

THESE

présentée par

Pascal ROOS

pour obtenir le titre de

DOCTEUR de L'UNIVERSITE JOSEPH FOURIER-GRENOBLE 1

(arrêtés ministériels du 5 Juillet 1984 et du 30 Mars 1992)

(Spécialité: **Physique**)

EFFETS DE PARITE DANS LES CHAÎNES DE SPINS ANTIFERROMAGNETIQUES

Soutenue le 21 Février 1997

Composition du jury:

Président:	E. Belorizky
Rapporteurs:	F. Mila D. Loss
Examineurs:	J. P. Renard R. Ballou B. Barbara

**Thèse préparée au sein du laboratoire de magnétisme Louis Néel
C.N.R.S. - Grenoble**

A ma famille de coeur
Pour Myriam

"Soyons réalistes, exigeons l'impossible"
Che Guevara

Remerciements

 reton perdu dans un océan de montagnes, commence enfin pour moi le départ vers de nouveaux horizons. Le chemin m'amenant jusqu'ici aujourd'hui fut souvent éprouvant et difficile, mais la chance de connaître et de rencontrer des gens merveilleux fait de ce parcours un oubli du passé.

Mon premier contact avec le milieu de la Recherche a débuté au Laboratoire de Magnétisme Louis Néel du CNRS de Grenoble. Après un bref séjour chez les hommes en vert, j'y suis retourné avec enthousiasme pour y effectuer ma thèse. Je remercie donc deux fois Dominique Givord, directeur à l'époque et directeur actuel, de m'y avoir accueilli chaleureusement.

Je remercie Monsieur Elie Belorizky, Professeur à l'Université de Grenoble I, pour l'honneur qu'il me fait en président le jury de cette thèse. J'exprime tous mes remerciements à Messieurs Daniel Loss, Professeur Docteur à l'Université de Bâle, et Frédéric Mila, Chargé de Recherche au CNRS, d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ce mémoire. Leurs compréhensions, leurs encouragements et leurs précieux conseils me touchent profondément. Je remercie enfin Jean-Pierre Renard, Directeur de Recherche au CNRS, pour l'honneur qu'il me fait en participant au jury de ce travail.

J'exprime mes remerciements à Bernard Barbara pour m'avoir accueilli au sein de son équipe et avoir accepté d'être mon Directeur de Thèse. Sa gentillesse et sa bonne humeur traditionnelle le rendent très sympathique. Sa vision intuitive de la physique me laisse encore sans voix.

Tout un livre de bord ne serait pas suffisant pour exprimer à Rafik Ballou ce que je lui dois. Accepter d'être Co-Directeur en cours de thèse n'est pas chose facile et cette grandeur d'âme témoigne de ses qualités humaines. A compter du début de cet échange fructueux, j'ai pu apprécier et bénéficier de l'étendue de ses connaissances scientifiques. Sa rigueur scientifique

m'a évité bien des écueils et son journal quotidien fut source de distractions. De son futur, il ne fait aucun doute: tiens bon la barre matelot, tu seras capitaine. Gage que ces simples paroles suffisent à t'exprimer toute ma gratitude, mon respect et mes remerciements.

Une grande partie de ce travail n'aurait été possible sans le piratage consenti de zones informatiques aux quatre coins du monde. Je remercie Eddy, Marcio et Luiz pour la tolérance (surtout quand les programmes tournaient) et la gentillesse dont ils ont fait preuve .

Je tiens à remercier et à associer à ce travail l'ensemble du personnel technique et administratif du laboratoire, dont la tâche permanente et la bonne humeur habituelle ont contribué à l'accomplissement de ce mémoire.

Enfin, je désire saluer l'équipe complète, passée et présente, de l' "O.M" dont les joyeux drilles se reconnaîtront et, par extension, l'ensemble des thésards et des gentils permanents du laboratoire.

Table des Matières

INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 : CHAÎNES DE SPINS ANTIFERROMAGNETIQUES: DE L'ANSATZ DE BETHE À LA SOLUTION VBS	3
1.1 Aspects phénoménologiques	3
1.1.1 Matériaux représentatifs.....	4
1.1.1.a Spins 1/2.....	4
1.1.1.b Spins 1.....	8
1.1.1.c Spins $S>1$	11
1.1.2 Propriétés physiques.....	12
1.1.2.a Effets de parité de spin.....	13
1.1.2.b Effets de taille finie.....	17
1.1.3 Diagrammes de phase.....	19
1.1.3.a Spins 1/2.....	19
1.1.3.b Spins 1.....	23
1.2 Approches analytiques	27
1.2.1 Ansatz de Bethe.....	28
1.2.2 Fermions sans spins et bosonisation.....	30
1.2.3 Modèle sigma non linéaire.....	33
1.2.4 Hamiltoniens parents et solution VBS.....	35

1.3	Ordre caché et brisure de symétrie	38
1.3.1	Ordre caché et paramètre d'ordre de corde	38
1.3.2	Brisure de symétrie cachée dans les chaînes de spins	41
1.3.2.a	Phases VBS et de Haldane	41
1.3.2.b	Autres cas	44
-	Conclusion	45

CHAPITRE 2 : EFFETS DE PARITÉ DANS LES CHAÎNES ANTIFERROMAGNÉTIQUES DE SPINS 1/2

		47
2.1	Méthode des torsions et raideur de spin	48
2.2	Chaînes à conditions de bords périodiques	49
2.2.1	Effets de parité dans la susceptibilité longitudinale	50
2.2.2	Raideur de spin sous l'influence d'un déphasage aux bords de chaîne	54
2.2.3	Raideur de spin sous l'influence de champs magnétiques aux bords de chaîne	59
2.3	Chaînes à conditions de bords ouvertes	62
2.3.1	Effets de parité dans la susceptibilité longitudinale	62
2.3.2	Raideur de spin sous l'influence de champs magnétiques aux bords de chaîne	65
2.3.3	Chaîne semi-contrainte	67
2.3.4	Chaîne contrainte	75
-	Conclusion	84

CHAPITRE 3 : EFFETS DE PARITÉ DANS LES CHAÎNES ANTIFERROMAGNÉTIQUES DE SPINS 1

3.1	Chaînes à conditions de bords périodiques	87
3.1.1	Effets de parité dans la susceptibilité longitudinale	88

3.1.2 Raideur de spin sous l'influence d'un déphasage aux bords de chaîne.....	90
3.1.3 Raideur de spin sous l'influence de champs magnétiques aux bords de chaîne.....	92
3.2 Chaînes à conditions de bords ouvertes.....	101
3.2.1 Effets de parité dans la susceptibilité longitudinale.....	102
3.2.2 Raideur de spin sous l'influence de champs magnétiques aux bords de chaîne.....	104
3.2.3 Chaîne semi-contrainte.....	111
3.2.4 Chaîne contrainte.....	118
- Conclusion.....	123
 CONCLUSION.....	 127
 ANNEXE.....	 129
 REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES.....	 133

Introduction

Introduction

La physique des chaînes de spins est un thème actuel de recherche qui a été particulièrement étudié tant au niveau expérimental, numérique que théorique. Ces chaînes constituent en effet des systèmes modèles présentant le gros avantage d'être souvent intégrables. Elles possèdent également des propriétés spécifiques qui, si elles ne s'étendent parfois pas aux systèmes de dimensionnalité supérieure, ont un intérêt propre. Cette dernière décennie, les études se sont portées majoritairement sur la distinction existant entre spins entiers et demi-entiers. Cette distinction a été, en son temps, extrêmement surprenante et contraire à une extrapolation intuitive plutôt hâtive des comportements quantiques vers les comportements classiques déduits des solutions obtenues par l'Ansatz de Bethe. Des manifestations particulières d'effets de parité de taille (nombre de spins pair ou impair dans la chaîne) ont été également observées avant et pendant cette période. Ils ont toutefois été généralement considérés, soit comme éléments de confirmation spécifique d'effets de parité de spin (existence ou non de spins effectifs de bouts de chaînes, fondamental singulet ou triplet selon la parité de taille, etc.), soit plutôt comme effet parasite (dans les calculs numériques notamment) ne présentant pas d'intérêt spécifique d'étude car s'annihilant à la limite thermodynamique.

Avec les performances technologiques actuelles, il est possible d'étudier, avec de plus en plus de finesse, différents aspects des comportements qui émergent quand on fait varier la taille d'un système du nanoscopique vers le macroscopique. Ce passage est analogue au passage des spins quantiques vers les spins classiques. Une étude plus précise des effets de parité de taille sur des chaînes nanoscopiques unidimensionnelles nous a ainsi paru nécessaire et intéressante.

Afin de situer notre travail dans le vaste contexte de la physique des chaînes de spins, nous avons consacré un premier chapitre à des rappels et aperçus concernant cette physique. Nous nous sommes notamment efforcés de souligner les principales distinctions de propriétés issues non seulement des effets de parité de spin mais aussi, des effets de parité de taille antérieurement observés ou prédits.

Nous consacrons les deux autres chapitres de cette thèse à nos études numériques sur les effets de parité de taille dans les chaînes de spins $1/2$ et 1 . Nous avons considéré ces deux valeurs de spin car les effets de parité de taille dépendent également de la parité de spin. Ces études ont été effectuées sur diverses chaînes aussi bien cycliques que ouvertes et soumises à des conditions de bords différentes (périodiques, twistées, libres, avec champs magnétiques transverses de surface, semi-contraintes ou contraintes), pour des formes différentes d'interactions entre spins permettant de sonder les principales phases magnétiques rencontrées dans ces systèmes. Les chaînes de spins $1/2$ sont discutées au chapitre 2, où nous précisons notre principal outil d'investigation des effets de parité de taille: la raideur de spin. Dans la mesure où cette raideur peut prendre plusieurs définitions, nous nous sommes efforcés de considérer celles susceptibles de pouvoir conduire à des mesures physiques. Une partie de ce chapitre est également consacrée aux manifestations des effets de parité de taille dans la susceptibilité longitudinale. Cette grandeur est plus intuitive et sert de sonde comparative. Elle sert également à montrer que si les effets de parité se manifestent au mieux par la raideur de spin, ils ne sont pas limités à cette grandeur. Les chaînes de spins 1 sont discutées au chapitre 3, où nous reprenons en compte les concepts définis au chapitre 2, mais pour des interactions entre spins plus variées.

Chapitre 1

Chaînes de spins antiferromagnétiques: De l'Ansatz de Bethe à la solution VBS

Chapitre 1

Chaînes de spins antiferromagnétiques: De l'Ansatz de Bethe à la solution VBS

Ce chapitre est consacré à quelques rappels concernant le magnétisme des chaînes de spins. Il n'en constitue nullement une présentation complète et encore moins exhaustive, qui de fait était exclue, tant cette physique est féconde en investigations expérimentales et numériques comme dans ses développements théoriques. Quelques aspects phénoménologiques seront abordés en inventoriant des comportements magnétiques spécifiques illustrant les effets fondamentaux de la parité de spin (entier ou demi-entier) et en décrivant des diagrammes de phases magnétiques associés à des modèles d'interactions. Concernant les approches analytiques, nous indiquerons qualitativement certaines des méthodologies ayant aidé à appréhender l'origine physique des différentes phases magnétiques, mais sans entrer concrètement dans la complexité des formulations. Afin que les notions que nous introduirons servent dans les chapitres qui suivront, nous ne discuterons essentiellement que de chaînes de spins $1/2$ et 1 en interactions d'échange antiferromagnétiques mais nous considérerons autant les chaînes finies que les chaînes infinies, en nous appliquant à préciser au mieux les effets liés à la parité du nombre de spins (pair ou impair) dans la chaîne.

1.1 Aspects phénoménologiques

Un des aspects de la physique des chaînes de spins qui a fasciné un grand nombre de physiciens fut la découverte de la phase de désordre quantique de Haldane pour la chaîne de spins 1 en interactions d'échange antiferromagnétiques isotropes entre spins proches voisins,

alors que la solution exacte de Bethe pour une chaîne analogue mais de spins $1/2$ est celle d'une phase critique de quasi-ordre. Un grand nombre d'investigations expérimentales et numériques ont été menées afin de sonder ces phases (et les spectres d'énergie associés). A chacune sont associés des comportements magnétiques spécifiques que nous évoquerons, non sans avoir au préalable fourni des exemples de matériaux où de telles phases sont expérimentalement obtenues. Un ensemble de diverses autres phases magnétiques, souvent inhabituelles, peuvent également être engendrés selon les interactions d'échange entre les spins. Une énumération partielle en sera faite par la description succincte de diagrammes de phase de chaînes de spins $1/2$ et 1 avec différentes formes d'interactions d'échange (essentiellement antiferromagnétiques).

1.1.1 Matériaux représentatifs

1.1.1.a Spins $1/2$

Une réalisation physique de chaîne de spins dans un matériau est obtenue en termes d'assemblées de chaînes indépendantes si les interactions d'échange entre spins de chaînes différentes sont négligeables en comparaison des interactions d'échange entre spins de même chaîne. Un exemple de matériau à chaînes de spins $1/2$ approchant le cas idéal est celui du composé Sr_2CuO_3 dont la structure cristallographique est représentée sur la figure 1.1. Cette structure comporte des chaînes parallèles de quadrilatères oxygène à un sommet commun avec au centre de chaque quadrilatère un ion Cu^{2+} de spin $1/2$ (associé au trou de la configuration externe $3d^9$ de l'ion). Une interaction de superéchange, à chemins Cu-O-Cu à 180° , existe entre spins de deux ions Cu^{2+} consécutifs d'une même chaîne. Cette interaction est antiferromagnétique, sans

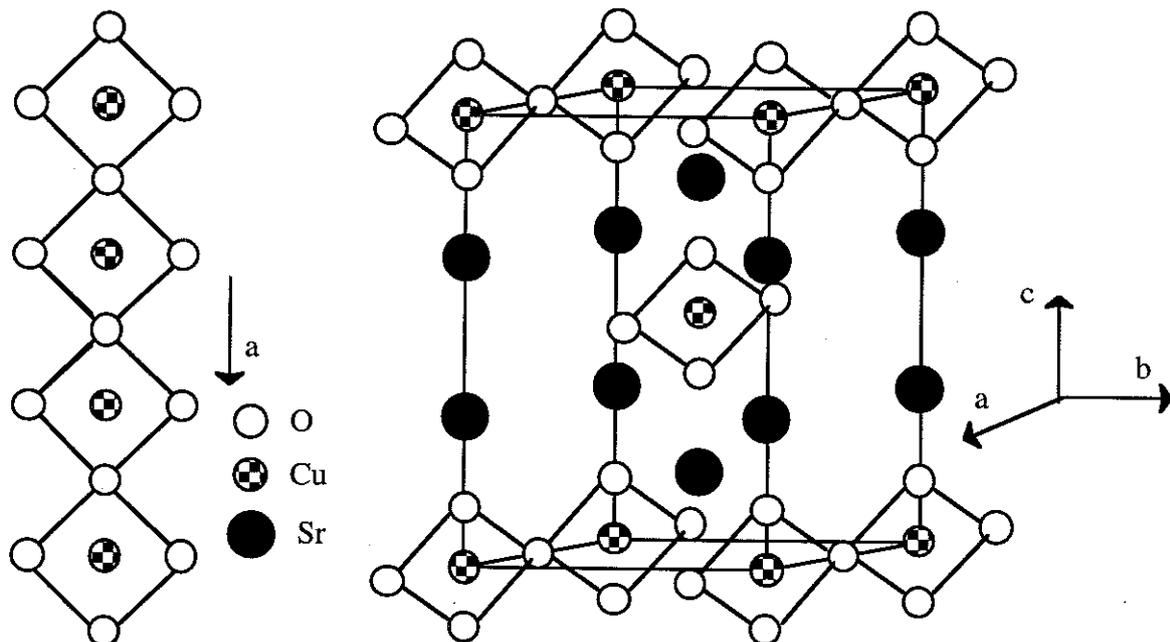


Fig. 1.1: Structure cristallographique du composé Sr_2CuO_3

anisotropie notable (comme le suggère l'isotropie des variations thermiques de susceptibilité magnétique mesurée sur monocristal [Mot 96]) et très forte: elle s'exprime convenablement sous la forme $J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$ avec une énergie d'échange J estimée à 1700 ± 150 K [Egg 96]. Un ordre magnétique tridimensionnel s'établit à une température de Néel T_N de l'ordre de 5K [Ker 93]. On en déduit une énergie d'échange entre spins interchaînes extrêmement faible de l'ordre de $J' = 10^{-5}J$ (estimée dans l'approximation du champ moléculaire, en écrivant que $zJ'\chi(T_N) = 1$ où $\chi(T)$ est la susceptibilité d'une chaîne et z le nombre de chaînes adjacentes).

