déjà discuté dans le chapitre III, page 39. Notre objectif

ici, est d'appliquer cette procédure au modèle effectif (VI.1) de spins $\frac{1}{2}$ dilués, en interaction à longue portée aléatoirement ferromagnétique ou antiferromagnétique.

a) Équations de renormalisation

Dans un article fondateur, Bhatt et Lee [156] ont appliqué la décimation des couplages à un problème de spins en interaction antiferromagnétique à longue portée dans des semi-conducteurs dilués [268]. Pour ce faire, une méthode de renormalisation par clusters a été développée [156]. Nous proposons de l'étendre ici à notre modèle pour lequel la présence des couplages ferromagnétiques doit être prise en compte dans les équations de renormalisation des interactions [157, 174], et intégrée aux effets à longue portée.

Par mesure de simplicité, les sites des impuretés sont indexés (dans un ordre arbitraire) par $i = 1, \dots, N_s$ et les couplages, par $J_{i,j}$. Un pas de la procédure de renormalisation, illustré schématiquement par l'exemple à 4 spins de la figure VI.7, se décompose comme suit :

- (a) Il faut d'abord localiser la paire de spins (S_1, S_2) qui possèdent le plus grand gap $\Delta_{1,2}$. Le couplage étant égal à $J_{1,2}$, le gap est donné par

$$\Delta_{1,2} = J_{1,2}(1 + |S_1 - S_2|) \quad \text{si } J_{1,2} > 0 \quad (\text{VI.11})$$

$$= -J_{1,2}(S_1 + S_2) \quad \text{si } J_{1,2} < 0. \quad (\text{VI.12})$$

Notons que $\Delta_{1,2} = \Delta_0$ définit l'échelle d'énergie de la transformation, et de fait, joue le rôle de la température.

- (b) Cette paire de spins est ensuite décimée et remplacée par un spin effectif

$$\tilde{S} = |S_1 - S_2| \quad \text{si } J_{1,2} > 0 \quad (\text{VI.13})$$

$$= S_1 + S_2 \quad \text{si } J_{1,2} < 0. \quad (\text{VI.14})$$

- (c) Renormalisation des couplages :

- Si $\tilde{S} \neq 0$, en perturbation au premier ordre, les nouveaux couplages entre \tilde{S} et tous les autres spins $(S_3, S_4, \dots, S_{N_s})$ sont donnés par

$$\tilde{J}_{\tilde{S}-S_i} = J_{1,i} \lambda(S_1, S_2, \tilde{S}) + J_{2,i} \lambda(S_2, S_1, \tilde{S}), \quad (\text{VI.15})$$

avec $i = 3, 4, \dots, N_s$, et

$$\lambda(S_k, S_l, \tilde{S}) = \frac{\tilde{S}(\tilde{S} + 1) + S_k(S_k + 1) - S_l(S_l + 1)}{2\tilde{S}(\tilde{S} + 1)}. \quad (\text{VI.16})$$

On voit aussi que si $\tilde{S} = 0$, on trouve $\lambda = 0$.

- Si $\tilde{S} = 0$, la paire (S_1, S_2) a été remplacée par un singulet. La renormalisation des couplages est donc donnée par le deuxième ordre des perturbations.

Ici, l'approximation suivante a été utilisée : seule la paire (S_3, S_4) la plus fortement couplée aux spins originels (S_1, S_2) , voit son interaction renormalisée :

$$\tilde{J}_{3,4} = J_{3,4} + \frac{2S_1(S_1 + 1)}{3J_{1,2}}(J_{1,3} - J_{2,3})(J_{2,4} - J_{1,4}). \quad (\text{VI.17})$$

Ensuite, nous retournons à la première étape, et la procédure⁷ est réitérée un très grand nombre de fois.

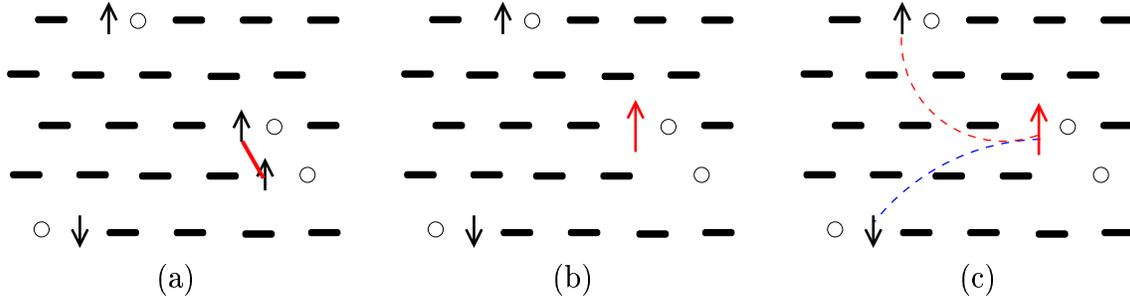


FIG. VI.7 – Représentation schématique du système spin-Peierls dopé, similaire à la figure VI.1. Les trois étapes (a) (b) (c) de la renormalisation du système dilué sont illustrées sur un exemple à 4 spins. (a) La paire la plus fortement couplée est repérée par le lien en rouge. (b) Cette paire, ferromagnétique, est remplacée par un spin effectif $S = 1$ \uparrow . (c) Les couplages avec les autres spins (lignes brisées) sont renormalisés.

b) Approche numérique

L'approche numérique a été privilégiée ici. Pour un système possédant N_s spins $\frac{1}{2}$, il y a $N_s(N_s - 1)/2$ couplages à considérer. Comme nous l'avons déjà signalé lors de l'analyse des données Monte Carlo pour la constante de Curie, la présence de couplages ferromagnétiques et antiferromagnétiques dans le problème entraîne que des grands spins peuvent se former durant la renormalisation. A chaque étape p de la transformation, l'échelle d'énergie Δ_0 diminue (voir figure VI.8) et le nombre de spins inactifs augmente. En effet, les spins originels sont soit gelés en singulet ($S = 0$), auquel cas leur nombre est réduit comme $N_s \rightarrow N_s - 2$; soit la renormalisation produit un spin d'amplitude finie ($\tilde{S} \geq 1/2$), auquel cas $N_s \rightarrow N_s - 1$. Par conséquent, en moyenne, à chaque étape le nombre de spins actifs est réduit comme $N_s \rightarrow N_s - v(p)$, avec $1 < v(p) < 2$; ce qui implique que sur un système de taille finie, la décimation sera, en moyenne, stoppée à une certaine étape $N_s/2 < p^* < N_s$. La figure VI.8 illustre bien ce fait sur un exemple à $N_s = 1024$ spins où l'on voit que au delà de $p^* \simeq 650$, les barres d'erreurs deviennent inacceptables, signalant ainsi l'arrêt de la procédure.

Dans la suite nous allons appliquer la technique de décimation dans l'espace réel à l'analyse de la formation des grands spins effectifs à mesure que l'échelle d'énergie décroît, ainsi qu'à l'étude de la susceptibilité de Curie.

7. Remarquons que la transformation préserve le caractère non frustré du problème.

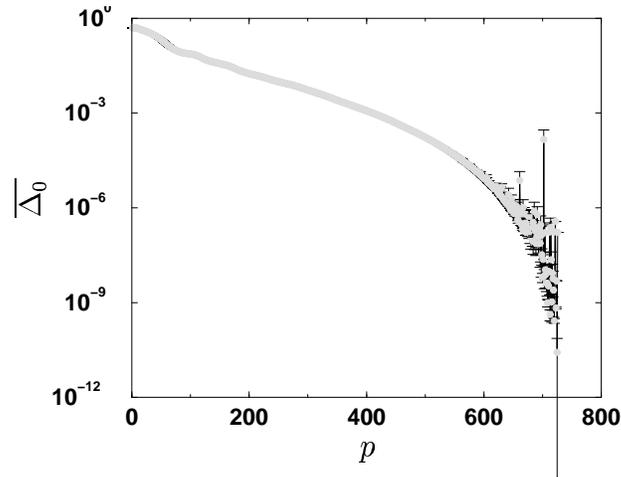


FIG. VI.8 – Évolution de l'échelle d'énergie $\overline{\Delta_0}$ de la transformation en fonction du nombre de pas de renormalisation p . Résultats, moyennés sur 10000 échantillons, d'un calcul numérique effectué sur le modèle (VI.1) pour un système de taille 320×320 , avec $N_s = 1024$ spins $\frac{1}{2}$ ($x = 1\%$).

3.2 Formation de grands spins effectifs et susceptibilité de Curie

a) Formation des moments effectifs

I. CALCUL NUMÉRIQUE DE $\overline{S^{\text{eff}}}$

Durant la renormalisation, l'évolution de la taille moyenne des moments magnétiques est calculée en utilisant l'expression

$$\overline{S^{\text{eff}}}(p) = \frac{1}{N_s(p)} \sum_{i=1}^{N_s(p)} \tilde{S}_i, \quad (\text{VI.18})$$

où $N_s(p)$ est le nombre de spins effectifs $\tilde{S}_i \geq 1/2$ demeurant actifs à la p -ième étape de la décimation. Sur la figure VI.9 sont représentés $\overline{S^{\text{eff}}}(p)$ et $\overline{N_s}(p)$ en fonction de p . On voit en (a) que le nombre moyen de spins actifs décroît assez lentement jusqu'à $p^* \simeq 650$; au delà, $\overline{N_s}$ tend très rapidement vers 0. Le comportement de la taille moyenne du spin effectif, représenté sur la figure VI.9(b), est très intéressant car à mesure que l'échelle d'énergie décroît, on voit que $\overline{S^{\text{eff}}}$ augmente, démontrant ainsi la formation de grands spins dans le système à basse température. Là aussi, on observe que au delà de $p^* \simeq 650$, la procédure de décimation perd sa validité.

II. CROISSANCE DES SPINS EFFECTIFS À BASSE TEMPÉRATURE

Pour pouvoir étudier le comportement de $\overline{S^{\text{eff}}}$ directement en fonction de l'échelle d'énergie Δ_0 , on calcule cette dernière à chaque pas p et on effectue ensuite une moyenne sur tous les échantillons désordonnés, afin d'obtenir la correspondance $p = f(\overline{\Delta_0})$. Une fois ce calcul réalisé, on représente sur la figure VI.10 $\overline{S^{\text{eff}}}(\overline{\Delta_0})$ avec des

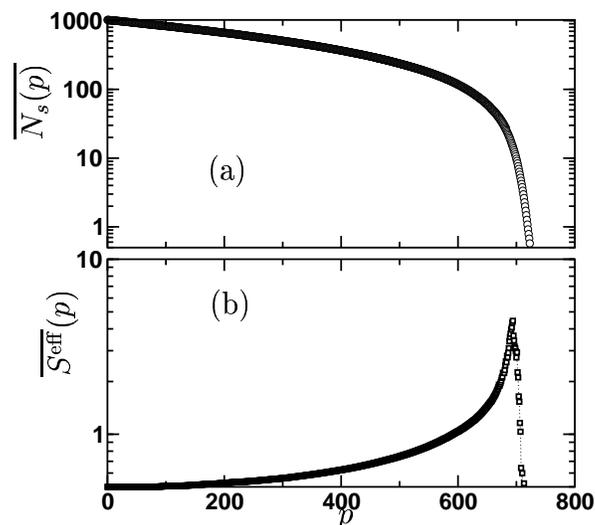


FIG. VI.9 – (a) Nombre moyen et (b) taille moyenne des spins effectifs demeurant actifs à la p -ième étape de la décimation. \overline{N}_s et $\overline{S}^{\text{eff}}$, tous deux tracés en fonction de p , ont été calculés numériquement pour $N_s = 1024$ spins $\frac{1}{2}$ distribués dans un réseau de 320×320 ($x = 1\%$), et moyennés sur 10000 échantillons. Afin d'améliorer la clarté de la figure, les barres d'erreurs ne sont pas tracées; notons cependant que, à l'instar de la figure VI.8, ces dernières sont plus petites que les tailles de symboles pour $p < 650$ et qu'elles deviennent inacceptables ensuite.