Sr_2CuO_3 est en conséquence un excellent prototype expérimental du modèle XXX de chaînes de spins $1/2$ (cf. §1.1.3.a), qui a permis de sonder des gammes de températures relatives T/J de l'ordre de 0.01, inaccessibles dans d'autres matériaux. A ces températures, la susceptibilité magnétique mesurée sur monocristal [Mot 96] ne suit pas le comportement extrapolé à partir des calculs numériques effectués sur des chaînes finies par Bonner et Fisher [Bon 64], et pendant longtemps seul considéré. Une décroissance brutale est observée, dont l'amplitude n'est cependant pas suffisante pour être attribuée à une transition de spin-Peierls: une telle transition conduit à une susceptibilité magnétique nulle à température nulle. Cette décroissance avait été annoncée par Eggert et al. [Egg 94], à partir de la solution exacte de Bethe et les méthodes de la théorie des champs à invariance conforme: à basse température, $\chi(T)$ tend vers $\chi(0) \equiv 1/J\pi^2$ ($\equiv 0.10132g^2\mu_B^2/J$) avec une pente $\partial\chi/\partial T$ qui divergerait à l'infini à 0K, si elle n'était pas masquée par l'ordre magnétique tridimensionnel.

Un autre exemple de matériau à chaînes de spins $1/2$ est celui du composé SrCuO_2 dont la structure cristallographique est représentée sur la figure 1.2. On retrouve des quadrilatères CuO_4

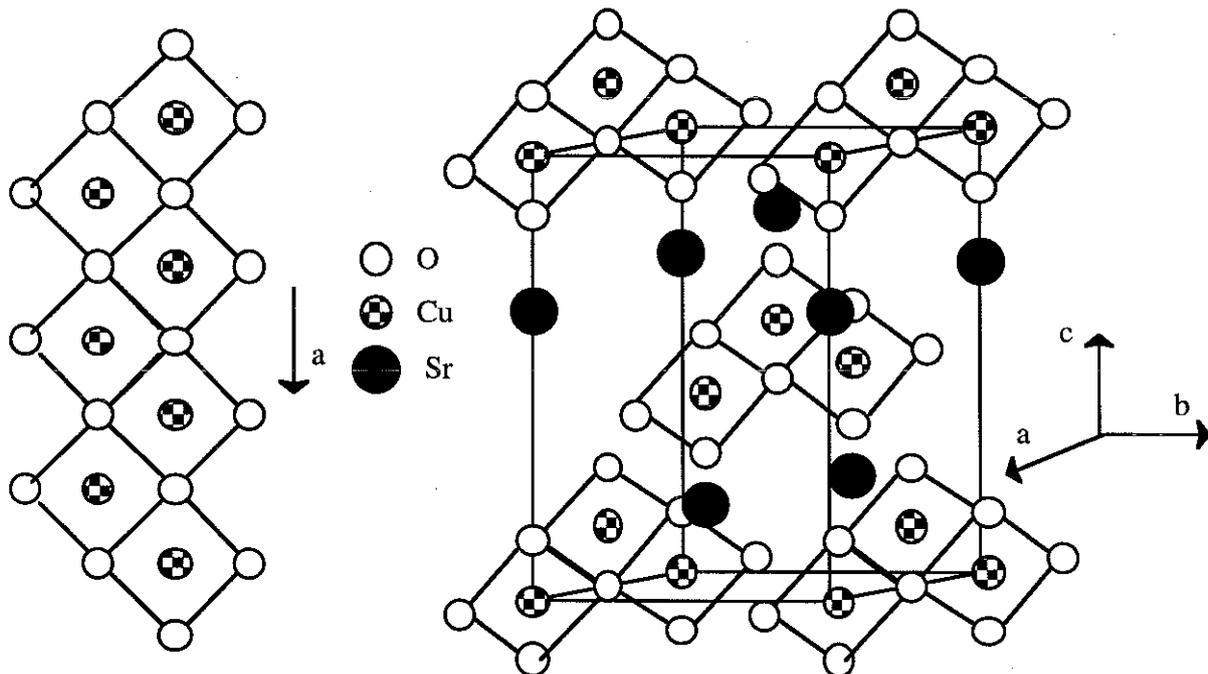


Fig. 1.2: Structure cristallographique du composé SrCuO_2

mais cette fois à un coté commun et en zigzag. Cette conformation est aussi celle des ions Cu^{2+} , mais magnétiquement, elle doit être perçue comme celle de deux chaînes de spins $1/2$ faiblement couplés. En effet, les spins selon la direction diagonale interagissent par une interaction de superéchange émanant de chemins Cu-O-Cu à 90° et éventuellement par une interaction d'échange directe (en raison de la proximité des ions Cu^{2+}) mais ces interactions sont faibles. A ces interactions correspondent en effet une énergie d'échange globale dans la gamme 10^0 - 10^2K , estimée par analogie avec des matériaux où des interactions analogues existent seules tels CuGeO_3 ou MgCu_2O_3 [Mat 95]. Une interaction de superéchange entre spins similaire à celle dans Sr_2CuO_3 existe par contre dans chaque chaîne avec une énergie d'échange estimée à $J=2100\pm 200\text{K}$, à partir de mesures de susceptibilité magnétique sur monocristal [Mot 96]. A basse température, cette susceptibilité magnétique ne présente pas de décroissance brutale comme dans Sr_2CuO_3 , très probablement en raison d'une frustration magnétique associée aux interactions entre spins dans la direction diagonale. Un ordre magnétique tridimensionnel s'établit à une température de Néel T_N de l'ordre de 3K dans ce composé [Mat 95].

A ce stade, nous n'avons pas résisté à la tentation de mentionner pour information la famille plus générale des composés de stoechiométrie $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$, comportant également des quadrilatères CuO_4 mais empilés de sorte à former magnétiquement des chaînes de spins couplées fortement par paquet de n chaînes. Une représentation de cet empilement de quadrilatères pour $n=2$ est reportée sur la figure 1.3. Il en émerge clairement une configuration de chaînes de

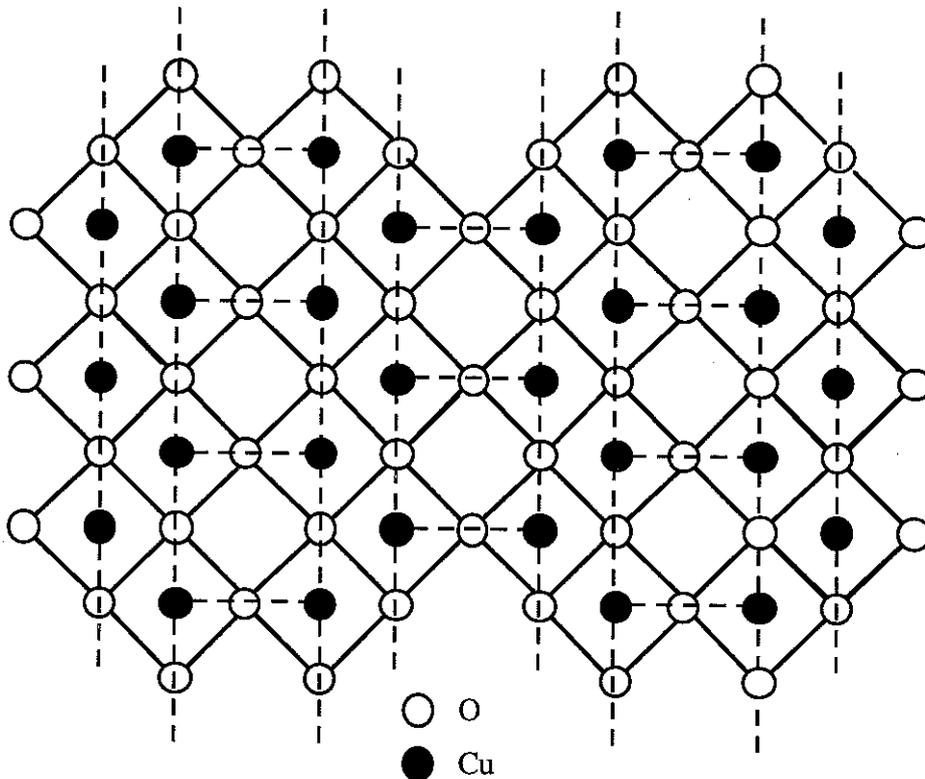


Fig. 1.3: Empilement Cuivre-Oxygène dans le composé SrCu_2O_3

spins 1/2 parallèles groupées par paires, avec des interactions de superéchange entre spins intra- et interchaînes d'une même paire, émanant de chemins Cu-O-Cu à 180° comme pour les interactions entre spins intrachaînes dans Sr₂CuO₃, donc fortes, et des interactions de superéchange entre spins de paires adjacentes, émanant de chemins Cu-O-Cu à 90°, donc faibles. Cette série de composés Sr_{n-1}Cu_{n+1}O_{2n} est extrêmement intéressante au sens où elle constitue un prototype expérimental du passage d'un système unidimensionnel de spins 1/2 à un système bidimensionnel de spins 1/2 [Dag 96]. Un tel passage n'est pas graduel et les comportements magnétiques dépendent fondamentalement de la parité du nombre n de chaînes fortement couplées, avec à priori une phase de désordre quantique pour n pair et une phase de quasi-ordre pour n impair [Khv 94, Sie 96], mais des phases nouvelles ne sont pas exclues. Cette série fait partie des matériaux dont on attend qu'ils constituent de bons candidats pour la supraconductivité à haute température critique [Ric 93].

On mentionnera enfin succinctement le composé Sr₂₄Cu₂₄O₄₁, dont la structure cristallographique est complexe mais peut être schématisée comme étant formée de deux sous-systèmes indépendants: une échelle de spins en tout point similaire à celle dans SrCu₂O₃ et une chaîne de spins dont la figure 1.4 donne une représentation. Une étude par résonance électronique de spin [Mat 96] et une étude par diffusion inélastique de neutrons [Ecc 96] semblent indiquer que cette chaîne est un exemple expérimental de dimérisation de spin spontanée, associée à une compétition entre interactions antiferromagnétiques de spins premiers voisins et de spins seconds voisins (cf. modèle J1-J2 de chaînes de spins 1/2: §1.1.3.a), dont les origines sont attribuées aux chemins de superéchange Cu-O-Cu à 90° et éventuellement à des chemins d'échange Cu-Cu-Cu

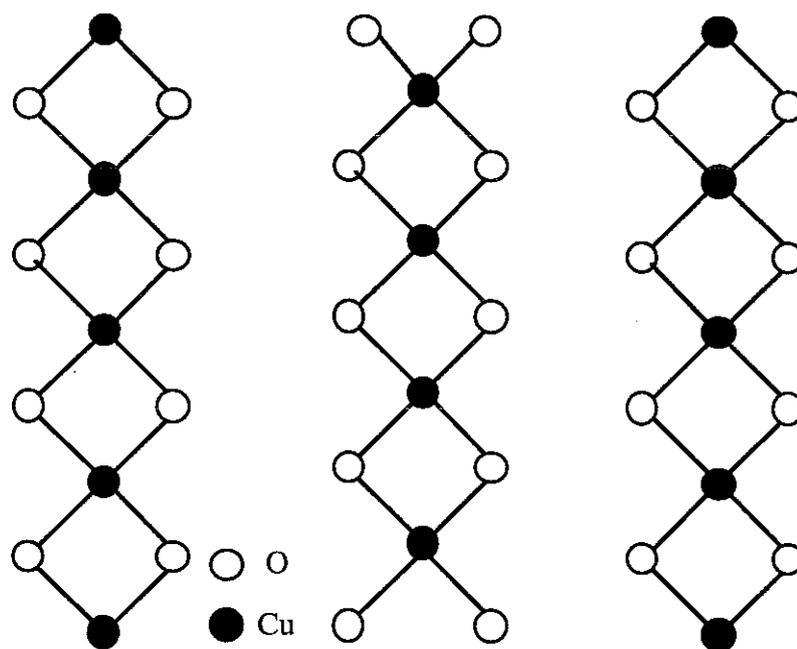


Fig. 1.4: Sous-système de chaînes dans le composé Sr₂₄Cu₂₄O₄₁

directs. Aucune distorsion cristallographique annonçant une transition de spin-Peierls n'est expérimentalement apparente et ni la susceptibilité magnétique ni la chaleur spécifique ne présente d'anomalies caractéristiques d'une telle transition [Mat 96].

Avoir focalisé notre description à des composés à base de strontium, cuivre et oxygène ne signifie évidemment nullement qu'il n'existe pas d'autres matériaux à chaînes de spins 1/2. On ne citera cependant que $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$ et CuGeO_3 pour l'intérêt qu'ils ont suscité. $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$ est le premier composé inorganique dont le magnétisme a été identifié comme étant celui de chaînes de spins 1/2 à interactions alternées indépendantes de la température (cf. §1.1.3.a) [Bon 83]. CuGeO_3 est le premier exemple découvert de composé inorganique à chaîne de spins 1/2 présentant une transition de spin-Peierls. Cette transition se manifeste par une anomalie de chaleur spécifique à la température de transition $T_{\text{SP}}=14\text{K}$ et par une forte décroissance de la susceptibilité magnétique aux températures $T \leq T_{\text{SP}}$: idéalement cette susceptibilité tend vers zéro à température nulle. Une décroissance quadratique de T_{SP} sous champ magnétique appliqué, attendue pour une telle transition, est également observée [Has 93]. Une distorsion cristallographique à $T \leq T_{\text{SP}}$ a été mesurée par diffraction de neutrons confirmant la transition [Hir 94]. Ce composé est un prototype expérimental de chaînes de spins 1/2 combinant interactions d'échange uniformes (associées à des chemins de superéchange Cu-O-Cu à approximativement 90°) étendus aux spins seconds voisins et interactions d'échange directs entre spins de nature magnétoélastique à alternance dépendante de la température [Rie 96].

1.1.1.b Spins 1

Un exemple de matériau à chaînes de spins 1 qui a été très étudié, pour avoir le premier fourni les confirmations les plus significatives de l'existence de la phase de désordre quantique de Haldane, est le composé $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2\text{ClO}_4$ (généralement désigné sous l'abréviation NENP). Une schématisation de sa structure est montrée sur la figure 1.5 où, par souci de lisibilité, nous n'avons pas représenté tous les atomes. Cette structure comporte des chaînes parallèles d'ions $[\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2]^+$ contenant un ion Ni^{2+} en site octaédrique, ponté axialement par des ions nitrito $[\text{NO}_2]^-$ et entouré dans le plan équatorial de deux molécules d'éthanediamine (en abrégé EN). Il résulte de cette structure une chaîne de spins 1 (associés aux deux trous de la configuration externe $3d^8$ de l'ion Ni^{2+}), à anisotropie magnétocristalline locale ($D\sum_i (S_i^z)^2 + E\sum_i \{(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2\}$) et en interactions d'échange antiferromagnétiques (à chemins Ni- NO_2 -Ni) pratiquement isotropes ($J\sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$). Une énergie d'échange $J=48\text{K}$ pour les interactions entre spins intrachânes, une énergie d'anisotropie uniaxiale $D \approx 0.2\text{J}$ (modérément faible) et une énergie d'anisotropie planaire $E \approx 0.015 (\pm 0.005)\text{J}$ (négligeable) ont été déduites des mesures de susceptibilité magnétique sur monocristaux [Ren 87, Ren 88 b]. Ces chaînes d'ions $[\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2]^+$ sont séparées par des contre-ions perchlorate $[\text{ClO}_4]^-$ (non représentés sur

la figure 1-5) qui ont le double rôle d'assurer la neutralité électrique de l'édifice et d'isoler efficacement les chaînes de spins les unes par rapport aux autres en termes d'interactions d'échange: une énergie d'échange aussi faible que $J' \approx 4 \cdot 10^{-4} J$ est attribuée aux interactions entre spins interchaînes [Ren 87, Ren 88 b]. Il n'est pas observé d'ordre magnétique tridimensionnel aux températures aussi basses que 10mK [Ave 92]. Un tel ordre ne devrait pas surgir même à température nulle en raison des fluctuations quantiques, pour des interactions entre spins interchaînes d'énergie inférieure à $J'_c \approx 0.4J(\Delta/J)^2/z$ où z est le nombre de chaînes adjacentes et $\Delta \approx 0.41J$ le gap de Haldane (saut d'énergie entre fondamental et états excités)[Reg 95]. Ceci n'est pas le cas de la phase critique des chaînes de spins 1/2 en interactions antiferromagnétiques isotropes, où la moindre interaction entre spins interchaînes induit un ordre magnétique tridimensionnel.

NENP est en conséquence un excellent prototype expérimental du modèle XXX-D de chaînes de spins 1 à anisotropie locale D modérée (cf. §1.1.3.b), qui a permis des études concises de la phase de désordre quantique. Ce composé était connu antérieurement à la conjecture de Haldane [Hal 83 a, Hal 83 b] et des mesures de susceptibilité magnétique sur monocristaux ont même été effectuées: une décroissance à basse température de cette susceptibilité, caractéristique d'un état singulet collectif de spin isolé en énergie, avait été observée selon les trois axes principaux de la structure cristallographique (orthorhombique) [Mey 82], mais l'interprétation correcte des comportements magnétiques de ce composé, en termes d'ouverture d'un gap dans le spectre des excitations associé à la phase de désordre quantique, a été plus tardive [Ren 87].

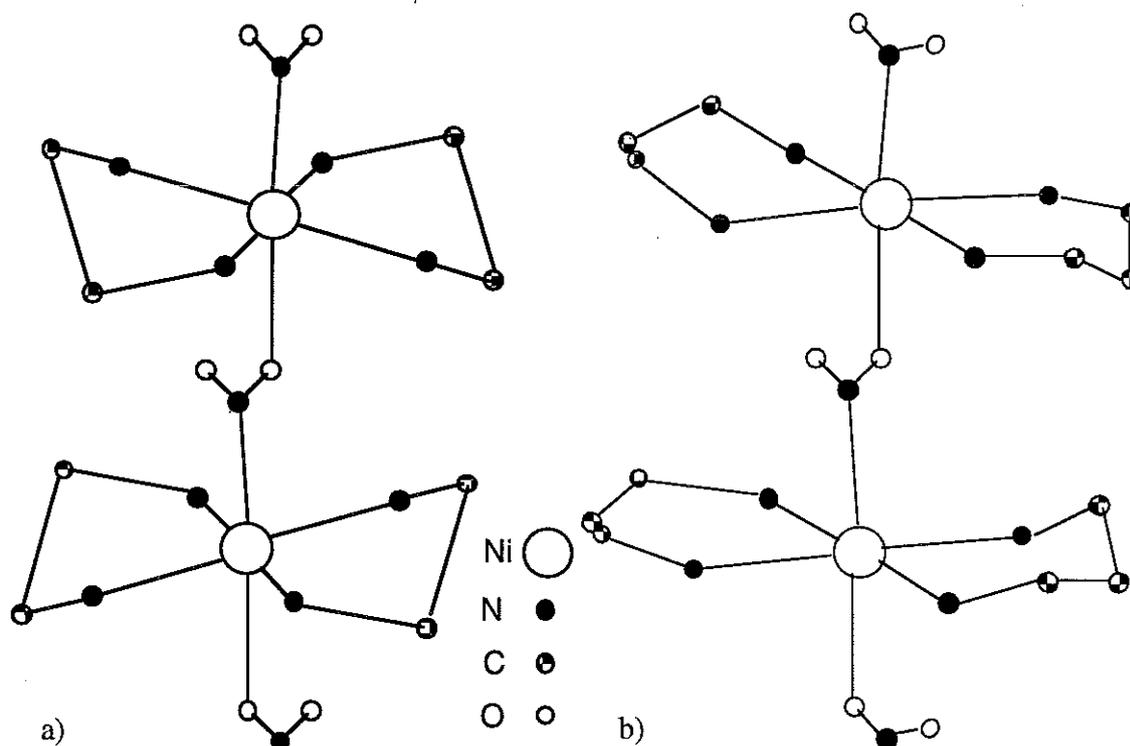


Fig. 1.5: Motifs des empilements en chaînes dans les composés a) NENP b) NINO

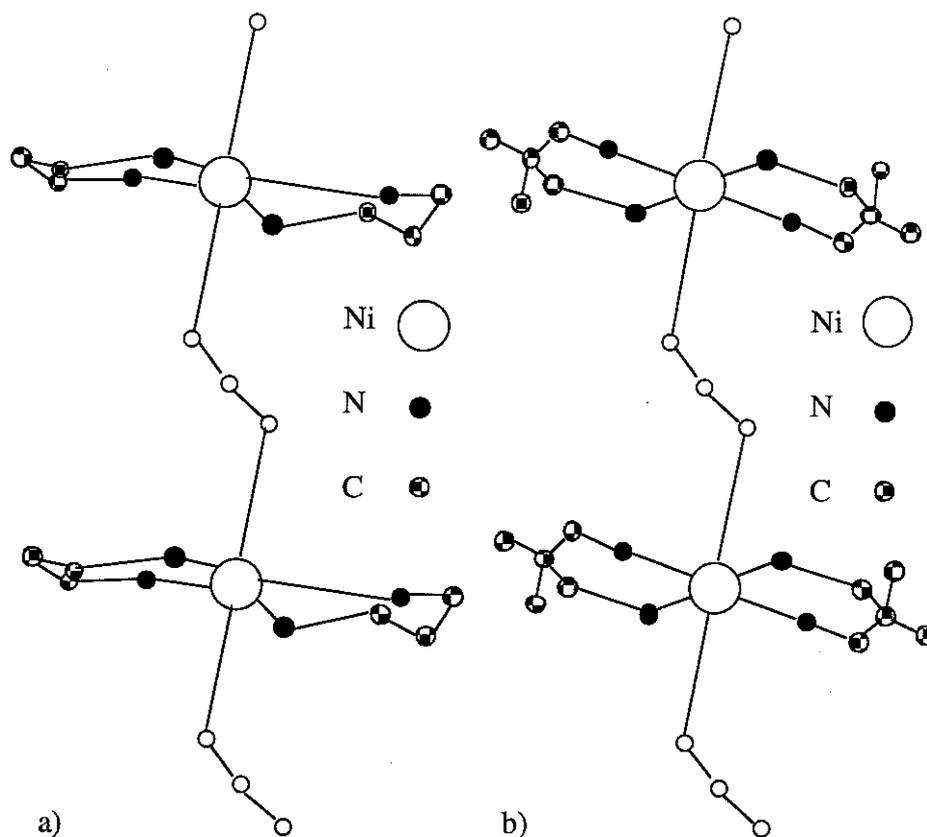


Fig. 1.6: Motifs des empilements en chaînes dans les composés a) NINAZ b) NDMAZ

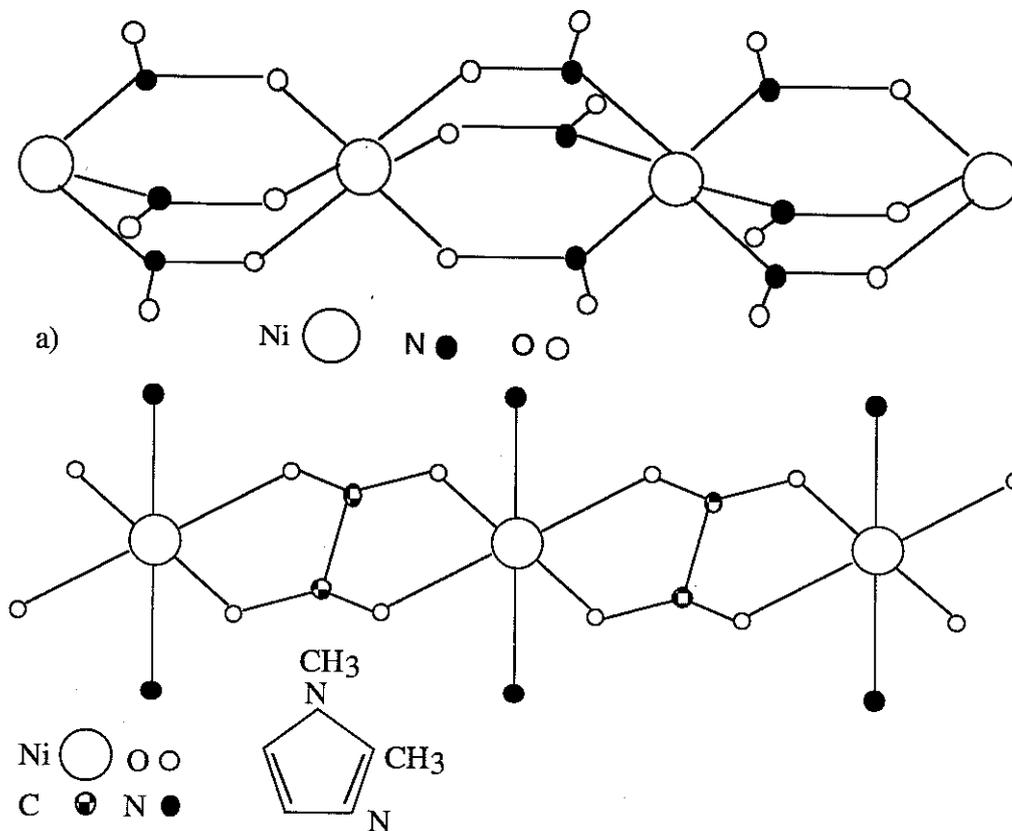


Fig. 1.7: Motifs des empilements en chaînes dans les composés a) TMNIN et b) $\text{NiC}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{DMIZ}$

Aux études sur NENP sont venues s'ajouter des études sur des systèmes parents qui ont une structure proche de NENP, avec des contre-ions perchlorate $[\text{ClO}_4]^-$ jouant le même rôle. On citera le composé $\text{Ni}(\text{C}_3\text{H}_{10}\text{N}_2)_2\text{NO}_2\text{ClO}_4$ (en abrégé NINO) dont la structure est également schématisée sur la figure 1.5 [Tak 92 a] et les composés $\text{Ni}(\text{C}_3\text{H}_{10}\text{N}_2)_2\text{N}_3\text{ClO}_4$ (en abrégé NINAZ) et $\text{Ni}(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{N}_3\text{ClO}_4$ (en abrégé NDMAZ) dont les structures sont schématisées sur la figure 1.6 [Tak 92 b, Tak 95 b]. Il existe évidemment d'autres composés à chaînes de spins 1 constituant autant de prototypes expérimentaux du modèle XXX-D de chaînes de spins 1 à anisotropie locale D mais dont la structure répétitive est totalement différente de NENP. On citera le composé $(\text{CH}_3)_4\text{NNi}(\text{NO}_2)_3$ (en abrégé TMNIN) et le composé plus récent $\text{NiC}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{DMIz}$, dont les structures sont toutes deux schématisées sur la figure 1.7 [Tak 92 b, Kik 95].

Un exemple de matériau à chaînes de spins 1 avec des interactions d'échange entre spins intrachaînes isotropes et une anisotropie magnétocristalline locale négligeable est celui du composé CsNiCl_3 ($J \approx 30\text{K}$ et $D \approx -0.02\text{J}$), mais les interactions entre spins interchaînes dans ce composé sont importantes ($J' \approx 1.7 \cdot 10^{-2}\text{J}$): elles stabilisent un ordre antiferromagnétique tridimensionnel à une température de Néel $T_N = 4.85\text{K}$. Un gap dans le spectre des excitations est néanmoins observé par diffusion de neutrons aux températures supérieures à T_N [Buy 86]. Cette robustesse de la phase de désordre quantique est encore mieux exprimée dans la série de composés L_2BaNiO_5 où L désigne indifféremment soit l'yttrium soit un élément de la série des lanthanides (en fait Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, et Tm). Une phase de désordre quantique est obtenue dans le composé Y_2BaNiO_5 , associée à des chaînes de Ni^{2+} de spin 1 avec des interactions d'échange entre spins intrachaînes isotropes, d'énergie $J \approx 250\text{K}$, et des interactions d'échange entre spins interchaînes faibles n'induisant pas d'ordre magnétique tridimensionnel à basse température. Cette phase subsiste et coexiste avec un ordre magnétique tridimensionnel associé au sous-réseau des atomes L quand celui-ci est un lanthanide [Zhe 96].

1.1.1.c Spins $S > 1$

Une réalisation physique de chaînes de spins $S > 1$ est susceptible d'être obtenue dans un matériau, de manière analogue aux chaînes de spins 1/2 avec les ions Cu^{2+} ou aux chaînes de spins 1 avec les ions Ni^{2+} , en choisissant un autre ion porteur de spin parmi les éléments de la série de transitions 3d. Une stratégie appropriée de synthèse suppose cependant de considérer avec minutie différents aspects de la chimie des matériaux. Un élément de la série de transitions 3d peut en effet présenter différents états de valence tels que par exemple Cr^{2+} (de configuration électronique externe $3d^4$) ou Cr^{3+} (de configuration électronique externe $3d^3$). Il importe également de savoir prendre qualitativement en compte des effets des champs de ligands et de la symétrie cristalline locale associée. Avec des électrons externes 3d ces effets sont forts et

invalident parfois les règles de Hund associées aux seules corrélations électroniques coulombiennes. A ces critères s'ajoute enfin la nécessité de prendre en considération différentes caractéristiques qualitatives des mécanismes des interactions d'échange (orthogonalités et recouvrements de fonctions d'onde, angles des chemins d'échange, mécanismes directs ou de superéchange, etc.) à même de conduire à des interactions d'échange entre spins interchaînes négligeables par rapport aux interactions entre spins intrachaînes.