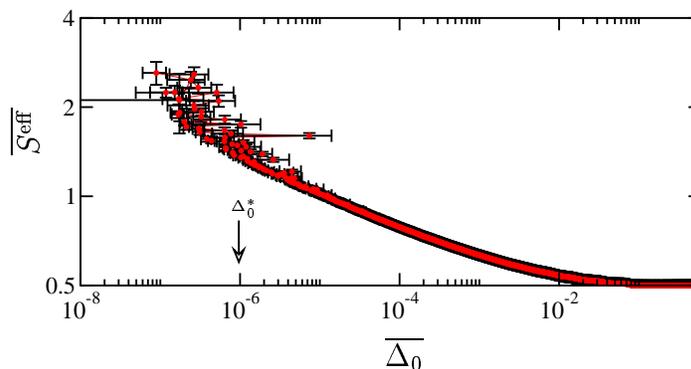


FIG. VI.10 – Comportement du spin effectif $\overline{S}^{\text{eff}}$ en fonction de l'échelle d'énergie de la renormalisation $\overline{\Delta}_0$, pour $N_s = 1024$ spins dilués à $x = 1\%$, calculé sur 10000 échantillons. Les barres d'erreurs dans les deux directions sont représentées. La coupure Δ_0^* (discutée dans le texte) est figurée par la flèche.

barres d'erreurs dans les deux directions. En échelle log-log, on voit que le spin effectif croît en loi de puissance lorsque l'énergie diminue, jusqu'à une certaine coupure en énergie Δ_0^* à partir de laquelle les barres d'erreurs deviennent trop importantes.

Cette divergence en loi de puissance est maintenant analysée pour différentes concentrations x . Bien que la procédure numérique nous permette de simuler des systèmes contenant jusqu'à $N_s^{\text{max}} \simeq 10^4$ spins (ce qui correspond à 5×10^7 termes

de couplages), nous faisons le choix de simuler $N_s = 1024$ spins afin de maximiser les moyennes sur le désordre, le nombre d'échantillons utilisés étant très grand : $\mathcal{S} \geq 10^4$. Par ailleurs, nous avons vérifié que les effets de taille finie sont faibles lorsque le nombre de spins considéré devient typiquement supérieur à 10^3 .

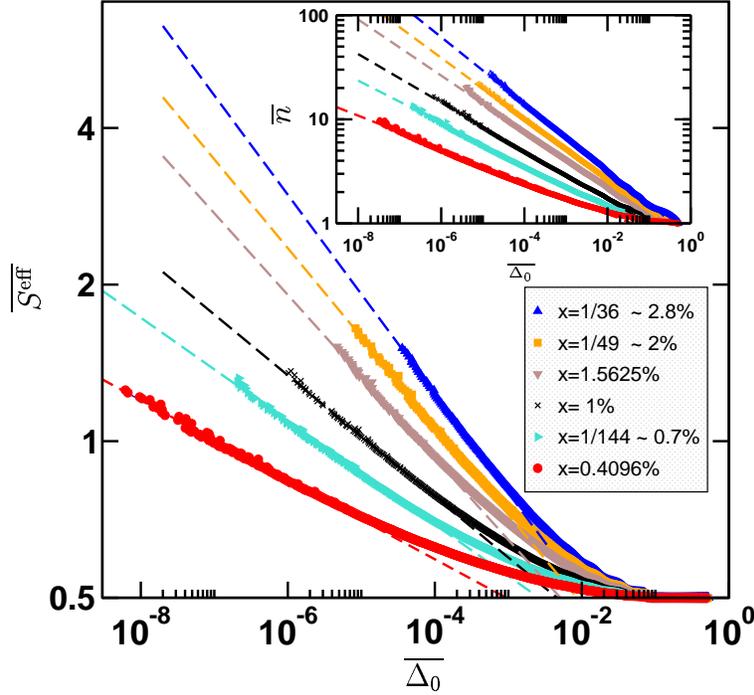


FIG. VI.11 – Comportement du spin effectif moyen $\overline{S}^{\text{eff}}$ en fonction de l'échelle d'énergie moyenne $\overline{\Delta}_0$, tracé pour six concentrations différentes $0,4096\% \leq x \leq 2,7778\%$, comme indiqué sur le graphe. Résultats obtenus par résolution numérique des équations de renormalisation pour $N_s = 1024$ spins, et moyennés sur 10000 échantillons. Les barres d'erreurs sont plus petites ou de tailles similaires aux symboles. En vignette, pour les mêmes échantillons, le nombre moyen de spins $\frac{1}{2}$ originels \overline{n} par spin effectif est tracé en fonction de $\overline{\Delta}_0$. Les droites hachurées sont des fits en lois de puissances, discutés dans le texte. Figure extraite de la référence [192], publication n° 7.

La formation des grands spin, illustrée par la figure VI.11, est caractérisée par une divergence en loi de puissance de la forme

$$\overline{S}^{\text{eff}} \sim (\overline{\Delta}_0)^{-\alpha(x)}, \quad (\text{VI.19})$$

avec un exposant $\alpha(x)$ dépendant de la concentration (voir le tableau VI.1). Le nombre moyen de spins $\frac{1}{2}$ originels \overline{n} participant à la formation d'un grand spin est, lui aussi, divergent lorsque l'échelle d'énergie est réduite, comme le montre la vignette de la figure VI.11. Cette divergence est également caractérisée par une loi de puissance, de la forme

$$\overline{n} \sim (\overline{\Delta}_0)^{-\kappa(x)}, \quad (\text{VI.20})$$

avec un exposant $\kappa(x)$ que nous trouvons $\simeq 2\alpha(x)$ pour les plus petites valeurs de x . L'argument de marche aléatoire, évoqué plus haut, conduisant à $\overline{S}^{\text{eff}} \sim \sqrt{\overline{n}}$ semblent donc valide dans le régime fortement dilué. Les valeurs des exposants α et $\kappa/2$, déterminés à l'aide de fits sur les données numériques sont rapportées dans le tableau VI.1.

x (%)	0,1	0,41	0,7	1	1,56	2	2,8
α	0,035	0,08	0,1	0,12	0,15	0,17	0,19
$\kappa/2$	0,035	0,08	0,1	0,12	0,14	0,15	0,16

TAB. VI.1 – Exposants $\alpha(x)$ et $\kappa(x)$ contrôlant la formation des grands spins à basse température, selon (VI.19) et (VI.20), obtenus pour sept concentrations $0,1\% \leq x \leq 2,8\%$. Valeurs extraites de fits sur les résultats de la renormalisation numérique, représentés sur la figure VI.11 (excepté pour $x = 0,1\%$).

b) Étude de la constante de Curie

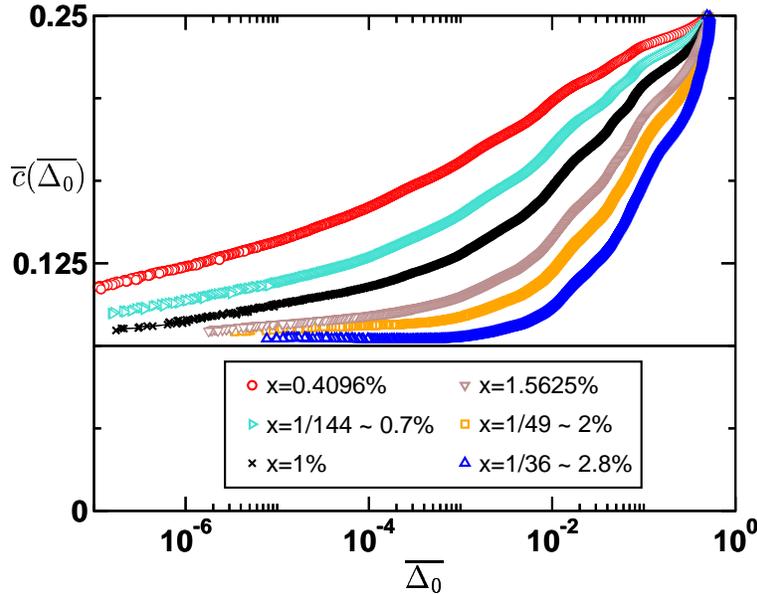


FIG. VI.12 – Constante de Curie par impureté en fonction de l'échelle de température $\overline{\Delta}_0$. Résultats de calculs par décimation dans l'espace réel sur des réseaux contenant $N_s = 1024$ spins, fortement dilués. Six concentrations différentes, indiquées sur la figure par les différents symboles, ont été utilisées et les moyennes sur le désordre ont été effectuées sur 10000 échantillons. La ligne pleine représente la valeur de saturation à $\frac{1}{12}$.

La détermination numérique de la constante de Curie par impureté c , s'effectue à chaque pas de renormalisation p , en utilisant la formule

$$c = \frac{1}{3N_s} \sum_{\sigma} N_{\sigma} \sigma(\sigma + 1), \quad (\text{VI.21})$$

où N_σ représente le nombre de spins effectifs de taille σ demeurant encore actifs à la p -ième étape, $\sum_\sigma N_\sigma = N_s(p)$. Les données sont ensuite moyennées, comme précédemment sur un très grands nombre d'échantillons désordonnés. Ainsi, la figure VI.12 représente \bar{c} , obtenue pour 10000 échantillons indépendants, avec $N_s = 1024$ spins $\frac{1}{2}$ aléatoirement distribués sur des réseaux carrés de tailles $L \times L$, avec $500 \leq L \leq 192$. De façon tout à fait similaire à la figure VI.6, on observe ici une constante de Curie qui subit une réduction d'un facteur $\simeq 3$ à mesure que l'échelle d'énergie moyenne $\overline{\Delta_0}$ diminue. D'un point de vue qualitatif, à basse température la comparaison entre les données obtenues par décimation et les calculs en Monte Carlo quantique SSE donne des résultats a priori très satisfaisants ; à savoir une saturation de \bar{c} vers $1/12$, d'autant plus lente que x est faible.

A ce stade du travail, il convient de se poser la question de la validité *quantitative* de cette approche par renormalisation des plus forts couplages. Par exemple, on peut facilement s'imaginer que lorsque la concentration x augmente, la densité de spins fortement couplés (à courte distance), va aussi augmenter et éventuellement compromettre l'applicabilité de la procédure perturbative. La section suivante est dédiée à une telle analyse.

3.3 Discussion concernant la validité de l'approche perturbative

a) Arguments qualitatifs

Dans le cas de la chaîne antiferromagnétique, la procédure de décimation des couplages aléatoires est asymptotiquement exacte, comme l'a démontré Fisher [6] ; fournissant ainsi une justification robuste à cette méthode. Dans l'exemple de la chaîne avec des couplages aléatoires en amplitude et en signe [157, 158], la décimation a aussi fournit de très bons résultats ; l'existence d'un point fixe pour la distribution des couplages ayant été prouvée sans ambiguïté [158]. La validité de l'approche a aussi été discutée [158] et une comparaison directe avec des calculs par Monte Carlo quantique a permis de valider l'applicabilité de cette technique [269, 270].

Formellement, notre problème bidimensionnel (VI.1) est infiniment connecté : en effet chaque spin est couplé avec tous les autres. Pourtant, bien que les moments puissent s'ordonner à température nulle pour des concentrations x arbitrairement faibles (voir la section 2.2 de ce chapitre), à température finie la physique est contrôlée par les couplages à courte distance. La connectivité moyenne à courte distance, définie par l'équation (VI.10), va nous permettre de quantifier les effets à courte portée. Dans le régime fortement dilué mentionné plus haut, le fait que $\tilde{z} < 1$ ($x < 1.55\%$) nous assure que la probabilité d'observer un spin S_3 fortement couplé à la paire de spins la plus fortement couplée (S_1, S_2) est extrêmement faible. Ceci entraîne alors que la condition

$$J_{1,2} \gg J_{1,i}, J_{2,i}, \quad \forall i > 2 \tag{VI.22}$$

est remplie, justifiant ainsi l'application d'une méthode perturbative. En revanche, dans le régime faiblement dilué on a $\tilde{z} > 2$ ($x > 3,1\%$) et par conséquent, comme

nous l'avons déjà abordé dans la discussion page 118, des clusters fortement couplés de très grande taille peuvent se former, rendant ainsi la condition (VI.22) caduque.

b) Comparaison directe avec le Monte Carlo quantique

Bien que les précédents arguments aient un caractère qualitatif, nous pouvons vérifier leur pertinence en comparant directement les résultats issus de la décimation des couplages avec ceux provenant des simulations SSE, à l'aide de la figure VI.13. La convergence de la constante de Curie vers sa valeur de saturation à très basse température de $1/12$ y est analysée pour les données provenant des deux méthodes numériques.

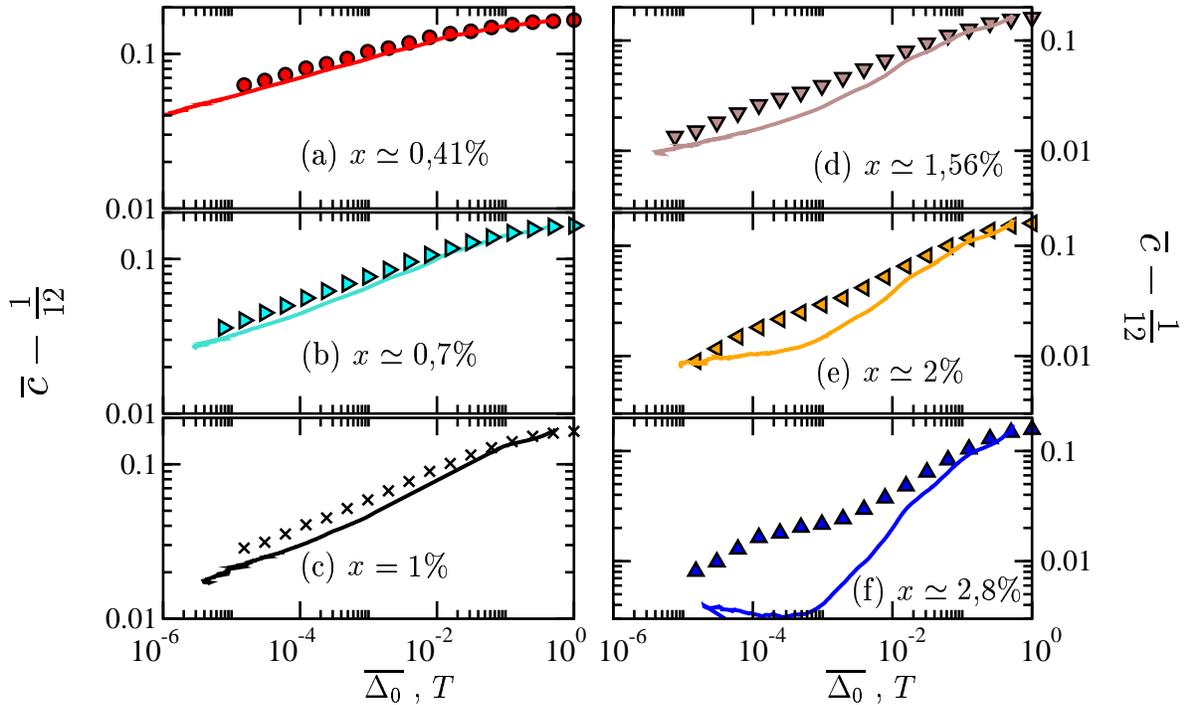


FIG. VI.13 – Comparaison entre les résultats issus des simulations SSE (symboles) et de la renormalisation numérique (lignes pleines) pour $\bar{c} - \frac{1}{12}$, en fonction de la température T (SSE) ou de l'échelle d'énergie $\bar{\Delta}_0$ (décimation). Les six concentrations différentes, indiquées sur le graphe, correspondent aux connectivités moyennes à courte distance suivantes : (a) $\tilde{z} \simeq 0,27$, (b) $\tilde{z} \simeq 0,45$, (c) $\tilde{z} \simeq 0,65$, (d) $\tilde{z} \simeq 1$, (e) $\tilde{z} \simeq 1,3$ et (f) $\tilde{z} \simeq 1,8$.

Pour la plus basse concentration, représentée sur la figure VI.13(a), $x \simeq 0,41\%$, l'accord entre le SSE et la renormalisation numérique est excellent ; énergie $\bar{\Delta}_0$ et température T étant de plus quasiment confondus. Lorsque x augmente, outre l'écart grandissant observé entre $\bar{\Delta}_0$ et T , la comparaison entre les deux méthodes reste très satisfaisante jusqu'à $x \leq 1\%$. Au delà de $x \geq 1,56\%$ (figures VI.13 (d), (e) et (f)), l'approche perturbative perd manifestement sa validité. On vérifie ainsi que les arguments qualitatifs développés en a) sont tout à fait recevables. Nous pouvons

finaleme^{nt} conclure que *quantitativement*, la renormalisation des couplages fournit de très bons résultats dans le régime fortement dilué où $\tilde{z} < 1$.

Cette procédure est en fait très générale et peut à priori s'appliquer à tout type de problème de magnétisme désordonné avec des interactions à longue distance. Le critère phénoménologique de validité du traitement perturbatif, $\tilde{z} < 1$, que nous mettons en avant ici, peut aussi se transposer au cas général d'une interaction exponentielle du type (V.23), avec

$$\tilde{z} = \pi \xi_{\parallel} \xi_{\perp} x. \quad (\text{VI.23})$$

Par conséquent le régime faiblement dilué serait donné dans le cas général par la condition $x < \frac{1}{\pi \xi_{\parallel} \xi_{\perp}}$.

3.4 Régime critique

Afin d'analyser en détail le régime critique, notre démarche ici consiste à établir pour les propriétés à basse température, une comparaison avec la chaîne de spin aléatoirement ferromagnétique ou antiferromagnétique. En effet cette dernière offre un exemple extrêmement riche d'un point fixe à grands spins⁸[158].

a) Régime critique du modèle unidimensionnel

Plusieurs lois d'échelles émergent de l'analyse à basse température de la chaîne de spins désordonnée par des couplages aléatoirement ferromagnétiques ou antiferromagnétiques. Il a notamment été démontré [157, 158] que lorsque la distribution initiale des gaps $\mathcal{P}(\Delta)$ était moins singulière que $\mathcal{P}_c(\Delta) \sim \Delta^{-y_c}$, avec $0,65 \leq y_c \leq 0,75$, la procédure de renormalisation converge vers un point fixe universel où nombre de quantités divergent en lois de puissance.

La formation des grands spins effectifs par exemple, est gouvernée à basse température par

$$\overline{S^{\text{eff}}} \sim T^{-\alpha}, \quad (\text{VI.24})$$

le nombre moyen de spins $\frac{1}{2}$ originels participant à la formation d'un grand spin étant

$$\bar{n} \sim T^{-2\alpha}. \quad (\text{VI.25})$$

L'exposant critique α a été évalué numériquement par renormalisation dans l'espace réel [157, 158]:

$$\alpha = 0,22 \pm 0,01. \quad (\text{VI.26})$$

Dans le régime asymptotique $T \rightarrow 0$, la constante de Curie, mesurée en Monte Carlo quantique [269, 270], exhibe un comportement critique de la forme

$$\bar{c}(T) - \frac{1}{12} \sim T^{\alpha}, \quad (\text{VI.27})$$

conformément à une analyse statistique [269]. Les estimations de α issues de ces simulations Monte Carlo fournissent la valeur $\alpha = 0,21 \pm 0,02$.

⁸. Une classification des différents types de points fixes contrôlant les systèmes magnétiques désordonnés est initiée dans [174].

En se basant sur une discussion utilisant la description de la chaîne désordonnée en terme de modèle sigma non linéaire, Nagaosa *et al.* [258] suggèrent que chaque cluster contenant \bar{n} spins originels forme un moment alterné (classique) $\overline{S_{alt}^{eff}} \sim \bar{n}$. Par suite, la susceptibilité alternée par spin s'exprime comme

$$\overline{\chi_{alt}} \sim \frac{\overline{S_{alt}^{eff}}^2}{\bar{n}T} \sim \frac{\bar{n}}{T} \sim T^{-1-2\alpha}. \quad (\text{VI.28})$$

Néanmoins, une étude par Monte Carlo quantique se trouve être en désaccord avec (VI.28), concluant plutôt sur une divergence plus faible: $\overline{\chi_{alt}} \sim T^{-a}$, avec $a = 1,17 \pm 0,01$ [270].

b) Détermination des exposants

Les divergences de $\overline{S^{eff}}$ et de \bar{n} , données par (VI.19) et (VI.20), ont été mise en évidence dans la section 3.2 a). Contrairement au cas unidimensionnel où émerge un point fixe avec $\alpha \simeq 0,22$, il est apparu que dans le modèle traité ici, la formation des clusters de grand spins effectifs est contrôlée par un exposant critique non universel, dépendant explicitement de la dilution x (voir le tableau VI.1).

Dans ce qui suit, nous analysons le régime critique pour la constante de Curie ainsi que pour la susceptibilité alternée.

I. CONSTANTE DE CURIE

Nous avons vu que la constante de Curie par spin subit une réduction d'un facteur 3 entre la valeur $\bar{c} = 1/4$ à haute température (tous les spins $\frac{1}{2}$ sont paramagnétiques) et $\bar{c} \rightarrow 1/12$ à très basse température où des clusters de grands spins effectifs se forment. Néanmoins, à basse température des corrections quantiques à la valeur classique de $1/12$ [27, 26] sont présentes. Elles ont d'ailleurs fait l'objet pour le problème unidimensionnel d'une analyse statistique par Frischmuth *et al.* [269] où la correction (VI.27) a été confirmée par des simulations en Monte Carlo quantique [269, 270]. Dans notre cas, bidimensionnel, nous postulons le comportement suivant :

$$\bar{c}(T) - \frac{1}{12} \sim T^\gamma, \quad (\text{VI.29})$$

avec γ , à priori dépendant de x , à déterminer.

Nous utilisons pour ce faire les données obtenues pour \bar{c} en Monte Carlo quantique (figure VI.6) et par la renormalisation dans l'espace réel (figure VI.12). La procédure utilisée est la suivante : d'abord la valeur de γ est estimée pour la concentration la plus basse (i.e. $x_{\min} = 0,41\%$ pour les données SSE et $x_{\min} = 0,1\%$ pour les données de la décimation (RG)) en utilisant directement un fit en loi de puissance ($\gamma_{\text{SSE}}(0,0041) \simeq 0,12$ et $\gamma_{\text{RG}}(0,001) \simeq 0,065$). Ensuite, connaissant la valeur de saturation de \bar{c} lorsque $T \rightarrow 0$, les autres valeurs de γ sont adaptées dans le but d'obtenir le meilleur écrasement de toutes les données, tracées en fonction de $T^{\gamma(x)}$, sur une droite universelle passant par $1/12$ à $T = 0$.