Un certain nombre de matériaux à chaînes de spins $S > 1$ (et fondamental orbital singulet) existent et ont été étudiés. On mentionnera les composés CsVCl_3 [Ito 93, Ito 95] et AgCrP_2S_6 [Pay 90, Mut 93] qui apparaissent comme exemples de prototypes expérimentaux du modèle XXX-D de chaînes de spins $3/2$ à anisotropie locale modérée, ainsi que les composés $(\text{CH}_3)_4\text{NCrCl}_3$ [Bel 91] et CrCl_2 [Har 95] qui semblent être des prototypes expérimentaux du modèle XXX-D de chaînes de spins 2 à anisotropie locale modérée susceptibles de présenter une phase de désordre quantique. Un composé qui a été très étudié est $(\text{CD}_3)_4\text{NMnCl}_3$ (en abrégé TMMC) [Hut 72] comme prototype expérimental par excellence du modèle XX de chaînes de spins $5/2$ à interactions d'échange axialement anisotropes. On se bornera dans nos évocations à ces quelques exemples, afin de ne pas introduire de digressions par trop importantes, mais non sans souligner qu'existent également des matériaux à chaînes alternant dans une même chaîne des spins S de valeurs différentes. Une étude expérimentale approfondie et systématique de ces différents matériaux à chaînes de spins $S > 1$ devrait se révéler extrêmement féconde: ils constituent tout naturellement des systèmes à évolution de comportements magnétiques, en fonction de la valeur croissante du spin S , du quantique vers le classique, dont des investigations sous champ magnétique variable dans le temps devraient laisser émerger une intéressante physique du chaos quantique. A ces chaînes de spins $S > 1$ semblent par ailleurs être associée une plus grande variété de phases magnétiques attachées à des brisures de symétries cachées encore à découvrir, et vraisemblablement de nouveaux effets de parité de spin S , tels que spin entier impair brisant une symétrie cachée $Z_2 \times Z_2$ (symétrie de rotation discrète d'angle π autour des axes x et z) et spin entier pair ne la brisant pas (cf. §1.3)[Osh 92].

1.1.2 Propriétés physiques

Aux phases magnétiques et spectres d'excitations générés dans les chaînes de spins sont généralement associés des comportements magnétiques spécifiques. Ils ont été et continuent à être sondés par différentes méthodes expérimentales et numériques. Ces investigations sont nombreuses et mettent en œuvre des techniques différentes plus ou moins complémentaires, dont les avantages et les inconvénients dépendent subtilement des propriétés physiques étudiées. On ne discutera ici que de quelques manifestations des effets de parité de spin et des effets de taille finie.

1.1.2.a Effets de parité de spin

Un grand intérêt d'études pour les chaînes de spins s'est développé suite à la 'conjecture' de Haldane, proposant une phase de désordre quantique pour les chaînes de spins entiers en interactions d'échange antiferromagnétiques isotropes premiers voisins [Hal 83 a, Hal 83 b]. Cette proposition contrastait alors avec ce qui était connu de la chaîne de spins $1/2$ [And 50, Kub 52, Clo 62, Joh 72, Fad 81]. Affleck et Lieb ont par la suite montré que les chaînes de spins demi-entiers en interactions d'échange antiferromagnétiques isotropes premiers voisins sont en fait à phase critique de quasi-ordre [Aff 86]. Ces phases sont robustes au sens où elles persistent sur des gammes finies d'interactions d'échange entre spins intrachânes anisotropes ou étendues au delà du premier voisin ainsi que sous anisotropie locale magnétocristalline modérée (cf. §1.1.3). On les distingue à la limite thermodynamique des chaînes infinies par la distribution énergétique des excitations et la forme des fonctions de corrélation de spins. Dans la phase de désordre quantique, le niveau fondamental est séparé des premières excitations par un gap en énergie et les fonctions de corrélation de spins sont à décroissance exponentielle avec la distance tandis que dans la phase critique de quasi-ordre le spectre des excitations est sans gap et les fonctions de corrélation de spins sont à décroissance algébrique avec la distance. Ces phases sont, de plus, à état fondamental singulet non dégénéré, ce qui distingue en particulier la phase de désordre quantique des phases d'ordre émanant de brisures de symétrie discrète (qui ont également un gap dans le spectre des excitations et des fonctions de corrélation à courtes portées). Une distinction entre chaînes de spins demi-entiers et chaînes de spins entiers se manifeste également par la nature des excitations élémentaires de basse énergie. Ces excitations sont généralement non linéaires et de nature solitonique tandis que les magnons se situent dans un continuum à haute énergie. Ces solitons possèdent des degrés de liberté internes se traduisant par un spin, qui dans le cas de chaînes de spins demi-entiers est demi-entier et dans le cas de chaînes de spins entiers est entier [Hal 83 a, Hal 83 b, Aff 86]. Une image physique semiclassique des solitons et du spin qu'ils possèdent peut être formulée en termes de parois magnétiques limitées à un spin séparant deux domaines antiferromagnétiques à orientations opposées. Une telle paroi dans le cas de spins $1/2$ a deux états définissant un doublet magnétique et donc un spin $1/2$, tandis que dans le cas de spins 1 , cette paroi se caractérise par trois états définissant un triplet magnétique et donc un spin 1 . Une interprétation admise de la phase de désordre quantique est celle de phase à condensation partielle de solitons de spin zéro dans l'état fondamental [Hal 83 a, Hal 83 b].

Une méthode expérimentale permettant de sonder directement le spectre des excitations et les fonctions de corrélation de spins est la diffusion inélastique de neutrons. Il existe cependant peu d'études antérieures aux années 80 ayant utilisé cette méthode, même dans le cas de chaînes de spins demi-entiers, essentiellement en raison des difficultés à obtenir des composés ne

présentant pas d'ordre magnétique tridimensionnel à suffisamment basse température. On mentionnera comme exemple précurseur le composé TMMC à chaînes de spins 5/2, dans lequel les interactions d'échange entre spins interchaînes ont une énergie $J' \approx 10^{-4}J$ où J est l'énergie des interactions d'échange entre spins intrachaînes [Hut 72]. Grâce cependant aux progrès réalisés dans la synthèse des matériaux, des expériences de diffusion inélastique de neutrons de qualités ont pu ultérieurement être effectuées sur différents composés à chaînes de spins 1/2 [Hei 78, Cow 95] et 3/2 [Ito 93, Ito 95] ou encore 1 [Buy 86, Ren 87]. Une autre méthode expérimentale largement utilisée pour sonder les états de basse énergie est la résonance électronique de spin (ESR) ou des spectroscopies alternatives telles que la résonance magnétique nucléaire (NMR), qui permet de sonder au travers du temps de relaxation spin-réseau la nature magnétique (singulet ou non singulet) des états de basse énergie, ou encore la spectroscopie Muonique. Un certain nombre de comportements spécifiques des fonctions de réponse thermodynamique (susceptibilité magnétique, chaleur spécifique, transition magnétique sous champ appliqué,...) sont enfin observés, distinguant indirectement les différentes phases des chaînes de spins.

Concernant les chaînes de spins demi-entiers, de nombreuses études expérimentales ont été effectuées (par diffusion inélastique et quasi élastique de neutrons, éventuellement polarisés et donc avec analyse de polarisation, ou en neutron spin écho et par les méthodes spectroscopiques de NMR et ESR) sur la distribution en énergie, la dynamique et le spin des modes solitons [End 74, Hei 78, Reg 82, Bou 82, Ben 84, Bou 85, Bou 87, Ten 93, Bou 96, Mis 96, Tak 96]. Ces solitons (encore appelés spinons) ont une impulsion k comprise entre 0 et π/a (où a est la distance entre spins voisins) et, dans le cas des chaînes de spins 1/2 en interactions d'échange $2J \sum_j \{ S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \lambda S_j^z S_{j+1}^z \}$ avec paramètre d'anisotropie $|\lambda| \leq 1$ (cf. §1.1.3.a), une énergie $\varepsilon = J\pi |\sin(k)| (\sin(\gamma)/\gamma)$ où $\gamma = \text{Arccos}(\lambda)$. Créés par paires, ils conduisent à un continuum d'excitation qui s'étend entre une bande spectrale basse $\omega_1 = J\pi |\sin(q)| (\sin(\gamma)/\gamma)$ et une bande spectrale haute $\omega_2 = 2J\pi |\sin(q/2)| (\sin(\gamma)/\gamma)$. Un gap existe quand $|\lambda| > 1$ (cf. §1.1.3.a), auquel cas par application de champs magnétiques perpendiculaires à z , les transitions entre modes solitons mettent en évidence le spin 1/2 du soliton (effet dyon) [Aff 86, Dev 87]. Certaines mesures par diffusion inélastique de neutrons ont également permis, à travers la distribution en q de la fonction de diffusion $S(q, \omega)$, d'accéder (par intégration sur les énergies de transfert ω des neutrons) aux fonctions de corrélation de spins $\langle S_0^\alpha S_r^\alpha \rangle$ ($\alpha = x, y, z$) [Hut 72, Hei 78]. Celles-ci concordent avec la forme $\langle S_0^\alpha S_r^\alpha \rangle \propto (-1)^r [\ln(r)]^\sigma / r$ ($\sigma = 0$ pour les chaînes de spins 1/2) de décroissance algébrique avec la distance r entre spins, attendue pour les chaînes de spins demi-entiers [Mor 87, Aff 89, Lia 90, Dei 93]. Une telle décroissance algébrique conduit à une longueur de corrélation de spins infinie sans pour autant qu'un ordre magnétique existe, d'où la dénomination de phase critique de quasi-ordre.

En raison de l'absence de gap dans le spectre des excitations, la susceptibilité magnétique d'une chaîne de spins demi-entiers est non nulle à température nulle et ce, bien que l'état fondamental soit un singulet magnétique. Ceci n'est en fait pas observé expérimentalement en raison des ordres magnétiques tridimensionnels. A basse température émergent cependant des variations thermiques spécifiques qui sont accessibles expérimentalement. Un exemple explicite est celui de la chaîne de spins 1/2 où des expressions analytiques extrêmement précises de la variation thermique de la susceptibilité magnétique ont été formulées [Egg 94]: aux températures $T < 0.1J$, $\chi(T) \approx (1/J\pi^2) \{1 + 1/[2\ln(T_0/T)]\}$ ($T_0 \approx 7.7J$ pour des interactions d'échange isotropes premiers voisins) et donc $\partial\chi/\partial T \rightarrow \infty$ quand $T \rightarrow 0$. Ce comportement s'annonce expérimentalement dans le composé Sr_2CuO_3 avant que l'ordre magnétique tridimensionnel ne s'établisse [Ami 95, Mot 96, Egg 96]. A plus haute température, $\chi(T)$ passe par un maximum $\chi \approx 0.147/J$ à $T \approx 0.640824J$ puis décroît.

Concernant les chaînes de spins entiers, une première confirmation par diffusion inélastique de neutrons de l'existence d'un gap dans le spectre d'excitation fut l'oeuvre de Buyers et al. [Buy 86] puis de Steiner et al. [Ste 87] sur le composé $CsNiCl_3$ à chaînes de spins 1. Cependant ce gap décroît avec la température, car le composé présente un ordre antiferromagnétique tridimensionnel, et s'évanouit à la température de Néel $T_N = 4.85K$. Une confirmation éclatante et certainement la plus convaincante fut celle fournie par Renard et al. [Ren 87] par diffusion inélastique de neutrons (et mesures de susceptibilité magnétique) sur le composé NENP à chaînes de spins 1. Aucun ordre magnétique tridimensionnel ne s'instaure dans ce composé (même à température nulle). Cependant une anisotropie locale magnétocristalline $D\sum_i (S_i^z)^2 + E\sum_i \{(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2\}$ non négligeable existe, qui a pour effet de lever la dégénérescence des états excités et en particulier des états du triplet de plus basse énergie. Comme l'énergie d'anisotropie uniaxiale D est d'un ordre de grandeur supérieur à l'énergie d'anisotropie planaire E , il en émerge un singulet et un quasi-doublet aux énergies approximatives $\Delta + \alpha D$ et $\Delta - (\alpha/2)D \pm \beta E$ où Δ est le gap d'énergie attendu sans anisotropie [Reg 95]. Une valeur de Δ de l'ordre de $\Delta \approx 0.41J$ (où J désigne l'énergie des interactions d'échange entre spins intrachânes) est obtenue, en accord avec les prédictions théoriques. Ce gap est proportionnel à $\Delta \propto S(S+1)\exp(-\pi\sqrt{S(S+1)})$ [Hat 93] (ainsi $\Delta \approx 0.048J$ pour $S=2$) et donc plus difficile à observer expérimentalement dans le cas de chaînes de spins entiers pour $S > 1$. Ultérieurement les études par diffusion inélastique de neutrons ont également considéré les fonctions de corrélation de spins $\langle S_0^\alpha S_r^\alpha \rangle$ ($\alpha=x,y,z$) [Kak 91, Ma 92]. Celles-ci concordent avec la forme $\langle S_0^\alpha S_r^\alpha \rangle = a\sqrt{r}\exp(-r/\xi_\alpha)$ de décroissance exponentielle avec la distance r entre spins, attendue pour les chaînes de spins entiers [Hal 83 a, Hal 83 b, Nom 89] où ξ_α est une longueur de corrélation associée à la composante α des spins. Cette longueur de corrélation est indépendante de α dans le cas isotrope, auquel cas elle est liée au gap Δ par la relation $\Delta \approx c_0\xi^{-1}$ où $c_0 \approx 2.7Ja$ (a est la distance entre spins) et $\xi^{-1} \propto S(S+1)\exp(-\pi\sqrt{S(S+1)})$ (ξ augmente

exponentiellement avec la valeur de S : $\xi^{-1} \approx 0.16$ et donc $\xi \approx 6.2$ pour $S=1$ et $\xi^{-1} \approx 0.011$ et donc $\xi \approx 90.9$ pour $S=2$).

Une confirmation de la nature singulet de l'état fondamental et triplet des premiers états excités a été apportée par les méthodes spectroscopiques de résonance magnétique nucléaire (NMR) et de résonance électronique de spin (ESR). Une annulation des fluctuations de l'aimantation à basse température est ainsi détectée par NMR à travers la mesure du temps de relaxation spin-réseau [Got 90, Fuj 90, Chi 90, Gav 90, Reg 95]. Cette annulation traduit le caractère singulet de l'état fondamental et l'existence du gap Δ . En appliquant des champs magnétiques intenses supérieurs à une valeur critique, trois excitations élémentaires sont par ailleurs mises en évidence [Chi 91, Fuj 92, Fuj 93, Mit 94, Chi 96]. Il en est de même en ESR sous champs magnétiques intenses, auquel cas sont observées les transitions internes au triplet [Dat 90, Kin 90, Lu 91, Bru 92, Kin 92, Shi 95, Bri 95 a, Bri 95 b, Bru 95].