La figure VI.14 illustre ceci : on y remarque que pour les données obtenues en SSE (figure VI.14(a)), la déviation de la droite universelle à hautes températures est la

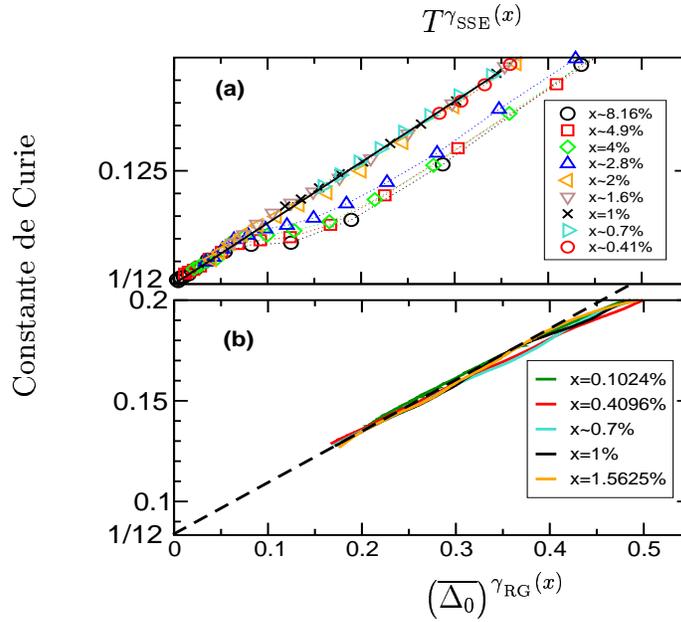


FIG. VI.14 – Constante de Curie \bar{c} tracée en fonction de $T^{\gamma_{SSE}(x)}$ (a) ou $(\overline{\Delta_0})^{\gamma_{RG}(x)}$ (b). La saturation à très basses températures vers la valeur classique de $1/12$ est analysée à l'aide de l'écrasement des données de la figure VI.6 pour (a) et de la figure VI.12 pour (b) en une droite unique passant par $1/12$ pour $T \rightarrow 0$ (ligne pleine en (a) et ligne brisée en (b)). Les concentrations considérées sont figurées sur les graphes. Partie (a) extraite de la référence [192], publication n° 7.

signature du plateau, évoqué plus haut pour le régime faiblement dilué ($x \geq 2,8\%$). A plus basse température toutefois, les points se retrouvent sur la droite linéaire passant par $1/12$. Pour les fortes dilutions ($x < 2\%$), une seule droite est visible. Sur la partie (b) de la figure VI.14, la même chose est réalisée pour les données issues des simulations numériques de la procédure de décimation. Seules les plus basses concentrations y sont représentées, $x \leq 1,56\%$, correspondant au régime de dilution pour lequel l'approche perturbative peut être considérée valide (voir la figure VI.13). Les estimations de $\gamma(x)$ sont reportées dans le tableau VI.2 où il est intéressant de remarquer que $\gamma \simeq \kappa \simeq 2\alpha$.

x (%)	0,1	0,41	0,7	1	1,56%	2	2,8	4	4,9	8,2
γ_{SSE}		0,12	0,16	0,19	0,25	0,29	0,305	0,37	0,43	0,6
γ_{RG}	0,065	0,14	0,2	0,24	0,34	0,39				
κ_{RG}	0,07	0,15	0,2	0,23	0,28	0,3	0,32			

TAB. VI.2 – Exposants $\gamma(x)$ déterminés à l'aide de loi (VI.29) en procédant à l'écrasement des données de la constante de Curie obtenues par SSE (figure VI.14(a)) et par décimation (RG) (figure VI.14(b)). Les cases vides signifient que les données n'étaient soit pas disponibles (SSE), soit non interprétables (RG). L'exposant κ , (VI.20), est reporté à titre comparatif.

II. SUSCEPTIBILITÉ ALTERNÉE

A l'instar de l'analyse phénoménologique effectuée pour la constante de Curie à basse température, nous utilisons les résultats obtenus pour le problème unidimensionnel, en prenant l'expression (VI.28) comme point de départ. La divergence de la susceptibilité alternée par site, calculée par SSE, est représentée sur la figure VI.15 où $T \times \overline{\chi}_{alt}$ est tracée en fonction de T . Supposant le comportement

$$\overline{\chi}_{alt} \sim T^{-1-2\gamma'}, \quad (\text{VI.30})$$

nous sommes en mesure d'extraire l'exposant $\gamma'(x)$ pour les cinq concentrations représentées sur le graphe. Le fait que nous trouvons $\gamma'(x) > 0$ nous confirme qu'une

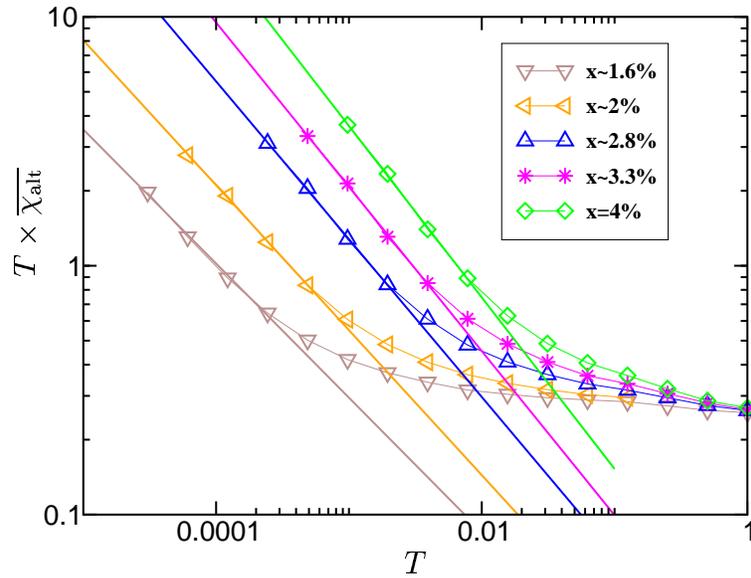


FIG. VI.15 – Divergence à basse température de la susceptibilité alternée par spin, représentée pour cinq concentrations différentes. Résultats de calculs SSE pour $N_s = 576$ spins. Les droites sont des fits en lois de puissances, discutées dans le texte. Figure extraite de la référence [192], publication n° 7.

instabilité antiferromagnétique est présente dans le système (nous avons vu en 2.2 qu'un ordre antiferromagnétique apparaît à $T = 0$). Par ailleurs, la dépendance en x de γ' est reportée dans le tableau VI.3 où la comparaison avec l'exposant γ , extrait précédemment pour les corrections quantiques à la constante de Curie, nous indique que $\gamma \simeq \gamma'$.

III. EXPOSANTS

Nous résumons maintenant les résultats obtenus pour les 4 exposants α , κ , γ et γ' . Les deux premiers sont extraits des résultats de la renormalisation numérique: $\overline{S}^{eff} \sim (\overline{\Delta}_0)^{-\alpha}$ et $\overline{n} \sim (\overline{\Delta}_0)^{-\kappa}$. Par ailleurs, la validité de l'argument de marche aléatoire a bien été vérifiée, donnant ainsi la relation

$$\kappa = 2\alpha. \quad (\text{VI.31})$$

x	1,5625%	1/49	1/36	4/121	4%
γ'	0,27	0,29	0,32	0,33	0,345
γ_{SSE}	0,25	0,29	0,31		0,37

TAB. VI.3 – Exposant $\gamma'(x)$ déterminé à l'aide de loi VI.30 par des fits des données numériques SSE (figure VI.15). Les estimations sont comparées à celles obtenues pour l'exposant γ de la constante de Curie.

Le troisième exposant, γ , a pu être évalué par renormalisation et par SSE, en utilisant $\bar{c}(T) - 1/12 \sim T^\gamma$. Le dernier, contrôlant la divergence de la susceptibilité alternée $\overline{\chi_{alt}} \sim T^{-1-2\gamma'}$, a lui, été évalué par SSE. La figure VI.16 résume les résultats pour ces exposants contrôlant les divergences des quantités thermodynamiques à basse température. Outre le fait que l'on y vérifie bien que $\kappa = 2\alpha$ à basse concentration, il est intéressant de remarquer $\alpha(x) \simeq \sqrt{x}$. Les similarités dans les comportements

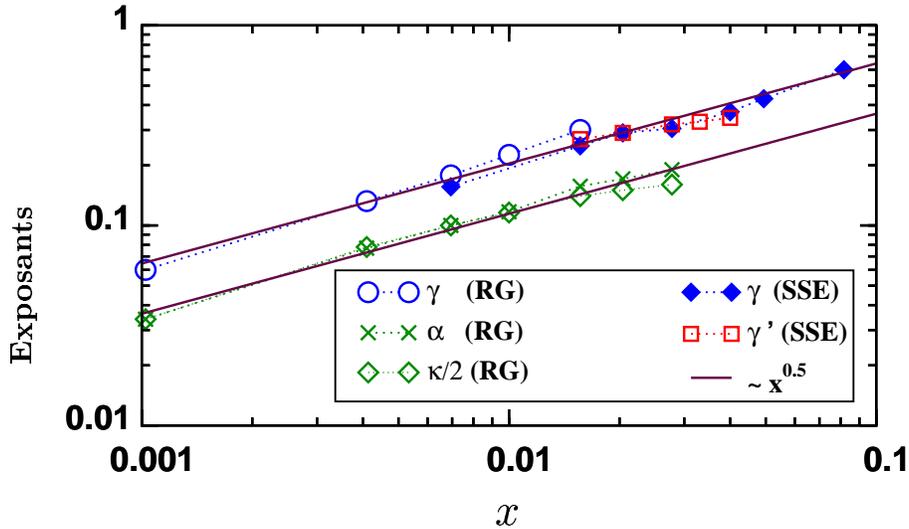


FIG. VI.16 – Comportement des exposants critiques α , κ , γ et γ' en fonction de la concentration x . Les droites sont des fits $\simeq \sqrt{x}$ et $\simeq 2\sqrt{x}$. Figure extraite de la référence [192], publication n° 7.

de $\gamma(x)$ et $\gamma'(x)$ sont aussi remarquables, et la relation d'échelle suivante semble se dessiner :

$$\gamma = \gamma' = 2\alpha. \quad (\text{VI.32})$$

Alors qu'à une dimension, les arguments développés par Nagaosa *et al.* [258] pour la divergence de la susceptibilité alternée (VI.28) n'ont manifestement pas été validés [270], nous vérifions ici que l'exposant γ qui contrôle les corrections quantiques à la constante de Curie et γ' qui gouverne la divergence de $\overline{\chi_{alt}}$ sont vraisemblablement les mêmes.

IV. DISCUSSION

Plusieurs éléments peuvent faire l'objet de discussions. Tout d'abord le fait que l'exposant α soit, contrairement à la chaîne où il est constant $\simeq 0,22$, non universel car dépendant du désordre $\propto \sqrt{x}$, nous indique que la procédure de renormalisation ne converge pas vers un point fixe universel. Cependant, la distribution initiale

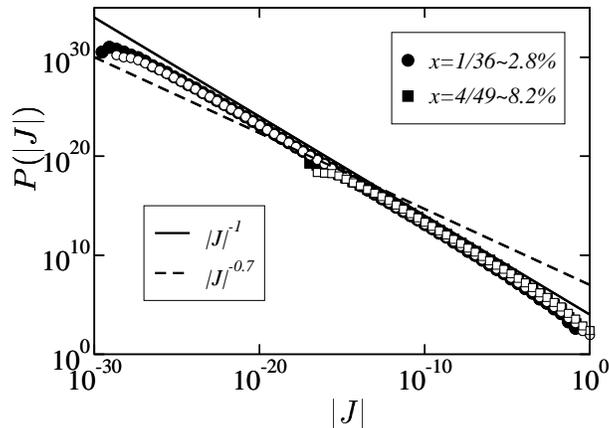


FIG. VI.17 – Distribution $P(|J|)$ des valeurs absolues des couplages effectifs initiaux pour le modèle (VI.1) représentée pour deux concentrations différentes. Les symboles vides (pleins) symbolisent les couplages antiferromagnétiques (ferromagnétiques). La ligne pleine est $\sim |J|^{-1}$ et la ligne brisée est $\sim |J|^{-0,7}$.

des couplages est, comme le montre la figure VI.17, plus singulière que la distribution critique trouvée par Westerberg *et al.* [158] dans le problème unidimensionnel : $\mathcal{P}_c(\Delta) \sim \Delta^{-y_c}$, avec $0,65 \leq y_c \leq 0,75$. Ceci entraîne que le flot du groupe de renormalisation ne peut converger vers cette distribution d'équilibre moins singulière.

Une autre façon d'interpréter le comportement de $\alpha(x)$ consiste à analyser le comportement critique du système comme suit : l'échelle d'énergie caractéristique Δ_0 d'un système de taille L s'exprime naturellement à l'aide de l'exposant dynamique z comme

$$\Delta_0 \sim L^{-z}. \quad (\text{VI.33})$$

En utilisant la relation d'échelle (VI.20) et le fait que $\kappa = 2\alpha$, on en déduit que en dimension D ,

$$z = \frac{D}{\kappa} = \frac{D}{2\alpha}. \quad (\text{VI.34})$$

Par conséquent, contrairement au cas unidimensionnel où le point fixe est caractérisé par un exposant dynamique constant $z_{1D} = 1/2\alpha \simeq 2,273$, nous trouvons ici un exposant dynamique dépendant du désordre, à l'image d'une phase de Griffiths [12, 174], avec $z(x) \simeq 1/\sqrt{x}$.

Mentionnons pour finir que lors de la procédure de décimation utilisée ici, l'échelle d'énergie moyenne $\overline{\Delta}$, définie par

$$\overline{\Delta} = \frac{\int d\Delta \Delta P(\Delta)}{\int d\Delta P(\Delta)}, \quad (\text{VI.35})$$

reste largement inférieure à $\overline{\Delta_0}$ ($\leq 10^{-2}$).

4 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons présenté les résultats relatifs à l'étude d'un modèle effectif désordonné décrivant l'interaction entre les spins $\frac{1}{2}$ libérés par des impuretés (en concentration x), aléatoirement distribuées dans des chaînes dimérisées couplées. Le caractère aléatoire (en amplitude et en signe) non frustré des interactions magnétiques ainsi que la très grande connectivité du modèle effectif ont nécessité une approche numérique intensive. Deux méthodes originales ont été utilisées : la technique de Monte Carlo quantique SSE et la méthode de renormalisation des couplages dans l'espace réel.

A température nulle, une mise en ordre antiferromagnétique a été observée sur de très grands systèmes bidimensionnels jusqu'à très basse concentration, fournissant ainsi de solides arguments pour une absence de concentration critique nécessaire à l'établissement d'un ordre antiferromagnétique. A l'aide d'un raisonnement RPA, la mise en ordre tridimensionnelle a aussi été étudiée, et la dépendance en x de la température de Néel est qualitativement en très bon accord avec les expériences effectuées sur $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{GeO}_3$.

Bien que le problème bidimensionnel exhibe une mise en ordre des moments magnétique à température nulle, le comportement à basse température de la susceptibilité uniforme présente une analogie fort intéressante avec des modèles désordonnés unidimensionnels. Ainsi, nous avons vu par Monte Carlo quantique que des spins libres participent à la susceptibilité de Curie jusqu'à des températures extrêmement basses. Un régime de saturation pour la constante de Curie vers la valeur $1/12$ a été identifié, signalant ainsi une formation de clusters de grands spins effectifs, à l'instar de l'échelle de spins à deux montants dopée.

Afin d'explorer plus avant ce régime de formation de clusters, la méthode de renormalisation des couplages dans l'espace réel s'est avérée très efficace. Ainsi, la formation des grands spins effectifs a pu être démontrée sans ambiguïté et la comparaison des résultats obtenus pour la susceptibilité de Curie avec ceux issus du SSE présente un bon accord *quantitatif*, au moins pour les plus basses concentrations étudiées ici.

Pour finir, le régime critique de très basse température a été mis en comparaison directe avec le problème de la chaîne de spins couplés aléatoirement ferromagnétique ou antiferromagnétique. De façon très intéressante, nous avons vu que les exposants critiques contrôlant la divergence de plusieurs quantités thermodynamiques à basse température sont ici, contrairement à la classe d'universalité du cas unidimensionnel, dépendant du désordre. Du point de vue du groupe de renormalisation, c'est un exemple fort intéressant d'un point fixe à grand spin avec un exposant dynamique dépendant du désordre (la dilution) $z \sim x^{-1/2}$, à l'image d'une phase de Giffiths.

Conclusion générale et perspectives

La compréhension de l'effet du désordre dans des systèmes de spins quantiques en dimensionnalité réduite s'avère cruciale. Du point de vue expérimental, la caractérisation de nouvelles phases générées par les impuretés est très importante. L'observation directe de moments magnétiques induits par le dopage (par des mesures de résonance magnétique nucléaire par exemple) ou indirecte (par des mesures de susceptibilité à basse température) permet notamment de comprendre la nature du fondamental et des excitations de basse énergie.

En ce qui concerne les systèmes magnétiques possédant un gap de spin, et plus particulièrement pour le composé CuGeO_3 , l'apparition d'une nouvelle phase à basse température où le dopage induit une mise en ordre des moments effectifs, coexistant avec la phase dimérisée, est liée à un mécanisme d'interaction effective entre les spins libérés par les impuretés et localisés au voisinage de ces dernières. Dans ce travail de thèse, nous avons montré qu'un modèle purement magnétique de chaînes frustrées et couplées permet de décrire correctement de telles propriétés. Un ordre antiferromagnétique induit par le dopage émerge en effet naturellement de ce modèle quasi-unidimensionnel. D'un point de vue plus théorique, nous avons aussi montré qu'un tel système de chaînes couplées et désordonnées par la présence d'impuretés non magnétiques présente un comportement critique non trivial, en particulier pour la constante de Curie. Plusieurs exposants critiques, dépendants de la concentration en impuretés, ont d'ailleurs été identifiés.

Outre les problématiques liées aux impuretés dans les systèmes de type liquide de spin, nous avons aussi montré que les chaînes de spins $\frac{1}{2}$ de taille finie présentent des propriétés très intéressantes. En ce qui concerne la chaîne de Heisenberg pure, non désordonnée, nous avons vu que ses propriétés de transport de spin étaient parfaitement décrites par les équations de l'Ansatz de Bethe. Grâce à ces dernières, les effets de taille finie ont pu être caractérisés pour la rigidité de spin, ouvrant ainsi d'éventuelles perspectives dans le domaine très prometteur des anneaux magnétiques nano- ou mésoscopiques. Cette même rigidité de spin, étudiée en présence de désordre pour la chaîne XX, nous a permis de caractériser la transition vers la phase de singulets aléatoires prévue par Fisher, comme étant analogue à la transition de localisation d'Anderson à une dimension. De plus, une seule et même longueur d'échelle, cruciale pour interpréter les effets de taille finie, a pu être mise en évidence, caractérisant soit la longueur de localisation contrôlant le transport, soit une longueur de crossover contrôlant les corrélations à longue portée dans la phase des singulets aléatoires.

Il est clair que la compréhension des effets provoqués par le désordre dans les systèmes de spins quantiques est bien loin d'être achevée. De nombreuses questions notamment demeurent quant à l'existence de la phase de singulets aléatoires pour les systèmes quasi-unidimensionnels voire bi- ou tridimensionnels. L'influence du désordre sur le gap de spin reste aussi sujet à de nombreux questionnements. L'ordre antiferromagnétique induit par les impuretés dans les matériaux à gap de spin est-il un phénomène générique? Ou ce comportement n'est pas généralisable, comme le laissent entrevoir de récents travaux sur le système hautement frustré Kagomé [179]. D'autres interrogations émergent quant à l'existence ou non d'une concentration critique nécessaire à l'apparition de l'ordre antiferromagnétique dans le composé $\text{PbNi}_2\text{V}_2\text{O}_8$ dopé, ainsi qu'à la possibilité d'observer expérimentalement un régime critique dans des matériaux magnétiques dopés.

Bibliographie

- [1] L. P. Levy, *Magnétisme et supraconductivité*, CNRS Éditions (1997).
- [2] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press (1999).
- [3] M. Hase, I. Terasaki et K. Uchinokura, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3651 (1993).
- [4] B. Oseroff, S. W. Cheong, B. Aktas, M. F. Hundley, Z. Fisk et L. W. Rupp, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1450 (1995).
- [5] L.-P. Regnault, J.-P. Renard, G. Dhalenne et A. Revcoleschi, *Europhys. Lett.* **32**, 579 (1995).
- [6] D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **50**, 3799 (1994).
- [7] N. Motoyama, H. Eisaki et S. Uchida, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3212 (1996).
- [8] J. C. Bonner et M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **135**, A640 (1964).
- [9] S. Eggert, I. Affleck et M. Takahashi, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 332 (1994).
- [10] M. Yamashita, T. Ishii et H. Matsuzaka, *Coord. Chem. Rev.* **198**, 347 (2000).
- [11] P. Lemmens, G. Güntherodt et C. Gros, *Phys. Rep.* **375**, 1 (2003).
- [12] R. B. Griffiths, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 17 (1969).
- [13] B. M. McCoy, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 383 (1969).
- [14] L. N. Bulaevskii, A. V. Zvarykina, Y. S. Karimov, R. B. Lyubovskii et I. F. Shchegolev, *Sov. Phys.-JETP* **35**, 384 (1972).
- [15] J. C. Fernandes, R. B. Guimarães, M. A. Continentino, H. A. Borges, J. V. Valarelli et A. Lacerda, *Phys. Rev. B* **50(R)**, 16754 (1994).
- [16] L. C. Tippie et W. G. Clark, *Phys. Rev. B* **23**, 5846 (1981).
- [17] Y. Ajiro, T. Wakisaka, H. Itoh, K. Watanabe, H. Satoh, Y. Inagaki, T. Asano, M. Mito, K. Takeda, H. Mitamura et T. Goto, *Physica B* **329-333**, 1004 (2003).
- [18] K. Hida, *J. Phys. Soc. Japan* **72**, 2627 (2003).
- [19] Y.-C. Lin, H. Rieger et F. Iglói, *J. Phys. Soc. Japan* **73**, 1602 (2004).
- [20] M. A. Continentino, J. C. Fernandes, R. B. Guimaraes, B. Boechat, H. A. Borges, J. V. Valarelli, E. Haanappel, A. Lacerda et P. R. J. Silva, *Phil. Mag. B* **73**, 601 (1996).
- [21] Y. Endoh, G. Shirane, R. J. Birgeneau et Y. Ajiro, *Phys. Rev. B* **19**, 1476 (1979).
- [22] G. Theodorou, *Phys. Rev. B* **16**, 2264 (1977).
- [23] C. A. Doty et D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **45**, 2167 (1992).