Au gap dans le spectre des excitations et, à la nature singulet de l'état fondamental et triplet des premiers états excités des chaînes de spins entiers, sont également associées différentes propriétés physiques macroscopiques distinctives. Ainsi, la susceptibilité magnétique tend vers zéro quand la température tend vers zéro en raison de la non dégénérescence de l'état fondamental (en fait une faible susceptibilité magnétique résiduelle est observée [Lee 86, Ren 87, Ren 88 b, Bel 91, Gad 91, Ave 92, Tak 92 a, Kik 95, Har 95, Tak 95 b]), associée aux anisotropies locales magnétocristallines [Aff 90, Aff 91]), et la chaleur spécifique présente une anomalie Schottky [Kob 92, Tak 95 a]. Un champ magnétique appliqué lève la dégénérescence du triplet excité, faisant décroître progressivement en énergie un des états. Une transition a alors lieu entre une aimantation nulle (associée au singulet fondamental) et une aimantation finie (associée à l'état du triplet dont l'énergie est abaissée par le champ appliqué). Cette transition se produit pour un champ critique conduisant à une énergie Zeeman égale au gap Δ (en fait la valeur du champ de transition dépend de la direction d'application du champ en raison des anisotropies locales magnétocristallines). Ces mesures donnent après correction des effets d'anisotropie la valeur attendue du gap ($\Delta \approx 0.41$ J dans NENP) [Aji 89, Kat 89, Kat 90, Gad 91, Tak 92 a, Tak 92 b].

Un grand nombre d'études numériques ont été conduites en parallèle aux études expérimentales, mais que nous ne discuterons pas. On soulignera simplement qu'elles ont, entre autres contributions, confirmé que le spectre des excitations est sans gap dans les chaînes de spins demi-entiers et avec gap dans les chaînes de spins entiers [Bot 83a, Bot 83b, Nig 86, Sak 90, Sak 91, Gol 92 b, Whi 92, Yam 93, Sak 94, Yam 94, Yam 95 a, Yam 96], et précisé le comportement des fonctions de corrélation de spins [Mor 87, Tak 88, Aff 89, Nom 89, Lia 90, Sak 90, Gol 93 a, Hat 93, Sch 96] ainsi que la nature magnétique des états de basse énergie

[Tak 89, Ken 90, Els 92, Gol 92 a, Gol 93 b]. Ces études se situant dans le prolongement des développements théoriques en ont également été souvent la source.

1.1.2.c Effets de taille finie

Un matériau à chaînes de spins est susceptible de comporter des défauts structurels et chimiques conduisant à des chaînes tronquées de longueur moyenne d'autant plus courte que la densité de défauts est importante. Une autre circonstance où se rencontre un nombre fini et petit de spins est celui des matériaux à anneaux de spins (dont un exemple à 10 spins $5/2$ est connu sous l'appellation de 'roue ferrique Fe_{10} ' [Taf 90]): il s'agit alors de chaînes de spins périodiques. Ces systèmes de taille finie offrent la possibilité expérimentale d'explorer la façon dont les comportements magnétiques évoluent en direction de la limite thermodynamique des chaînes infinies. Une telle évolution ne se réalise pas de manière graduelle et régulière, et des effets spécifiques de parité (pair ou impair) du nombre de spins dans la chaîne émergent, concernant autant les états fondamentaux que les états excités qui conduisent de fait à des comportements différents des fonctions de réponse telles que la susceptibilité magnétique, la chaleur spécifique, etc.

Un effet de parité du nombre de spins fut mis en évidence dès les premiers calculs numériques sur les chaînes de spins finies ouvertes, notamment de spins $1/2$ [Bon 64]: un comportement totalement différent de la susceptibilité magnétique à basse température était ainsi obtenu selon que le nombre de spins considéré est pair ou impair. Cependant, pendant longtemps ne furent essentiellement considérés que les comportements à la limite thermodynamique, obtenus par des techniques d'extrapolation à l'infini [Gri 64, Duf 68, Joh 72, Blo 75, Bot 83 a, Blo 86, Gol 94]. Il en a été de même concernant les études expérimentales, où par exemple les anomalies de susceptibilité magnétique associées à la présence de chaînes finies, mesurées à basse température dans divers matériaux, ont généralement été analysées en termes de contributions parasites à comptabiliser globalement avec différentes autres impuretés [Pay 90, Ren 90]. Un intérêt d'étude en soi pour les chaînes de spins finies a néanmoins commencé à poindre, non seulement parce que la prise en compte des effets de taille finie contribuent à une meilleure analyse quantitative des mesures expérimentales, mais aussi et surtout, dans la mesure où des effets de parité du nombre de spins nouveaux sont censés se manifester à une échelle mésoscopique. Ces effets seraient analogues aux effets de parité de spin dans les nanostructures (équivalence entre nombre de spin et valeur globale d'un macrospin) [Los 93, Bra 96] ou par exemple, aux effets de parité du nombre de porteurs de charge dans les anneaux conducteurs mésoscopiques [Los 92, Los 95].

Une étude récente du composé NaV_2O_5 à chaînes de spins $1/2$ a clairement montré que les anomalies de susceptibilité magnétique à basse température, associées à des chaînes de spins finies dans un matériau, ne pouvait en fait pas être analysées quantitativement de manière satisfaisante sous la forme simplement de susceptibilité magnétique de Curie-Weiss associée indistinctement à des impuretés de densité donnée. Il est nécessaire de prendre en compte la distribution $P(N)$ des longueurs N des chaînes et la susceptibilité χ_N associée à chaque longueur. A basse température ne contribuent à la susceptibilité magnétique totale essentiellement que les chaînes de longueur N impaire, tandis que les chaînes de longueur N paire ont une susceptibilité qui décroît exponentiellement vers zéro. A température croissante, un changement de régime se réalise pour chaque longueur N à une température $T_c(N) \approx J/N$, entre un comportement de chaîne finie et un comportement de chaîne infinie [Mil 96]. A notre connaissance il n'existe pas encore d'investigations expérimentales considérant d'éventuels effets spécifiques de l'échelle mésoscopique associés à la parité de la longueur N des chaînes de spins demi-entiers.

Une propriété caractéristique des chaînes finies de spins entiers originale fut découverte lors de l'analyse en états VBS du modèle AKLT (cf. §1.2.4 et [Aff 87, Aff 88 a]). Ces états VBS définissent une phase de désordre quantique en tout point similaire, à la limite thermodynamique, à la phase proposée par Haldane (état fondamental singulet, gap dans le spectre des excitations et fonctions de corrélation de spins à décroissance exponentielle avec la distance entre spins). Ceci a contribué à reconnaître la phase de Haldane comme une phase VBS et grandement aidé à appréhender les effets de parité du nombre N de spins dans les chaînes finies de spins entiers. Ainsi Lieb et Mattis [Lie 62] ont montré que l'état fondamental de chaînes finies de spins 1 en interactions d'échange isotropes premiers voisins, alterne entre un triplet magnétique de spin $S^{\text{Total}}=1$ quand le nombre de spins est impair et un singulet magnétique de spin $S^{\text{Total}}=0$ quand ce nombre est pair (on appelle ces quatre états le quadruplet de chaîne ouverte). Cette dépendance de la nature du fondamental vis à vis de la parité du nombre N de spins, ainsi que la décroissance exponentielle avec la taille N de l'écart en énergie entre triplet et singulet a été ultérieurement confirmée par Affleck et Kennedy [Aff 88 a, Ken 90]. Elle s'explique en considérant les états VBS: un tel état est construit par une alternance de 'liens' symétriques et antisymétriques entre des spins $1/2$ virtuels (cf. §1.2.4). Avec des chaînes de spins finies à conditions de bords ouvertes, il en émerge deux spins effectifs $1/2$ de bouts de chaîne, conduisant à un fondamental quadruplet quasi-dégénéré. Une faible interaction effective (perceptible sur les chaînes de petites tailles) existe qui lève la dégénérescence du quadruplet fondamental. Cette interaction est de type ferromagnétique quand le nombre de spins est impair et antiferromagnétique quand ce nombre est pair [Yam 96].

Un certain nombre d'études numériques utilisant principalement les méthodes de la simulation Monte-Carlo quantique ont été également effectuées, prouvant la localisation de spins $1/2$ en bouts de chaîne et considérant la différence de comportement entre chaîne ouverte et

fermée (où par définition des spins de bouts de chaîne ne peuvent exister) [Miy 93, Whi 93, Yam 93, Yam 94, Yam 95 a, Yam 95 b, Yam 96]. Ces spins de bouts de chaîne se manifestent aussi expérimentalement, soit parce qu'en raison d'impuretés (magnétiques ou non) des liaisons singulets sont cassées faisant apparaître les spins 1/2 de bouts de chaîne, couplées ou non avec l'impureté [Ren 88 a, Hag 90, Gla 91, Mit 92, Kab 94, Kik 94, Deg 95, Fuj 95, Kik 95, Kob 95, Sor 95], soit tout simplement parce que les composés sont constitués d'un ensemble de chaînes finies de petite taille [Hag 92].

1.1.3 Diagrammes de phase

Ce paragraphe est consacré à une brève revue, sous forme de diagrammes de phase, des modèles d'interactions antiferromagnétiques considérés dans la physique des chaînes de spins. Il n'est naturellement pas possible d'épuiser toutes les possibilités d'interactions envisageables et nous nous limiterons à celles les plus fréquemment mentionnées dans la littérature. Nous ne discuterons que des chaînes de spins 1/2 et 1, dans la mesure où notre étude a essentiellement porté sur de telles chaînes. Avec des spins de valeur supérieure, des diagrammes de phase plus variés sont attendus avec, en particulier, des transitions subtiles entre phases de désordre quantique de natures différentes [Osh 92], mais ces diagrammes sont encore mal élucidés.

1.1.3.a Spins 1/2

Un modèle très étudié est celui du Hamiltonien de Heisenberg-Ising associé à des interactions d'échange axialement anisotropes entre spins premiers voisins (modèle XXZ):

$$H = \sum_i \left\{ \left(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y \right) + \lambda \left(S_i^z S_{i+1}^z - 1/4 \right) \right\} \quad (1.1)$$

Ce Hamiltonien possède une symétrie continue U(1) associée à une invariance par rotation autour de l'axe z (ou SU(2) associée à une invariance autour d'un axe quelconque si $\lambda=1$), et deux symétries discrètes que sont la translation de site à site voisin P ($S_i^\alpha \rightarrow S_{i+1}^\alpha$) et le renversement du temps T ($S_i^\alpha \rightarrow -S_i^\alpha$). Son diagramme de phase à température nulle et à la limite thermodynamique est représenté sur la figure 1.8 où ΔE est le gap d'énergie entre le fondamental et les premières excitations. Une phase d'ordre antiferromagnétique de Néel de spins Ising S_i^z associée à une brisure des symétries discrètes P et T en la symétrie produit PT est obtenue quand $\lambda > 1$. Cette phase se caractérise par un état fondamental doublet et des excitations qui sont des solitons (spinons de spins 1/2) avec un gap fini en énergie [Joh 80]. Au point isotrope $\lambda=1$, définissant le modèle XXX, on obtient une phase critique de quasi-ordre dont les excitations élémentaires sont également des solitons, mais cette fois sans gap en énergie aux vecteurs d'onde

$k=0$ et $k=\pi/a$ (où a est la distance entre spins premiers voisins). A cette phase sont par ailleurs associées des fonctions de corrélation de spins $\langle S_i^\alpha S_j^\alpha \rangle$ ($\alpha=x,y,z$) isotropes et à décroissance algébrique avec la distance $|i-j|$ entre les spins. Une phase critique est également générée à toutes les valeurs de λ comprises dans l'intervalle $-1 \leq \lambda < 1$, avec toujours des fonctions de corrélation de spins $\langle S_i^\alpha S_j^\alpha \rangle$ à décroissance algébrique avec la distance $|i-j|$ entre les spins, mais en $|i-j|^{-\epsilon_\alpha}$ avec des exposants ϵ_α anisotropes, sauf en $\lambda=-1$ ($\langle S_i^z S_j^z \rangle$ est par ailleurs de nature antiferromagnétique quand $\lambda > 0$ et de nature ferromagnétique quand $\lambda < 0$) [Fad 84]. Au point $\lambda=0$ correspond le modèle XY (encore appelé XX) définissant la phase XY de fermions libres sans spins (cf. §1.2.3). Une phase d'ordre ferromagnétique de spins Ising S_i^z associée à une brisure de la symétrie discrète T est enfin obtenue quand $\lambda < -1$. Cette phase se caractérise par un état fondamental doublet et des excitations avec un gap fini en énergie, qui sont des solitons quand $\lambda < -5/3$ et des ondes de spin quand $-5/3 < \lambda < -1$ [Joh 80].

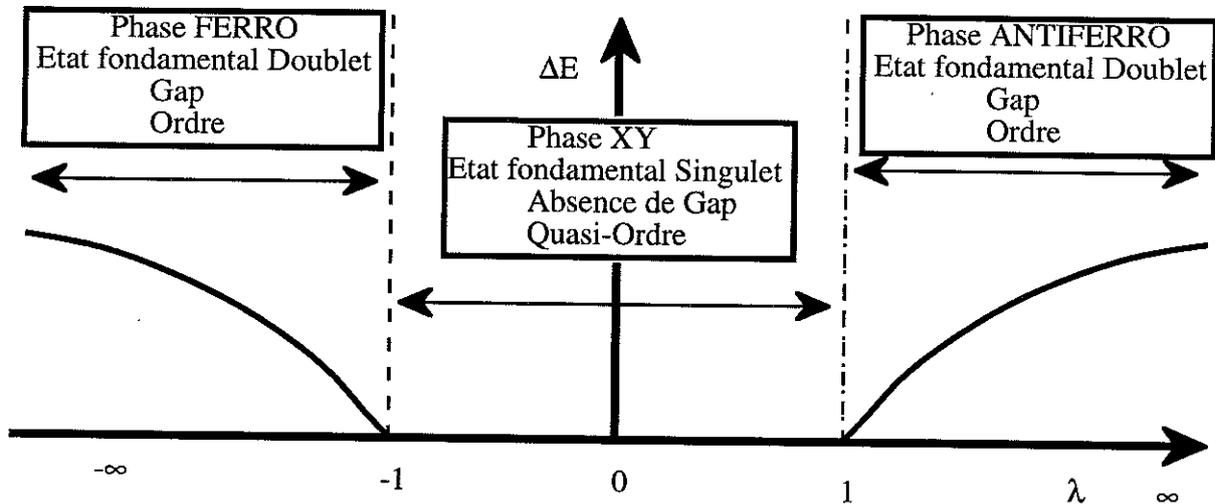


Fig. 1.8: Représentation schématique du diagramme de phase du Hamiltonien XXZ de spins 1/2

Aux différentes phases du diagramme de la figure 1.8 sont associées des états fondamentaux dont les dégénérescences sont celles de la limite thermodynamique. Avec des chaînes finies, ces états présentent des dégénérescences qui peuvent dépendre de la parité de la longueur N de la chaîne, ainsi que des conditions de bords considérées (chaîne fermée ou chaîne ouverte). Une taille finie engendre par ailleurs nécessairement un gap de taille finie dans le spectre des excitations du fait du caractère discret des niveaux d'énergie. Aucune influence qualitative de taille finie ne se manifeste dans la phase FERRO, en ce sens que les deux états du fondamental sont de même nature quelque soit la longueur N des chaînes et les conditions de bords (on notera ici que ces états sont états propres du Hamiltonien et que celui-ci commute avec le paramètre d'ordre). A l'opposé, les phases critique de quasi-ordre ($-1 \leq \lambda \leq 1$) et d'ordre antiferromagnétique de spins Ising ($\lambda > 1$) présentent des effets de taille finie et sont sensibles aux conditions de bords. Ainsi, dans la phase XY, on a un état singulet pour les chaînes de longueur N paire indépendamment des conditions de bords, un état doublet pour les chaînes ouvertes de longueur N impaire et un état quadruplet pour les chaînes périodiques de longueur N impaire (cf.