- [24] T. Masuda, A. Zheludev, K. Uchinokura, J.-H. Chung et S. Park, preprint cond-mat/0404688 (2004).
- [25] K. Damle, O. Motrunich et D. A. Huse, Phys. Rev. Lett. **84**, 3434 (2000).
- [26] T. N. Nguyen, P. A. Lee et H. C. zur Loye, Science **271**, 489 (1996).
- [27] A. Furusaki, M. Sigrist, P. A. Lee, K. Tanaka et N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **73**, 2622 (1994).
- [28] A. Furusaki, M. Sigrist et E. W. P. A. Lee, Phys. Rev. B **52**, 15930 (1995).
- [29] J. W. Bray, H. R. Hart, Jr., L. V. Interrante, I. S. Jacobs, J. S. Kasper, G. D. Watkins, S. H. Wee et J. C. Bonner, Phys. Rev. Lett. **35**, 744 (1975).
- [30] K. Uchinokura, J. Phys. Cond. Matt. **14**, R195 (2002).
- [31] J. P. Pouget, L. P. Regnault, M. Ain, B. Hennion, J. P. Renard, P. Veillet, G. Dhahlenne et A. Revcolevschi, Phys. Rev. Lett. **72**, 4037 (1994).
- [32] J. P. Schoeffel, J. P. Pouget, G. Dhahlenne et A. Revcolevschi, Phys. Rev. B **53**, 14971 (1996).
- [33] W. Geertsama et D. Khomskii, Phys. Rev. B **54**, 3011 (1996).
- [34] M. Nishi, O. Fujita et J. Akimitsu, Phys. Rev. B **50**, 6508 (1994).
- [35] L.-P. Regnault, M. Aïn, B. Hennion, G. Dhahlenne et A. Revcolevschi, Phys. Rev. B **53**, 5579 (1996).
- [36] J. E. Lorenzo, K. Hirota, G. Shirane et J. M. Tranquada, Phys. Rev. B **50**, 1278 (1994).
- [37] H. Hori, M. Furusawa, T. Takeuchi, S. Sugai, K. Kindo et A. Yamagishi, J. Phys. Soc. Japan **63**, 18 (1994).
- [38] J. Riera et A. Dobry, Phys. Rev. B **51**, 16098 (1995).
- [39] G. Castilla, S. Chakravarty et V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **75**, 1823 (1995).
- [40] M. Hase, I. Terasaki, Y. Sasago et K. Uchinokura, Phys. Rev. Lett. **71**, 4059 (1993).
- [41] Y. Sasago, N. Koide, K. Uchinokura, M. C. Martin, M. Hase, K. Hirota et G. Shirane, Phys. Rev. B **54**(R), 6835 (1996).
- [42] M. C. Martin, M. Hase, K. Hirota, G. Shirane, Y. Sasago, N. Koide et K. Uchinokura, Phys. Rev. B **56**, 3173 (1997).
- [43] K. Manabe, H. Ishimoto, N. Koide, Y. Sasago et K. Uchinokura, Phys. Rev. B **58**(R), 575 (1998).
- [44] B. Grenier, J.-P. Renard, P. Veillet, C. Paulsen, R. Calemczuk, G. Dhahlenne et A. Revcolevschi, Phys. Rev. B **57**, 3444 (1998).
- [45] T. Masuda, A. Fujioka, Y. Uchiyama, I. Tsukada et K. U. kura, Phys. Rev. Lett. **80**, 4566 (1998).
- [46] T. Masuda, *Study of Impurity Effects in Quantum Spin Systems with a Spin Gap*, Thèse de doctorat, Department of Applied Physics, University of Tokyo (2001).
- [47] T. Masuda, D. Yano, R. Kuroda, K. Uchinokura, H. Kuroe, T. Sekine, Y. Katsuki, K. Ohwada, Y. Fujii, H. Nakao et Y. Murakami, Phys. Rev. B **67**, 024423 (2003).

- [48] Y. Tanokura, Y. Oono, S. Ikeda, H. Kuroe, T. Sekine, T. Masuda et K. Uchinokura, *Phys. Rev. B* **68**, 054412 (2003).
- [49] B. Grenier, P. Monod, M. Hagiwara, M. Matsuda, K. Katsumata, S. Clément, J.-P. Renard, A. L. Barra, G. Dhalenne et A. Revcolevschi, *Phys. Rev. B* **65**, 094425 (2002).
- [50] B. Grenier, J.-P. Renard, P. Veillet, C. Paulsen, G. Dhalenne et A. Revcolevschi, *Phys. Rev. B* **58**, 8202 (1998).
- [51] T. Kennedy, *J. Phys. Cond. Matt.* **2**, 5737 (1990).
- [52] E. Polizzi, F. Mila et E. S. Sørensen, *Phys. Rev. B* **58**, 2407 (1998).
- [53] S. H. Glarum, S. Geschwind, K. M. Lee, M. L. Kaplan et J. Mice, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1614 (1991).
- [54] F. Tedoldi, R. Santachiara et M. Horvatic, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 412 (1999).
- [55] F. Alet et E. S. Sørensen, *Phys. Rev. B* **62**, 14116 (2000).
- [56] J. Das, A. V. Mahajan, J. Bobroff, H. Alloul, F. Alet et E. S. Sørensen, *Phys. Rev. B* **69**, 144404 (2004).
- [57] J. Bobroff, *Impuretés et systèmes corrélés*, Thèse d'habilitation à diriger les recherches, Université Paris-Sud, Orsay (2004).
- [58] C. Payen, E. Janod, K. Schoumacker, C. D. Batista, K. Hallberg et A. A. Aligia, *Phys. Rev. B* **62**, 2998 (2000).
- [59] Y. Uchiyama, Y. Sasago, I. Tsukada, K. Uchinokura, A. Zheludev, T. Hayashi, N. Miura et P. Boni, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 632 (1999).
- [60] F. Alet, *Étude numérique de systèmes magnétiques et supraconducteurs*, Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse (2002).
- [61] S. Imai, T. Masuda, T. Matsuoka et K. Uchinokura, preprint cond-mat/0402595 (2004).
- [62] M. Azuma, Y. Fujishiro, M. Takano, M. Nohara et H. Takagi, *Phys. Rev. B* **55(R)**, 8658 (1997).
- [63] S. Ohsugi, Y. Tokunaga, K. Ishida, T. Kitaoka, M. Azuma, Y. Fujishiro et M. Takano, *Phys. Rev. B* **60**, 4181 (1999).
- [64] N. Fujiwara, T. Saito, T. Kitaoka, M. Azuma et M. Takano, *Phys. Rev. B* **61**, 12196 (2000).
- [65] T. Nikuni, M. Oshikawa, A. Oosawa et H. Tanaka, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5868 (2000).
- [66] M. Matsumoto, B. Normand, T. M. Rice et M. Sigrist, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 077203 (2002).
- [67] A. Oosawa, T. Ono et H. Tanaka, *Phys. Rev. B* **66**, 020405 (2002).
- [68] A. Oosawa, M. Fujisawa, K. Kakurai et H. Tanaka, *Phys. Rev. B* **67**, 184424 (2003).
- [69] H. Deguchi, S. Sumoto, S. Takagi, M. Mito, T. Kawae, K. Takeda, H. Nojiri, T. Sakon et M. Motokawa, *J. Phys. Soc. Japan* **67**, 3707 (1998).
- [70] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. London A* **276**, 238 (1963).
- [71] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).

- [72] S. Todo et K. Kato, Phys. Rev. Lett. **87**, 047203 (2001).
- [73] P. W. Anderson, Phys. Rev. **86**, 694 (1952).
- [74] P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*, World Scientific (1999).
- [75] N. D. Mermin et H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [76] C. Zeng et V. Elser, Phys. Rev. B **42**, 8436 (1990).
- [77] B. S. Shastry et B. Sutherland, Physica B **108**, 1069 (1981).
- [78] G. Misguich et C. Lhuillier, “Two-dimensional quantum antiferromagnets”, dans *Frustrated spin systems* (H. T. Diep, éd.), World Scientific (2003).
- [79] B. Bernu, P. Lecheminant, C. Lhuillier et L. Pierre, Phys. Rev. B **50**, 10048 (1994).
- [80] H. Bethe, Z. Phys. **71**, 205 (1931).
- [81] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, New York (1982).
- [82] C. N. Yang et C. P. Yang, Phys. Rev. **150**, 321 (1966).
- [83] C. N. Yang et C. P. Yang, Phys. Rev. **150**, 327 (1966).
- [84] M. Gaudin, *La fonction d’onde de Bethe*, Masson (1983).
- [85] M. Karbach et G. Muller, Comp. in Phys. **11**, 36 (1997).
- [86] M. Karbach, K. Hu et G. Muller, Comp. in Phys. **12**, 565 (1998).
- [87] C. J. Hamer, J. Phys. A **18**, L1133 (1985).
- [88] F. C. Alcaraz, M. N. Barber et M. T. Batchelor, Phys. Rev. Lett. **58**, 771 (1987).
- [89] J. M. Luttinger, J. Math. Phys. **4**, 1154 (1963).
- [90] P. Jordan et E. Wigner, Z. Phys. **47**, 631 (1928).
- [91] I. Affleck, “Fields theory methods and quantum critical phenomena”, dans *Fields, strings and critical phenomena, Les Houches, Session XLIX, 1988* (E. Brézin et J. Zinn-Justin, éd.), North Holland, Amsterdam (1990).
- [92] H. J. Schulz, G. Cuniberti et P. Pieri, “Fermi liquids and Luttinger liquids”, dans *Field Theories for Low-Dimensional Condensed Matter Systems* (G. M. et al., éd.), Springer-Verlag, New York (2000).
- [93] E. Orignac, *Effets de désordre dans les échelles*, Thèse de doctorat, Université Paris-Sud, Orsay (1998).
- [94] S. Capponi, *Étude théorique des processus interchaînes dans les liquides de Luttinger couplés*, Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse (1999).
- [95] J. V. José, L. P. Kadanoff, S. Kirkpatrick et D. R. Nelson, Phys. Rev. B **16**, 1217 (1977).
- [96] J. M. Kosterlitz et D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
- [97] A. Luther et I. Peschel, Phys. Rev. B **12**, 3908 (1975).
- [98] I. Affleck, D. Gepner, H. J. Schulz et T. Ziman, J. Phys. A **22**, 511 (1989).
- [99] I. Affleck, J. Phys. A **31**, 4573 (1998).

- [100] I. Affleck et P. Simon, Phys. Rev. Lett. **86**, 2854 (2001).
- [101] W. G. van der Wiel, S. D. Franceschi, T. Fujisawa, J. M. Elzerman, S. Tarucha et L. P. Kouwenhoven, Science **289**, 2105 (2000).
- [102] J. Nygard, D. H. Cobden et P. E. Lindelof, Nature **408**, 342 (2000).
- [103] Y. Aharonov et D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).
- [104] D. Loss, Phys. Rev. Lett. **69**, 343 (1992).
- [105] N. Byers et C. N. Yang, Phys. Rev. Lett. **7**, 46 (1961).
- [106] M. Wallin, E. S. Sørensen, S. M. Girvin et A. P. Young, Phys. Rev. B **49**, 12115 (1990).
- [107] B. S. Shastry et B. Sutherland, Phys. Rev. Lett. **65**, 243 (1990).
- [108] N. F. Mott, Adv. Phys. **16**, 49 (1967).
- [109] C. J. Hamer, G. R. W. Quispel et M. T. Batchelor, J. Phys. A **20**, 5677 (1987).
- [110] F. C. Alcaraz, M. N. Barber et M. T. Batchelor, Ann. Phys. (NY) **182**, 280 (1988).
- [111] N. Laflorencie, S. Capponi et E. S. Sørensen, Eur. Phys. J B **24**, 77 (2001).
- [112] C. A. Stafford et A. J. Millis, Phys. Rev. B **48**, 1409 (1993).
- [113] S.-J. Gu, V. M. Pereira et N. M. R. Peres, Phys. Rev. B **66**, 235108 (2002).
- [114] J. L. Cardy, J. Phys. A **19**, L1093 (1986).
- [115] K. Nomura, Phys. Rev. B **48**, 16814 (1993).
- [116] S. Lukyanov, Nucl. Phys. B **522**, 533 (1998).
- [117] D. Loss et D. L. Maslov, Phys. Rev. B **74**, 178 (1995).
- [118] J. L. Cardy, J. Phys. A **17**, L385 (1984).
- [119] I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **56**, 746 (1986).
- [120] D. Augier, *Couplage électron-phonon dans les systèmes fortement corrélés de basse dimensionnalité: application aux composés spin-Peierls*, Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse (1999).
- [121] R. E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, Clarendon, Oxford (1955).
- [122] T. Kennedy et E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett. **59**, 1309 (1987).
- [123] J. Zang, S. Chakravarty et A. R. Bishop, Phys. Rev. B **52**, 6273 (1995).
- [124] J. L. Black et V. J. Emery, Phys. Rev. B **23**, 429 (1981).
- [125] T. Papenbrock, T. Barnes, D. J. Dean, M. V. Stoitsov et M. R. Strayer, Phys. Rev. B **68**, 024416 (2003).
- [126] C. K. Majumdar et D. K. Ghosh, J. Math. Phys. **10**, 1388 (1969).
- [127] A. K. Kolezhuk et H. J. Mikeska, Phys. Rev. Lett. **80**, 2709 (1998).
- [128] C. Gerhardt, K. H. Mutter et H. Kroger, Phys. Rev. B **57**, 11504 (1998).
- [129] K. Okunishi et N. Maeshima, Phys. Rev. B **64**, 212406 (2001).
- [130] B. Normand et F. Mila, Phys. Rev. B **65**, 104411 (2002).
- [131] N. Laflorencie et D. Poilblanc, Phys. Rev. Lett. **90**, 157202 (2003).
- [132] F. Becca, F. Mila et D. Poilblanc, Phys. Rev. Lett. **91**, 067202 (2003).
- [133] C. K. Majumdar et D. K. Ghosh, J. Math. Phys. **10**, 1399 (1969).
- [134] A. Kekule, Bull. Soc. Chim. Fr. **3**, 98 (1865).

- [135] B. S. Shastry et B. Sutherland, Phys. Rev. Lett. **47**, 964 (1981).
- [136] R. Chitra, S. K. Pati, H. R. Krishnamurthy, D. Sen et S. Ramasesha, Phys. Rev. B **52**, 6591 (1995).
- [137] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb et H. Tasaki, Comm. Math. Phys. **115**, 417 (1988).
- [138] S. R. White et I. Affleck, Phys. Rev. B **54**, 9862 (1996).
- [139] K. Okamoto et K. Nomura, Phys. Lett. A **169**, 433 (1992).
- [140] S. Eggert, Phys. Rev. B **54**(R), 9612 (1996).
- [141] R. Julien et F. D. M. Haldane, Bull. Amer. Phys. Soc. **28**, 34 (1983).
- [142] T. Giamarchi et E. Orignac, “Disordered Quantum Solids”, dans *Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons, CRM Series in Mathematical Physics* (D. S. et al., éd.), Springer-Verlag, New York (2003).
- [143] T. Giamarchi et H. J. Schulz, Phys. Rev. B **37**, 325 (1988).
- [144] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [145] I. M. Lifshits, S. A. Gredeskul et L. A. Pastur, *Introduction to the theory of disordered systems*, Wiley and Sons, New York (1988).
- [146] A. Klein et J. F. Perez, Comm. Math. Phys. **128**, 99 (1990).
- [147] K. J. Runge et G. T. Zimanyi, Phys. Rev. B **49**, 15212 (1994).
- [148] L. Urba et A. Rosengren, Phys. Rev. B **67**, 104406 (2003).
- [149] S. Ma, C. Dasgupta et S. Hu, Phys. Rev. Lett. **43**, 1434 (1979).
- [150] C. Dasgupta et S. Ma, Phys. Rev. B **22**, 1305 (1980).
- [151] T. P. Eggarter et R. Riedinger, Phys. Rev. B **18**, 569 (1978).
- [152] R. H. McKenzie, Phys. Rev. Lett. **77**, 4804 (1996).
- [153] J. E. Bunder et R. H. McKenzie, Phys. Rev. B **60**, 344 (1999).
- [154] G. Theodorou et M. H. Cohen, Phys. Rev. B **13**, 4597 (1976).
- [155] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **22**, 5355 (1980).
- [156] R. N. Bhatt et P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **48**, 344 (1982).
- [157] E. Westerberg, A. Furusaki, M. Sigrist et P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **75**, 4302 (1995).
- [158] E. Westerberg, A. Furusaki, M. Sigrist et P. A. Lee, Phys. Rev. B **55**, 12578 (1997).
- [159] C. Monthus, O. Golinelli et T. Jolicoeur, Phys. Rev. Lett. **79**, 3254 (1997).
- [160] K. Yang et R. N. Bhatt, Phys. Rev. Lett. **80**, 4562 (1998).
- [161] C. Monthus, O. Golinelli et T. Jolicoeur, Phys. Rev. B **58**, 805 (1998).
- [162] S. Bergkvist, P. Henelius et A. Rosengren, Phys. Rev. B **66**, 134407 (2002).
- [163] A. Saguia, B. Boechat et M. A. Continentino, Phys. Rev. Lett. **89**, 117202 (2002).
- [164] K. Hida, Phys. Rev. Lett. **83**, 3297 (1999).
- [165] K. Yang et R. A. Hyman, Phys. Rev. Lett. **84**, 2044 (2000).
- [166] K. Hida, Phys. Rev. Lett. **84**, 2045 (2000).

- [167] R. Mélin, Y.-C. Lin, P. Lajkó, H. Rieger et F. Iglói, Phys. Rev. B **65**, 104415 (2002).
- [168] E. Yusuf et K. Yang, Phys. Rev. B **65**, 224428 (2002).
- [169] K. Damle et D. A. Huse, Phys. Rev. Lett. **89**, 277203 (2002).
- [170] G. Refael, S. Kehrein et D. S. Fisher, Phys. Rev. B **66(R)**, 060402 (2002).
- [171] A. Saguia, B. Boechat et M. A. Continentino, Phys. Rev. B **68**, 020403 (2003).
- [172] E. Carlon, P. Lajkó, H. Rieger et F. Iglói, Phys. Rev. B **69**, 144416 (2004).
- [173] E. Yusuf et K. Yang, Phys. Rev. B **68**, 024425 (2003).
- [174] Y.-C. Lin, R. Mélin, H. Rieger et F. Iglói, Phys. Rev. B **68**, 024424 (2003).
- [175] M. den Nijs et K. Rommelse, Phys. Rev. B **40**, 4709 (1989).
- [176] D. S. Fisher, Phys. Rev. Lett. **69**, 534 (1992).
- [177] D. S. Fisher, Phys. Rev. B **51**, 6411 (1995).
- [178] E. Sørensen, I. Affleck, D. Augier et D. Poilblanc, Phys. Rev. B **58**, R14701 (1998).
- [179] S. Dommange, M. Mambrini, B. Normand et F. Mila, Phys. Rev. B **68**, 24416 (2003).
- [180] D. Augier, E. S. Sørensen, J. Riera et D. Poilblanc, Phys. Rev. B **60**, 1075 (1999).
- [181] D. Augier, D. Poilblanc, E. S. Sørensen et I. Affleck, Phys. Rev. B **58**, 9110 (1998).
- [182] D. Augier, J. Riera et D. Poilblanc, Phys. Rev. B **61**, 6741 (2000).
- [183] P. Hansen, D. Augier, J. Riera et D. Poilblanc, Phys. Rev. B **59**, 13557 (1999).
- [184] A. Dobry, P. Hansen, J. Riera, D. Augier et D. Poilblanc, Phys. Rev. B **60**, 4065 (1999).
- [185] R. J. J. Riobóo, M. Garcia-Herandez, I. Prieto, J. E. Lorenzo et L. P. Regnault, Phys. Rev. B **58**, 8574 (1998).
- [186] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
- [187] S. R. White, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [188] C. J. Morningstar et M. Weinstein, Phys. Rev. Lett. **73**, 1873 (1994).
- [189] E. Berg, E. Altman et A. Auerbach, Phys. Rev. Lett. **90**, 147204 (2003).
- [190] S. Capponi et D. Poilblanc, Phys. Rev. B **66(R)**, 180503 (2002).
- [191] S. Capponi, A. Läuchli et M. Mambrini, preprint cond-mat/0404712 (2004).
- [192] N. Laflorencie, D. Poilblanc et M. Sigrist, preprint, cond-mat/0405417 (2004).
- [193] C. Lanczos, J. Res. Natl. Bur. Stand. **45**, 255 (1950).
- [194] D. Poilblanc, “Exact diagonalization methods for models of strongly correlated fermions”, dans *Numerical methods for strongly correlated systems* (D. J. Scalapino, éd.), Frontiers in Physics (1997).
- [195] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
- [196] N. Laflorencie et D. Poilblanc, “Simulation of pure and doped low-dimensional spin- $\frac{1}{2}$ gapped systems”, dans *Lecture Notes in Physics n° 645, Quantum Magnetism* (U. Schollwoeck, J. Richter, D. J. J. Farnell et R. F. Bishop, édés.), Springer (2004).

- [197] A. Läuchli, *Quantum Magnetism and Strongly Correlated Electrons in Low Dimensions*, Thèse de doctorat, Swiss Federal Institute of Technology, Zürich (2002).
- [198] P. Henelius et A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **62**, 1102 (2000).
- [199] V. J. Emery et C. Noguera, Phys. Rev. Lett. **60**, 631 (1988).
- [200] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, N. N. Rosenbluth, A. H. Teller et E. Teller, J. Comp. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [201] *The Monte Carlo Method in the Physical Sciences: Celebrating the 50th Anniversary of the Metropolis Algorithm* (2003).
- [202] A. W. Sandvik, Phys. Rev. E **68**, 056701 (2003).
- [203] H. G. Evertz, preprint cond-mat/9707221 (1997).
- [204] O. F. Syljuåsen et A. W. Sandvik, Phys. Rev. E **66**, 046701 (2002).
- [205] A. W. Sandvik et J. Kurkijärvi, Phys. Rev. B **43**, 5950 (1991).
- [206] A. Dorneich et M. Troyer, Phys. Rev. E **64**, 066701 (2001).
- [207] A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **59(R)**, 14157 (1999).
- [208] J. D. Reger et A. P. Young, Phys. Rev. B **37**, 5978 (1988).
- [209] A. W. sandvik, Phys. Rev. B **56**, 11678 (1997).
- [210] A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **66**, 024418 (2002).
- [211] S. Haas, J. Riera et E. Dagotto, Phys. Rev. B **48**, 13174 (1993).
- [212] P. Henelius et S. M. Girvin, Phys. Rev. B **57**, 11457 (1998).
- [213] F. Igloi, R. Juhász et H. Rieger, Phys. Rev. B **61**, 11552 (2000).
- [214] A. P. Young et H. Rieger, Phys. Rev. B **53**, 8486 (1996).
- [215] T. Hikihara, A. Furusaki et M. Sigrist, Phys. Rev. B **66**, 12116 (1999).
- [216] S. Todo, K. Kato et H. Takayama, “Quantum Monte Carlo Study of Random Antiferromagnetic Heisenberg Chain”, dans *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics XI*, page 57, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (1999).
- [217] K. Hamacher, J. Stolze et W. Wenzel, Phys. Rev. Lett. **89**, 127202 (2002).
- [218] N. Laflorencie et H. Rieger, Phys. Rev. Lett. **91**, 229701 (2003).
- [219] N. Laflorencie, H. Rieger, A. W. Sandvik et P. Henelius, preprint cond-mat/0312572, Phys. Rev. B **70**, 0544xx (2004).
- [220] E. H. Lieb, H. J. Schulz et D. Mattis, Ann. Phys. (NY) **16**, 407 (1961).
- [221] B. M. McCoy, Phys. Rev. **173**, 531 (1968).
- [222] S. Fujimoto et N. Kawakami, Phys. Rev. B **54(R)**, 11018 (1996).
- [223] S. Eggert et I. Affleck, Phys. Rev. B **46**, 10866 (1992).
- [224] C. L. Kane et M. P. A. Fisher, Phys. Rev. Lett. **68**, 1220 (1992).
- [225] T. M. R. Byrnes, R. J. Bursill, H. P. Eckerle, C. J. Hamer et A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **66**, 195313 (2002).
- [226] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello et T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [227] T. Giamarchi et B. S. Shastry, Phys. Rev. B **51**, 10915 (1995).