1.2.1). Concernant la phase ANTIFERRO, on obtient un état doublet dans le cas des chaînes ouvertes quelque soit la parité de la longueur N de chaîne tandis que dans le cas des chaînes périodiques, il émerge un état doublet pour une longueur N paire et un état quadruplet pour une longueur N impaire: à la dégénérescence double correspondent deux configurations de spins Ising S_i^z antiferromagnétiques qui sont de même nature que celles de la limite thermodynamique tandis que la dégénérescence quadruple est due à la dégénérescence double supplémentaire associée à un soliton de spin $1/2$ dans le fondamental.

Une variante relativement proche du modèle précédent est le modèle J_1 - J_2 à interactions d'échange isotropes étendues aux spins seconds voisins, de Hamiltonien:

$$H = \sum_i \bar{S}_i \bar{S}_{i+1} + \alpha \sum_i \bar{S}_i \bar{S}_{i+2} \quad (1.2)$$

avec $\alpha=J_2/J_1$ où J_1 et J_2 sont les intégrales d'échange entre spins premiers et seconds voisins. Son diagramme de phase pour des intégrales d'échange J_1 et J_2 antiferromagnétiques ($\alpha>0$) est représenté sur la figure 1.9 en fonction du paramètre α . On constate que la phase critique de quasi-ordre du modèle XXX est robuste et persiste de $\alpha=0$ à $\alpha=0.25$. Cependant, quand $\alpha>0.25$, une nouvelle phase (DIMERE) décrivant une dimérisation de spins spontanée émerge du fait de la compétition entre les interactions d'échange premiers et seconds voisins [Hal 82]. Cette phase possède un état fondamental doublement dégénéré, invariant par translation de site à site second voisin Q ($S_i^\alpha \rightarrow S_{i+2}^\alpha$), ainsi qu'un gap dans le spectre des excitations: elle est ordonnée. Au point particulier $\alpha=0.5$, définissant le modèle de Majumdar et Gosh, une solution exacte a été formulée, fournissant les états du fondamental [Maj 69] et les excitations de basse énergie [Sha 81].

Il existe comme précédemment des effets de taille finie et de conditions de bords concernant la phase DIMERE. Ainsi, au point caractéristique $\alpha=0.5$, un état fondamental se construit comme le produit tensoriel de liens singulets entre spins premiers voisins. Il existe deux possibilités pour un spin donné de se choisir un partenaire pour former un singulet mais, une fois ce choix effectué pour un spin, il est déterminé pour chacun des autres spins. Il en résulte dans le cas des chaînes finies périodiques de longueur N paire un état fondamental doublet comme pour la limite thermodynamique. Une chaîne périodique de longueur N impaire comporte par contre un spin libre qui ajoute une dégénérescence double conduisant à un état fondamental quadruplet. Avec une chaîne finie ouverte on a, pour les mêmes raisons, un état fondamental quadruplet pour une longueur N impaire mais par contre, pour une longueur N paire, on obtient un état fondamental quintuplet (se composant de un état formé de $N/2$ singulets et de quatre états formés de $(N-1)/2$ singulets et de deux spins libres en bouts de la chaîne) [Aff 88 a].

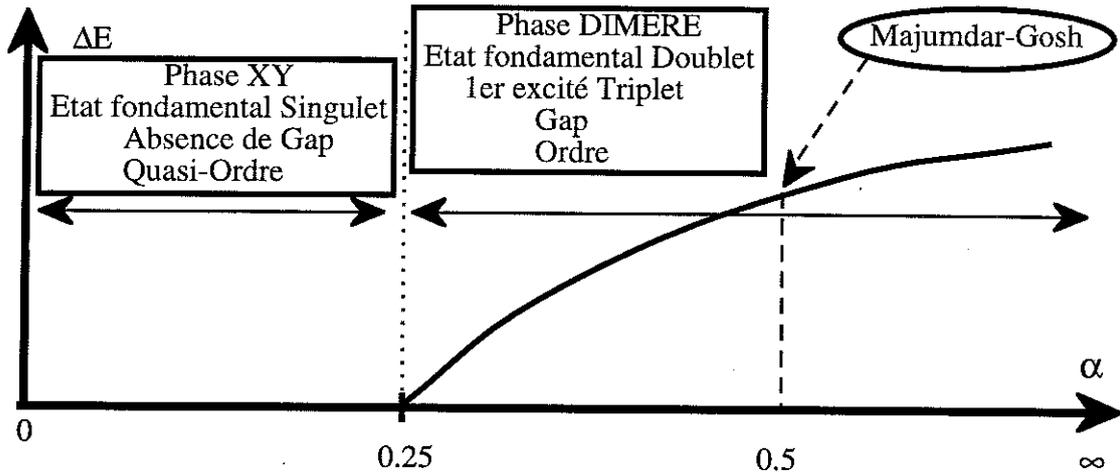


Fig. 1.9: Représentation schématisée du diagramme de phase du Hamiltonien J_1 - J_2 de spins $1/2$

Avec la découverte de matériaux inorganiques à transition de spin-Peierls tel que le composé CuGeO_3 , un intérêt renouvelé s'est manifesté pour le Hamiltonien à interactions d'échange alternées (encore appelé de Spin Peierls):

$$H = J_1 \sum_{i=1}^{N/2} \vec{S}_{2i} \vec{S}_{2i+1} + J_2 \sum_{i=1}^{N/2} \vec{S}_{2i-1} \vec{S}_{2i} = J \sum_{i=1}^N (1 - (-1)^i \delta) \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} \quad (1.3)$$

avec N pair et la condition de bord périodique $S_N^\alpha \rightarrow S_{N+1}^\alpha$, et où $J_1 = J(1-\delta)$ et $J_2 = J(1+\delta)$. Ce Hamiltonien est invariant par translation de site à site second voisin Q ($S_i^\alpha \rightarrow S_{i+2}^\alpha$) et non par translation de site à site premier voisin P ($S_i^\alpha \rightarrow S_{i+1}^\alpha$). Son diagramme de phase en fonction du paramètre $\alpha = J_2/J_1 = (1+\delta)/(1-\delta)$ est représenté sur la figure 1.10. Aux valeurs de α négatives et grandes, les spins $1/2$ en sites $2i-1$ et $2i$ sont en interactions ferromagnétiques fortes et forment des triplets locaux de spin 1 tandis que les spins $1/2$ en sites $2i$ et $2i+1$ sont en interactions antiferromagnétiques faibles. Il en émerge une phase de désordre quantique, avec un état fondamental singulet, un gap dans le spectre des excitations et des fonctions de corrélation de spins à décroissance exponentielle: elle converge à la limite $\alpha \rightarrow \infty$ ($\delta \rightarrow 1$) vers la phase de désordre quantique proposée par Haldane pour la chaîne de spins 1 en interactions antiferromagnétiques premiers voisins. Au point $\alpha=0$ ($\delta=1$ ou $J_2=0$) se réalise une phase dimère pure formée de singulets de spins à deux sites sans interactions et, caractérisée par un état fondamental doublet et un gap dans le spectre des excitations (cette phase s'apparente à la phase de Majumdar-Gosh du modèle J_1 - J_2). Une phase qualifiée de dimère partielle (au sens où les singulets de spins à deux sites interagissent) est obtenue pour $0 < \alpha < 1$: elle est caractérisée par un état fondamental singulet et des excitations de basse énergie qui se décrivent comme des ondes de spin délocalisées formant un triplet avec un gap fini en énergie (excitons) [Hid 92]. Au point $\alpha=1$ ($\delta=0$), on génère enfin le Hamiltonien XXX à phase critique de quasi-ordre. A l'exception des points singuliers $\alpha=0$ ou $\alpha=1$ et contrairement aux modèles précédents, l'influence des

effets de parité de longueur N des chaînes et des conditions de bords sont plus difficiles à estimer, en particulier dans la phase dimère partielle, du fait des interactions entre singulets. On abordera le cas spécifique de la phase de désordre quantique de Haldane au prochain paragraphe.

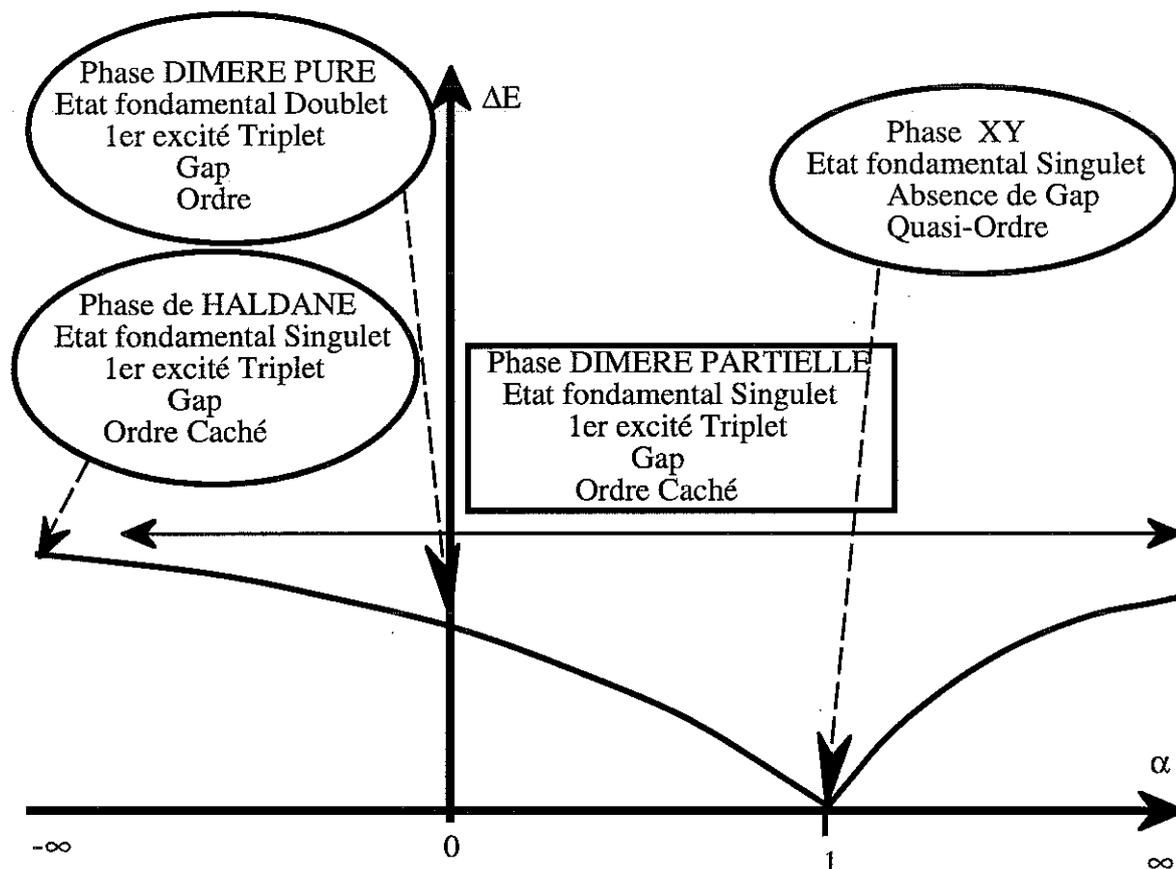


Fig. 1.10: Représentation schématique du diagramme de phase du Hamiltonien de spins 1/2 à interactions d'échange alternées

1.1.3.b Spins 1

Une anisotropie locale magnétocristalline existe dans les matériaux à chaînes de spins $S \geq 1$ qui généralement est non négligeable et se manifeste sous forme uniaxiale (ceci n'est pas le cas avec des chaînes de spins 1/2). Ainsi, concernant le modèle XXZ de Heisenberg-Ising est-il nécessaire de considérer dans le cas de spins 1 plutôt sa version étendue XXZ-D de Hamiltonien:

$$H = \sum_i \left(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \lambda S_i^z S_{i+1}^z + D (S_i^z)^2 \right) \quad (1.4)$$

A anisotropie locale magnétocristalline nulle ($D=0$), ce Hamiltonien conduit au diagramme de phase représenté figure 1.11. A l'exception de l'intervalle $0.03 < \lambda < 1.17$, ce diagramme est relativement semblable à celui des chaînes de spins 1/2 de la figure 1.8, avec l'existence notamment des phases XY, FERRO et ANTIFERRO. Au point isotrope $\lambda=1$ est générée la

phase de désordre quantique proposée par Haldane [Hal 83 a, Hal 83 b]. Cette phase à état fondamental singulet, gap dans le spectre des excitations et fonctions de corrélation de spins à décroissance exponentielle, existe en fait dans tout l'intervalle entre les points $\lambda \approx 0.03$ et $\lambda \approx 1.17$ [Kit 96], avec néanmoins un maximum du gap au point isotrope $\lambda=1$. Avec des chaînes finies en conditions de bords périodiques, le fondamental dans la phase de Haldane est un singulet autant pour les chaînes de longueur N paire que impaire. Un effet de parité de la longueur N de chaîne se manifeste par contre en conditions de bords ouvertes comme nous l'avons indiqué au §1.1.2.b et comme nous le verrons au §1.2.4. En effet, le fondamental est alors un singulet dans les chaînes de longueur N paire et un triplet dans les chaînes de longueur N impaire.

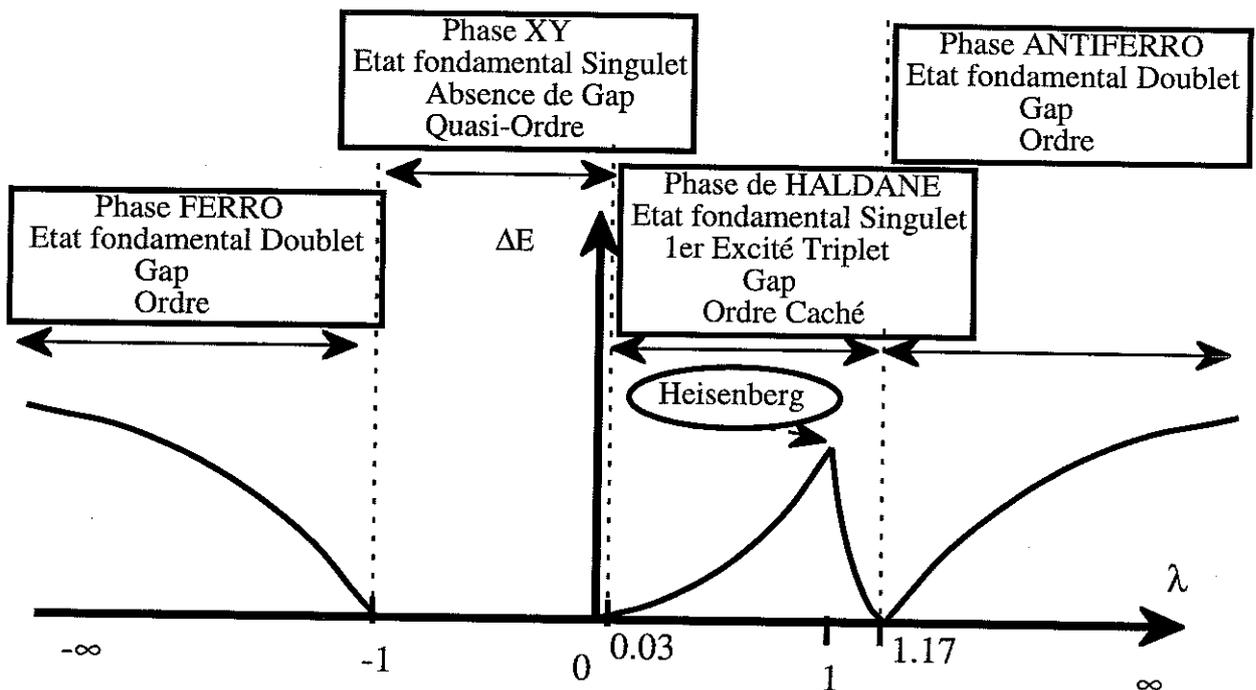


Fig. 1.11: Représentation schématique du diagramme de phase du Hamiltonien XXZ de spins 1.