- [228] N. Laflorencie et H. Rieger, preprint cond-mat/0402198, Eur. Phys. J B, **XX**, xxx (2004).
- [229] R. T. Scalettar, G. G. Batrouni et G. T. Zimanyi, Phys. Rev. Lett. **66**, 3144 (1991).
- [230] G. Bouzerar, D. Poilblanc et G. Montambaux, Phys. Rev. B **49**, 8258 (1994).
- [231] P. Schmitteckert, T. Schulze, C. Schuster, P. Schwab et U. Eckern, Phys. Rev. Lett. **80**, 560 (1998).
- [232] F. Schütz, M. Kollar et P. Kopietz, Phys. Rev. Lett. **91**, 017205 (2003).
- [233] H. J. Schulz, Phys. Rev. Lett. **77**, 2790 (1996).
- [234] M. Fabrizio, A. O. Gogolin et A. A. Nersesyan, Nucl. Phys. B **580**, 547 (2000).
- [235] D. J. Thouless, Proc. Roy. Soc. London **86**, 893 (1965).
- [236] G. Misguich, B. Bernu, C. Lhuillier et C. Waldtmann, Phys. Rev. Lett. **81**, 1098 (1998).
- [237] R. Coldea, S. M. Hayden, G. Aeppli, T. G. Perring, C. D. Frost, T. E. Mason, S.-W. Cheong et Z. Fisk, Phys. Rev. Lett. **86**, 5377 (2001).
- [238] A. A. Katanin et A. P. Kampf, Phys. Rev. B **66(R)**, 100403 (2002).
- [239] M. Matsuda, K. Katsumata, R. S. Eccleston, S. Brehmer et H.-J. Mikeska, Phys. Rev. B **62**, 8903 (2000).
- [240] A. Läuchli, G. Schmid et M. Troyer, Phys. Rev. B **67(R)**, 100409 (2003).
- [241] T. Hikihara, T. Momoi et X. Hu, Phys. Rev. Lett. **90**, 087204 (2003).
- [242] C. J. Calzado, C. de Graaf, E. Bordas, R. Caballoand et J.-P. Malrieu, Phys. Rev. B **67**, 132409 (2003).
- [243] V. Gritsev, B. Normand et D. Baeriswyl, Phys. Rev. B **69**, 094431 (2004).
- [244] C. J. Calzado et J.-P. Malrieu, Phys. Rev. B **69**, 094435 (2004).
- [245] T. M. R. Byrnes, M. T. Murphy et O. P. Sushkov, Phys. Rev. B **60**, 4057 (1999).
- [246] I. Affleck, “Soliton Confinement and the Excitation Spectrum of Spin-Peierls Antiferromagnets”, dans *Dynamical Properties of Unconventional Magnetic Systems* (A. T. Skjeltorp et D. Sherrington, éd.), Kluwer Academic, Dordrecht (1998).
- [247] M. Matsumoto, C. Yasuda, S. Todo et H. Takayama, Phys. Rev. B **65**, 014407 (2002).
- [248] T. Nakamura, Phys. Rev. B **59(R)**, 6589 (1999).
- [249] N. Laflorencie et D. Poilblanc, Physica B **346-347**, 6 (2004).
- [250] M. Sigrist et A. Furusaki, J. Phys. Soc. Japan **65**, 2385 (1996).
- [251] M. Fabrizio, R. Mélin et J. Souletie, Eur. Phys. J B **10**, 607 (1999).
- [252] C. Yasuda, S. Todo, M. Matsumoto et H. Takayama, Phys. Rev. B **64**, 092405 (2001).
- [253] S. Wessel, B. Normand, M. Sigrist et S. Haas, Phys. Rev. Lett. **86**, 1086 (2001).
- [254] M. Fabrizio et R. Mélin, Phys. Rev. Lett. **78**, 3392 (1997).
- [255] M. Fabrizio et R. Mélin, Phys. Rev. B **56**, 5996 (1997).

- [256] A. Joshi et K. Yang, Phys. Rev. B **67**, 174403 (2003).
- [257] M. Mostovoy, D. Khomskii et J. Knoester, Phys. Rev. B **58**, 8190 (1998).
- [258] N. Nagaosa, A. Furusaki, M. Sigrist et H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Japan **65**, 3724 (1996).
- [259] N. Laflorencie, D. Poilblanc et A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **69**, 212412 (2004).
- [260] D. J. Scalapino, Y. Imry et P. Pincus, Phys. Rev. B **11**, 2042 (1975).
- [261] C. Yasuda, S. Todo, K. Hukushima, F. Alet, M. Keller, M. Troyer et H. Takayama, preprint cond-mat/0312392 (2003).
- [262] A. W. Sandvik, E. Dagotto et D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **56**, 11701 (1997).
- [263] H. J. Mikeska, U. Neugebauer et U. Schollwöck, Phys. Rev. B **55**, 2955 (1997).
- [264] T. Miyazaki, M. Troyer, M. Ogata, K. Ueda et D. Yoshioka, J. Phys. Soc. Japan **66**, 2580 (1998).
- [265] A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, A. M. Tsvelik et L. Yu, Nucl. Phys. B **540**, 705 (1999).
- [266] E. Yusuf et K. Yang, Phys. Rev. B **67**, 144409 (2003).
- [267] V. Villar, R. Mélin, C. Paulsen, J. Souletie, E. Janod et C. Payen, Eur. Phys. J B **25**, 39 (2002).
- [268] C. Timm, J. Phys. Cond. Matt. **15**, R1865 (2003).
- [269] B. Frischmut et M. Sigrist, Phys. Rev. Lett. **79**, 147 (1997).
- [270] B. Frischmut, M. Sigrist, B. Ammon et M. Troyer, Phys. Rev. B **60**, 3388 (1999).

Publications présentées

Articles réguliers

- 1) N. Laflorencie, S. Capponi et E. Sørensen,
Finite size scaling of the spin stiffness of the antiferromagnetic quantum $s = \frac{1}{2}$ XXZ chain
Eur. Phys. J. B **24**, 77 (2001).
- 2) N. Laflorencie et D. Poilblanc,
Doped coupled frustrated spin- $\frac{1}{2}$ chains with four-spin exchange
Phys. Rev. Lett. **90**, 157202 (2003).
- 3) N. Laflorencie et H. Rieger,
Comment on “Disorder induced quantum phase transition in random-exchange spin- $\frac{1}{2}$ chains”
Phys. Rev. Lett. **91**, 229701 (2003).
- 4) N. Laflorencie, D. Poilblanc and A. W. Sandvik,
Magnetic ordering in a doped frustrated spin-Peierls system
Phys. Rev. B **69**, 212412 (2004).
- 5) N. Laflorencie, H. Rieger, A. W. Sandvik et P. Henelius,
Crossover effects in the random exchange spin- $\frac{1}{2}$ antiferromagnetic chain
Phys. Rev. B **70**, 0544xx (2004).
- 6) N. Laflorencie et H. Rieger,
Scaling of the spin stiffness in random spin-1/2 chains: Crossover from pure-metallic behaviour to random singlet-localized regime
Eur. Phys. J. B **40**, xxx (2004).
- 7) N. Laflorencie, D. Poilblanc et M. Sgrist,
Critical properties of doped coupled spin-Peierls chains
Preprint cond-mat/0405417.

Participation à des ouvrages

- 8) N. Laflorencie et D. Poilblanc,
Simulation of pure and doped low-dimensional spin- $\frac{1}{2}$ gapped systems,
in Lecture Notes in Physics n° 645, Quantum Magnetism, Springer (2004).

Annales de conférences

- 9) N. Laflorencie et D. Poilblanc,
Magnetic ordering in doped coupled frustrated quantum spin- $\frac{1}{2}$ chains with 4-spin exchange
Physica B **346-347**, 6 (2004). Compte-rendu pour la conférence *7th International Symposium of Research in High Magnetic Fields, July 20-23, 2003 Toulouse, France.*
- 10) N. Laflorencie, D. Poilblanc et A. W. Sandvik,
Antiferromagnetism in coupled spin-Peierls chains induced by non-magnetic dopant,
à paraître dans *J. Phys. Cond. Matt.* (2004). Compte-rendu pour la conférence *Highly Frustrated Magnetism 2003 Conference, August 26-30, 2003 Grenoble, France.*

Morris Zapp réfléchit. Ne désespérez pas, Percy. Je vais vous dire ce que vous devriez faire : venez au prochain congrès de la M.L.A. Tous les fanas de congrès se retrouvent fatalement au M.L.A.

- Quand est-ce ?

- En décembre. A New York.

- Doux Jésus, se lamente le jeune homme. Il faut que j'attende jusque-là ?

D. Lodge (Small world, 1984)

Influence des impuretés et du désordre dans des systèmes magnétiques de basse dimensionnalité

Dans les systèmes fortement corrélés, tels que les oxydes de cuivre, la compétition entre les fluctuations quantiques et le désordre peut donner lieu à une nouvelle physique, non triviale. Afin d'appréhender correctement la spécificité des effets liés aux impuretés et au désordre dans certains systèmes magnétiques de basse dimensionnalité, l'utilisation des techniques numériques est au cœur de ce travail de thèse.

Tout d'abord, nous verrons que la physique des chaînes antiferromagnétiques de spin- $\frac{1}{2}$ avec des couplages aléatoires est, pour les systèmes de taille finie, contrôlée par un *crossover* entre une ligne critique de points fixes *purs* et un point fixe qualifié de *désordre infini*. De plus, une analogie directe avec le problème de la *localisation* à une dimension est soulevée, grâce à l'émergence d'une seule et unique longueur d'échelle, dépendant du désordre, gouvernant les deux phénomènes. Par ailleurs, l'influence du désordre sur des systèmes ayant un gap de spin sera aussi abordée à travers le problème du dopage en impuretés non magnétiques de chaînes de spin- $\frac{1}{2}$ frustrées couplées, modélisant ainsi le comportement du composé *spin-Peierls* CuGeO₃ dopé. Un hamiltonien effectif de basse énergie, décrivant l'interaction entre les impuretés sous le gap de spin, sera ensuite construit et étudié à l'aide de simulations *Monte Carlo quantique SSE* afin d'appréhender la mise en ordre antiferromagnétique induite par le dopage. La suite du travail sera dédiée à l'étude du comportement inattendu de la susceptibilité magnétique à basse température à l'aide d'une méthode de *renormalisation des couplages dans l'espace réel*. Le comportement critique de ce système quasi-unidimensionnel sera aussi comparé aux classes d'universalités connues dans les systèmes magnétiques soumis au désordre.

Keywords: *Disorder, spin- $\frac{1}{2}$ chains, spin-Peierls, CuGeO₃, impurities, simulations.*

Impurities and disorder effects in low dimensional magnets

In strongly correlated systems, such as copper oxydes, the interplay between quantum fluctuations and disorder can give rise to a non trivial new physics. In order to achieve a good understanding of the peculiarity of impurities and disorder effects in low dimensional magnets, numerical tools have been intensively used during this PhD thesis.

First, we will see that the behavior of finite size antiferromagnetic spin chains with bond randomness is controlled by a *crossover* between a critical line of *pure* fixed points and an *infinite randomness* fixed point. Interestingly enough, a direct analogy with *localization* in one dimension will be discussed through the existence of only one relevant disorder dependent length scale which governs both phenomenon. In addition, we also deal with disorder effects in spin gapped systems through the problem of doping coupled frustrated spin- $\frac{1}{2}$ chains with non magnetic impurities, in order to describe the properties of the *spin-Peierls* compound CuGeO₃ under doping. An effective low energy hamiltonian, which describes the interaction between impurities under the spin gap, is derived and studied with *SSE quantum Monte Carlo simulations* in order to investigate the impurity-induced antiferromagnetic ordering mechanism. The rest of the work is devoted to the unexpected behavior of the low temperature magnetic susceptibility which is understood with a *real space renormalization group* approach. Critical properties of this quasi-one dimensional system will be compared with previously known random magnets universality classes.