A anisotropie locale magnétocristalline non nulle ($D \neq 0$) mais modérée, les phases précédentes ne sont pas fondamentalement affectées. Cependant, si cette anisotropie est trop importante, de nouvelles phases magnétiques peuvent émerger. A titre illustratif, nous avons représenté sur la figure 1.12 une portion, dans le plan $(\lambda-D)$, du diagramme de phase du Hamiltonien XXZ-D, qui fait apparaître en plus de la phase de Haldane et la phase de Néel (phase ANTIFERRO de la figure 1.11) une phase supplémentaire appelée Large-D. Cette phase se caractérise par un état fondamental singulet, un gap dans le spectre des excitations et des fonctions de corrélation de spins à décroissance exponentielle mais elle diffère de la phase de Haldane: des opérateurs non locaux de spins existent associés à une symétrie discrète $Z_2 \times Z_2$ cachée dont les valeurs sont nulles sur le fondamental de la phase Large-D, mais non nulles sur le fondamental de la phase de Haldane (cf. ordre de corde - §1.3.1). Une approche en géométrie stochastique d'intégrales de chemins du Hamiltonien XXZ-D a été formulée qui, utilisant les concepts de la physique des percolations, discerne également ces phases: la phase Large-D est

qualifiée de "gaz", la phase de Haldane de "liquide" et la phase de Néel de "solide" [Tas 91, Hat 91]. Il n'existe pas dans la phase Large-D d'effets particuliers associés aux chaînes finies.

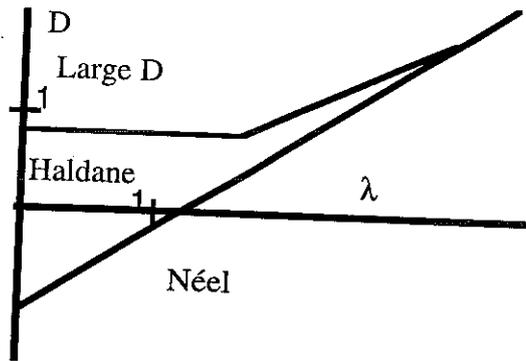


Fig. 1.12: Représentation schématique du diagramme de phase du Hamiltonien XXZ-D de spins 1 dans le plan $(\lambda-D)$

Une variante du Hamiltonien XXX ayant grandement aidé à la compréhension de la phase de Haldane est celui des interactions bilinéaires-biquadratiques à Hamiltonien:

$$H = \sum_i (\vec{S}_i \vec{S}_{i+1}) + \beta \sum_i (\vec{S}_i \vec{S}_{i+1})^2 \quad (1.5)$$

Son diagramme de phase est représenté sur la figure 1.13 en fonction du paramètre β .

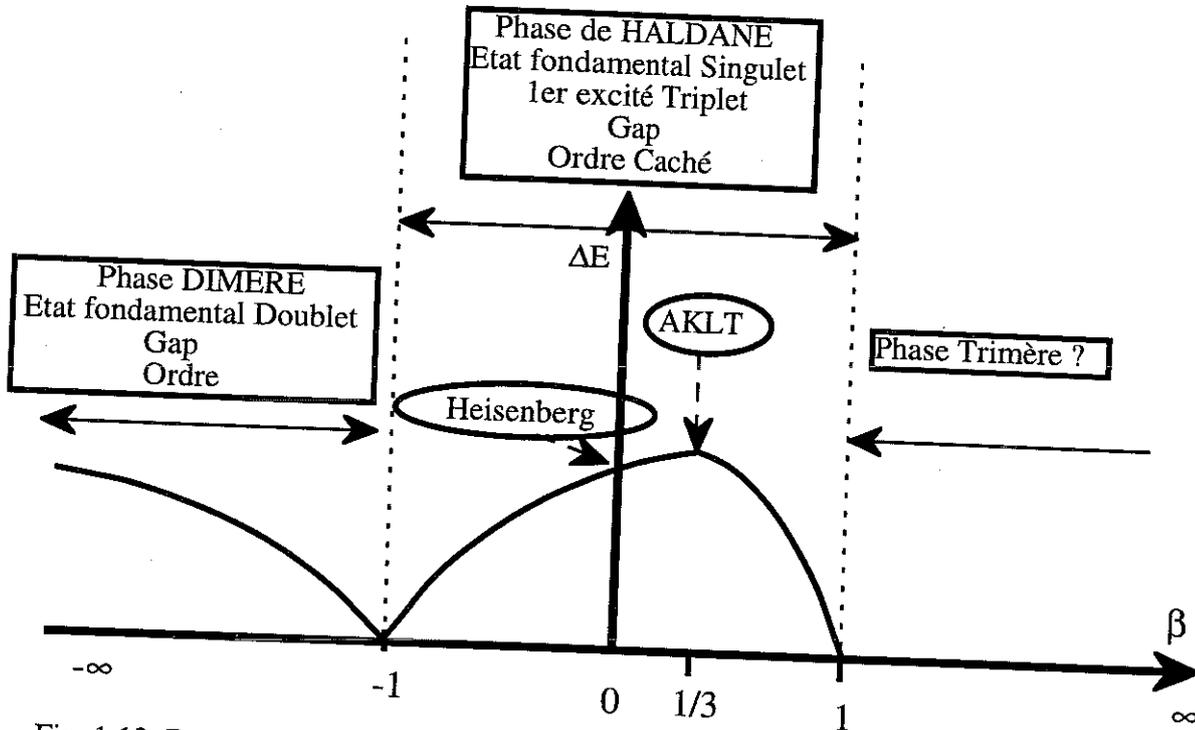


Fig. 1.13: Représentation schématique du diagramme de phase du Hamiltonien bilinéaire-biquadratique de spins 1

Il fait apparaître trois phases principales (avec deux phases singulières en $\beta=-1$ et en $\beta=1$): une phase DIMERE (quand $\beta < -1$) et une phase HALDANE (quand $-1 < \beta < 1$) de même nature que

1.2.1 Ansatz de Bethe

On entend par Ansatz de Bethe une méthodologie introduite par Bethe en 1931 pour obtenir les solutions du Hamiltonien du modèle XXX de la chaîne de spins 1/2 [Bet 31]. Cette méthodologie se généralise sans complication aucune au modèle XXZ de la chaîne de spins 1/2 de Hamiltonien:

$$H = \sum_{i=1}^N \left\{ (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + \lambda (S_i^z S_{i+1}^z - 1/4) \right\} \quad (1.7)$$

H commute avec la composante $\sum_i S_i^z$ du spin total de la chaîne, de sorte que les deux états ferromagnétiques ϕ_u tel que $S_i^z \phi_u = (1/2) \phi_u$ quel que soit $i=1, \dots, N$ et ϕ_d tel que $S_i^z \phi_d = (-1/2) \phi_d$ quel que soit $i=1, \dots, N$ sont états propres de H. Une première étape de l'ansatz de Bethe consiste alors à exprimer les autres états collectifs de la chaîne dans la base des états à M spins renversés par rapport à un des deux états ferromagnétiques ϕ_u ou ϕ_d pris comme référence. Ces états se construisent au moyen des opérateurs échelle $S_i^\pm = S_i^x \pm i S_i^y$ ($i^2 = -1$). Avec ϕ_u comme état de référence, on utilise les opérateurs S_i^- pour obtenir les états:

$$|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle = \left[\prod_{k=1, M} S_{n_k}^- \right] \phi_u \quad (1.8)$$

où les indices $1 \leq n_1 < n_2 < n_3 \dots < n_M \leq N$, dans cet ordre, définissent les sites de spins retournés par rapport à ϕ_u . Ces états sont orthogonaux et génèrent bien tout l'espace de Hilbert: en effet $\text{Card}\{|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle\} =$ nombre de façons ordonnées de ranger M objets dans N boîtes $= C_N^M$ et $\sum_{M=0}^N C_N^M = 2^N =$ dimension de l'espace de Hilbert. Ainsi une fonction d'onde $|M\rangle$ quelconque à valeur $N/2 - M$ de la composante azimutale $\sum_i S_i^z$ du spin total s'écrira sous la forme:

$$|M\rangle = \sum_{\{n_M\}} a(n_1, n_2, \dots, n_M) |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle \quad (1.9)$$

où la sommation est étendue sur tous les états de base de M spins renversés par rapport à ϕ_u .

La deuxième étape de l'ansatz de Bethe consiste à considérer l'action du Hamiltonien H sur un état $|M\rangle$: il résulte de l'opérateur $\sum_i S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y$ des transitions $|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle \rightarrow |n_1', n_2', \dots, n_M'\rangle$ avec un seul α dans $\{1, \dots, M\}$ tel que $n_\alpha' = n_\alpha \pm 1$ et $n_\beta' = n_\beta$ pour tout $\beta \neq \alpha$ (échange d'une seule paire de voisins antiparallèles) tandis que l'action de l'opérateur $\lambda \sum_i (S_i^z S_{i+1}^z - 1/4)$ sur un état $|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$ se traduit par $(-\lambda/2)$ que multiplie le nombre de liaisons antiparallèles dans $|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$ (ou encore $(-\lambda/2)$ que multiplie le nombre de transitions $|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle \rightarrow |n_1', n_2', \dots, n_M'\rangle$). On en déduit l'équation séculaire sur les

amplitudes: $Ea(n_1, n_2, \dots, n_M) = \sum_{n_1', n_2', \dots, n_M'} \{a(n_1', n_2', \dots, n_M') - \lambda a(n_1, n_2, \dots, n_M)\} / 2$
dont la solution est obtenue sous la forme (cf. [Gau 83]):

$$a(n_1, n_1, \dots, n_M) = \sum_{P \in \pi_M} A(P) \exp\left(i \sum_{j=1}^M k_{Pj} n_j\right) \text{ avec } \frac{A(P)}{A(I)} = \sigma(P) \exp\left(i \sum_{\langle j,l \rangle} \theta(k_j, k_l)\right)$$

$$\text{et } \theta(k_j, k_l) = 2 \text{Arctan}\left(\frac{\lambda \sin(k_j - k_l) / 2}{\cos(k_j + k_l) / 2 - \lambda \cos(k_j - k_l) / 2}\right) \quad (1.10)$$

où π_M est le groupe des permutations P à M indices de signature $\sigma(P)$ et à élément neutre I et où la sommation dans l'exponentielle définissant $A(P)$ est étendue à toutes les paires d'indices j, l qu'il est nécessaire d'interchanger pour générer la permutation P à partir du neutre I . Il émerge ainsi des quasi-impulsions k_j en fonction desquelles on exprime les énergies sous la forme simple:

$$E = 2 \sum_{j=1}^M (\cos k_j - \lambda) \quad (1.11)$$

Afin de définir les quasi-impulsions k_j , il est nécessaire de fixer les conditions de bords de la chaîne. En conditions de bords périodiques, on doit, pour tout état $|M\rangle$, avoir des amplitudes telles que: $a(n_1, n_3, n_2, \dots, n_M) = a(n_2, n_3, \dots, n_M, n_1 + N)$, ce qui se traduit par la condition $\exp(ik_j N) = (-1)^{M-1} \exp\{-i \sum_{l=1, M}^M \theta(k_j, k_l)\}$. Cette équation fixe les valeurs des quasi-impulsions k_j sous la forme:

$$N k_j = 2\pi I_j + \sum_{l=1}^M \theta(k_j, k_l) \quad j = 1, 2, \dots, M \quad (1.12)$$

où I_j est un nombre demi-entier pour M pair et un nombre entier pour M impair. Elle peut se réécrire sous la forme:

$$\left(\frac{\sinh(v_j + \eta)}{\sinh(v_j - \eta)}\right)^N = - \prod_{\substack{j=1 \\ (l \neq j)}}^M \frac{\sinh(v_j - v_l + 2\eta)}{\sinh(v_j - v_l - 2\eta)} \quad (1.13)$$

en posant $\lambda = \cos 2\eta$ et en définissant v_j par $\exp(ik_j) = \sinh(v_j + \eta) / \sinh(v_j - \eta)$. Les formes analytiques de λ et de η peuvent s'exprimer à l'aide d'une variable commune. Pour $\lambda > 1$ et en posant $\sigma > 0$, on a $\eta = -(i/2)\sigma$ et $\lambda = \cosh(\sigma)$. Pour $-1 \leq \lambda \leq 1$, $\eta = (\pi - \mu)/2$ et $\lambda = \cos(\mu)$. Enfin, pour $\lambda < -1$ et en posant $v > 0$, on a $\eta = (\pi + iv)/2$ et $\lambda = \cosh(v)$.

On notera que les conditions de bords twistées que nous avons considérées au cours de notre travail (cf. chap. 2 et 3) se traduisent par la condition sur les amplitudes

$a(n_1, n_3, n_2, \dots, n_M) = e^{i\phi} a(n_2, n_3, \dots, n_M, n_1+N)$ et ne modifient l'égalité (1.12) que par l'addition de l'angle de twist ϕ au deuxième membre.

Ainsi la recherche des fonctions et énergies propres de H se réduit-elle par l'ansatz de Bethe à une résolution d'équations transcendantales sur les quantités v_j (désignées dans la littérature par le terme de rapidité). Aux valeurs réelles de v_j correspondent des déviations de spins indépendantes (i.e. des magnons), tandis que des valeurs complexes de v_j telles que $\xi + i\chi$ ($\chi = -L, -L+1, \dots, L$) définissent les complexes de Bethe qui sont des états non linéaires à $2L+1$ déviations de spin, dont les solitons ($L=1/2$) [Gau 83].

A partir de la relation (1.12) il est possible de caractériser complètement les états de plus basse énergie dans le secteur de valeur $\mathcal{S} = N/2 - M$ de la composante azimutale $\sum_i S_i^z$ du spin total de la chaîne. Il convient alors de distinguer le cas de chaînes de longueur N paire et celles de longueur N impaire. Avec N pair, on a $I_j = -(M+1)/2 + j$ pour $j=1, \dots, M$ et donc une impulsion totale $K = \sum_{j=1, M} k_j = M\pi - (2\pi/N) \sum_{j=1, M} I_j = -\pi\mathcal{S} \pmod{2\pi}$ pour $N=4, 8, 12, \dots$ et $-\pi(\mathcal{S}+1) \pmod{2\pi}$ pour $N=2, 6, 10, \dots$, tandis que pour N impaire on a $I_j = -(M+1\pm 1)/2 + j$ pour $j=1, \dots, M$ et donc une impulsion totale $K = \sum_{j=1, M} k_j = M\pi - (2\pi/N) \sum_{j=1, M} I_j = -\pi\{\mathcal{S}(1\pm(1/N)) - (1\pm 1)/2\} \pmod{2\pi}$ pour $N=3, 7, 11, \dots$ et $\pi\{\mathcal{S}(1\pm(1/N)) - (1\pm 1)/2\} \pmod{2\pi}$ pour $N=5, 9, 13, \dots$. Ceci donne comme état fondamental de la chaîne de longueur N paire un état singulet avec $\mathcal{S}=0$ et $K=0$ pour $N=0 \pmod{4}$ et $\mathcal{S}=0$ et $K=-\pi$ pour $N=2 \pmod{4}$ et comme état fondamental de la chaîne de longueur N impaire un état quadruplet avec $\mathcal{S}=\pm 1/2$ et $K^{(\pm)} = -\pi\{\mathcal{S}(1\pm(1/N)) - (1\pm 1)/2\}$ pour $N=3 \pmod{4}$ et $\mathcal{S}=1/2$ et $K^{(\pm)} = \pi\{(1/2)(1\pm(1/N)) - (1\pm 1)/2\}$ pour $N=1 \pmod{4}$.

Considérant l'intervalle $-1 \leq \lambda \leq 1$ et en posant $\lambda = \cos(\mu)$, les énergies associées aux états de plus basse énergie dans le secteur \mathcal{S} sont obtenues par la méthode de Wiener-Hopf [Kar 95]. On a pour le fondamental $E(\mu, N) - E(\mu, \infty) = -(\pi/12N)^2 \sin(\mu)/\mu$ pour une longueur de chaîne N paire et $E(\mu, N) - E(\mu, \infty) = -(\pi/12N)^2 \sin(\mu)/\mu (1 - 3/2 [1/(1-\mu/\pi) - (1-\mu/\pi)])$ pour une longueur de chaîne N impaire et dans le cas particulier $\mu=0$ (modèle XXX): $E(N) - E(\infty) = -(\pi/12N)^2$ pour N pair et $E(N) - E(\infty) = -(\pi/12N)^2 (2 - 3/[2L\ln(N)])$ pour N impaire. Ces comportements indiquent que les chaînes de longueur N impaire ne présentent pas les mêmes dépendances du spectre avec N que les chaînes paires, ceci simplement en raison de l'existence d'un soliton dans le fondamental des chaînes de longueur N impaire.

1.2.2 Fermions sans spins et bosonisation

Cette approche conduit à une diagonalisation immédiate du modèle XY de chaîne de spins 1/2 [Lie 61, Aff 88 b, Aff 89] définie par le Hamiltonien:

$$H_{XY} = \sum_i \left\{ (1+\mu) S_i^x S_{i+1}^x + (1-\mu) S_i^y S_{i+1}^y \right\} = \frac{1}{2} \sum_i \left\{ (S_i^+ S_{i+1}^- + \mu S_i^+ S_{i+1}^+) + C.C. \right\} \quad (1.14)$$

Il suffit de réaliser sur H_{XY} la transformation de Jordan-Wigner:

$$\psi_i = O_i(\pi) S_i^- \quad \text{et} \quad \psi_i^+ = S_i^+ O_i^+(\pi) \quad \text{où} \quad O_i(\pi) = \exp \left[i\pi \sum_{j=1}^{i-1} S_j^+ S_j^- \right] \quad (1.15)$$

$O_i(\pi)$ est un opérateur unitaire qui, à un facteur de phase près, tourne tous les spins des sites 1 à $i-1$ d'un angle π autour de l'axe z : sur un état antiferromagnétique de spin Ising S_i^z , il formerait un domaine antiferromagnétique inverse avec une paroi en i (image intuitive du soliton). On définit ainsi des opérateurs d'annihilation ψ_i et de création ψ_i^+ de fermions. On génère facilement la transformation de Jordan-Wigner inverse en constatant que $n_i = \psi_i^+ \psi_i = S_i^+ S_i^-$. On a également $\exp[i\pi \psi_i^+ \psi_i] = \exp[-i\pi \psi_i^+ \psi_i] = 1 - 2 \psi_i^+ \psi_i$ d'où $\psi_i^+ \psi_{i+1} = S_i^+ S_{i+1}^-$ et $\psi_i^+ \psi_{i+1}^+ = S_i^+ S_{i+1}^+$.

Si la chaîne comporte N spins $1/2$ et est à conditions de bords ouvertes, on en déduit:

$$H_{XY} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left\{ (\psi_i^+ \psi_{i+1} + \mu \psi_i^+ \psi_{i+1}^+) + C.C. \right\} \quad (1.16)$$

On obtient un Hamiltonien de fermions libres sans spins. Ces fermions sont en interactions si la transformation de Jordan-Wigner (1.15) est réalisée sur le modèle XXZ de la chaîne de spins $1/2$. On a en effet $S_i^z = n_i - 1/2$ et il s'ajoute alors à H_{XY} le Hamiltonien

$$H_Z = \lambda \sum_{i=1}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z = \lambda \sum_{i=1}^{N-1} (\psi_i^+ \psi_i) (\psi_{i+1}^+ \psi_{i+1}) \quad \text{où} \quad \psi_i^+ \psi_i := \psi_i^+ \psi_i - 1/2 \quad (1.17)$$

Si la chaîne de spins est à conditions de bords périodiques, on a $S_{N+1}^\alpha = S_1^\alpha$ pour $\alpha=x,y,z$. Ceci implique $\psi_{N+1} = i^N \exp(i\pi \mathcal{S}) \psi_1$ où \mathcal{S} est la composante selon z du spin total. \mathcal{S} est relié au nombre total de fermions N_F par $\mathcal{S} = \sum_i \psi_i^+ \psi_i - N/2 = N_F - N/2$ et les conditions de bords pour les opérateurs fermions s'écrivent: $\psi_{N+1} = \exp(i\pi N_F) \psi_1$. Ainsi, comme avec l'ansatz de Bethe, on est amené à distinguer quatre possibilités: avec une chaîne de longueur N paire, on a le fondamental dans le secteur $\mathcal{S}=0$ avec des conditions de bords pour les ψ_i périodiques pour $N_F=N/2$ pair et antipériodiques pour $N_F=N/2$ impair. Avec une chaîne de longueur N impaire, on a un fondamental dégénéré dans les secteurs $\mathcal{S}=\pm 1/2$ avec de nouveau deux alternatives selon la parité de N_F . H_{XY} s'exprime dans ce cas sous la forme:

$$H_{XY} = \frac{1}{2} \sum_i^N \left\{ (\psi_i^+ \psi_{i+1} + \mu \psi_i^+ \psi_{i+1}^+) + C.C. \right\} - \frac{1}{2} \left\{ (\psi_N^+ \psi_1 + \mu \psi_N^+ \psi_1^+) + C.C. \right\} \left[\exp \left(i\pi \sum_{j=1}^N \psi_j^+ \psi_j \right) + 1 \right] \quad (1.18)$$

Si enfin la chaîne de spins 1/2 est à conditions de bords twistées, i.e. telle que $S_{N+1}^{\pm} = \exp(\pm i\theta) S_1^{\pm}$ et $S_{N+1}^z = S_1^z$, on a $\psi_{N+1} = \exp[i(\pi N_F - \theta)] \psi_1$ et H_{XY} se met sous la forme (1.18) mais en prenant $\exp(i\pi \sum_{j=1, N} \psi_j^+ \psi_j - \theta)$ (resp. $\exp(i\pi \sum_{j=1, N} \psi_j^+ \psi_j + \theta)$) comme facteur de phase devant $\psi_N^+ \psi_1$ (resp. $\psi_N^+ \psi_1^+$). On obtient ainsi un Hamiltonien qui s'apparente à celui des électrons dans un anneau conducteur, traversé par un flux θ de Aharonov-Bohm, avec cependant la différence que nous avons des fermions sans spins et que les conditions de bords dépendent de la parité du nombre N de spins 1/2 dans la chaîne.

Avec des conditions de bords périodiques sur les ψ_j , le Hamiltonien H_{XY} est immédiatement diagonalisé par transformation de Fourier: $H_{XY} \rightarrow \sum_{k \geq k_F} \cos(ak) \psi_k^+ \psi_k$ où a est la distance entre spins proches voisins. On obtient le fondamental en remplissant les états d'énergie négative. Ceci définit la "surface" de Fermi par $k_F = \pm \pi/2a$. Une excitation élémentaire dans un tel système consiste à créer des fermions au dessus de la surface de Fermi et des trous au dessous de la surface de Fermi. Elle aura des impulsions $k \approx \pm \pi/2a$. En ne considérant alors que des valeurs de k dans la gamme $|k \pm \pi/2a| \leq \Lambda$ où Λ est un cut-off ultraviolet (qui peut être pris petit devant $2\pi/a$), il est possible d'exprimer la transformée de Fourier inverse des opérateurs de champ ψ_k sous la forme de champs continus aux échelles de longueur supérieures à l'inverse du cut-off ($1/\Lambda$):

$$\frac{\psi(x)}{\sqrt{a}} \approx \exp[i k_F x] \psi_G + \exp[-i k_F x] \psi_D \quad (1.19)$$

où ψ_G et ψ_D sont des champs continus à variation spatiale lente à l'échelle de la distance a entre spins proches voisins. On peut les exprimer en fonction des opérateurs d'annihilation des électrons $a(k') = \psi(k_F + k')$ et de création des trous $b^+(k') = \psi(k_F - k')$ sous la forme:

$$\psi_D = \frac{1}{\sqrt{a}} \sum_{k' > 0} \left\{ \exp[-i k' x] a(k') + \exp[i k' x] b^+(k') \right\} \quad (1.20)$$

$$\psi_G = \frac{1}{\sqrt{a}} \sum_{k' < 0} \left\{ \exp[-i k' x] a(k') + \exp[i k' x] b^+(k') \right\} \quad (1.21)$$

Au passage à la limite continue (interaction discrète représentée par l'intégrale d'un gradient du champ et sous réserve du cut-off de renormalisation) et en linéarisant la courbe de dispersion au voisinage de Fermi $k_F = \pm \pi/2a$, le Hamiltonien H_{XY} peut alors être transformé sous la forme du Hamiltonien effectif de basse énergie:

$$H_{XY} = i v \int dx \left[\psi_G^+ \frac{d}{dx} \psi_G - \psi_D^+ \frac{d}{dx} \psi_D \right] \quad (1.22)$$

où $v = Ja$ (rq: J a été pris égal à 1 dans l'équation (1.14)).

Si on prend en compte la contribution H_Z (cf. équation 1.17) du modèle XXZ des chaînes de spins $1/2$, on obtient des expressions plus complexes et non quadratiques ($H_Z \propto \lambda \int dx \{[(\psi_D^+ \psi_D + \psi_G^+ \psi_G)^2 + (\psi_D^+ \psi_D - \psi_G^+ \psi_G)^2] - 2[(\psi_D^+ \psi_G)^2 + (\psi_G^+ \psi_D)^2]\}$), auquel cas le Hamiltonien est ensuite traité par des méthodes spécifiques dites de bosonisation [Aff 90]. Ces méthodes sont cependant très techniques. Aussi n'en discuterons nous pas. On notera simplement qu'elles émergent naturellement via les commutateurs des opérateurs courants $I_{\pm} = \psi_D^+ \psi_D \pm \psi_G^+ \psi_G$: on a $[I_+, I_+] = [I_-, I_-] = 0$ mais par contre le commutateur croisé $[I_+, I_-]$ fournit un terme de Schwinger $-(i/\pi) \partial_x \delta(x-x')$. Ceci permet de définir canoniquement un champ de bosons ϕ et son moment conjugué $\Pi = \partial_t \phi$ en identifiant I_+ à $(1/\pi^{1/2}) \partial_x \phi$ et I_- à $-(1/\pi^{1/2}) \Pi$. Une adaptation des méthodes de bosonisation aux cas des chaînes de spins $1/2$ à conditions de bords twistées a été proposée par Loss [Los 95].

1.2.3 Modèle sigma non linéaire

Cette approche permet de cerner l'origine topologique des effets de parité de spin. Une formulation élégante est celle qui utilise les états cohérents de spin $|\Omega\rangle = \prod_{j=1, N} |\Omega_j\rangle$ où $|\Omega_j\rangle = \exp(i\phi_j S_j^z) \exp(i\theta_j S_j^y) \exp(i\chi_j S_j^z) |Z_j\rangle$ est un état obtenu par rotation dans la direction $\Omega_j = (\sin\theta_j \cos\phi_j, \sin\theta_j \sin\phi_j, \cos\theta_j)$ de l'état propre $|Z_j\rangle$ à valeur propre $M_j = S_j$ maximale de la composante S_j^z du spin \vec{S}_j en j . Ces états sont définis de manière univoque en imposant une des conditions de jauge $\chi_j = (2n+1)\phi_j$ avec $n=0, \pm 1, \dots$. Ils forment un ensemble surcomplet:

$$\int \prod_j \left(\frac{2S_j + 1}{4\pi} d\Omega_j \right) |\Omega\rangle \langle \Omega| = \mathbf{1} \quad \text{et} \quad (1.23)$$

$$\langle \Omega | \Omega' \rangle = \prod_j \left(\frac{1 + \Omega_j \cdot \Omega'_j}{2} \right)^{S_j} \exp \left(-i S_j \sum_j \psi(\Omega_j, \Omega'_j) \right)$$

avec $\psi(\Omega_j, \Omega'_j) = 2 \arctan \left\{ \tan[(\phi_j - \phi'_j)/2] \left[\frac{\cos((\theta_j + \theta'_j)/2)}{\cos((\theta_j - \theta'_j)/2)} \right] + \chi_j - \chi'_j \right\}$ (à la limite classique $S \rightarrow \infty$, le recouvrement $\langle \Omega | \Omega' \rangle$ tend vers zéro). On montre par ailleurs aisément que $(\sum_j \Omega_j^\alpha S_j^\alpha) |\Omega_j\rangle = S_j |\Omega_j\rangle$, et donc, que pour un système de spins \vec{S}_j de même amplitude (i.e. tel que $S_j^2 = S(S+1)$ quel que soit j): $\langle \Omega | \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j | \Omega \rangle = 1/S^2 \sum_{ij} J_{ij} \Omega_i \cdot \Omega_j$. Ceci étant, dans un système conservatif, une évaluation de la dynamique temporelle des configurations de spins $\langle \Omega(t) | \Omega \rangle = \langle \Omega | \exp(iHt) | \Omega \rangle$ comme des valeurs statistiques moyennes d'observables à température $\beta = 1/k_B T$: $\langle A \rangle = \text{Tr}[\exp(-\beta H) A] / \text{Tr}[\exp(-\beta H)]$ ou encore des corrélations entre différentes observables: $\langle A | B(t) \rangle = \text{Tr}[\exp(-\beta H) A \exp(iHt) B \exp(-iHt)] / \text{Tr}[\exp(-\beta H)]$ est obtenue connaissant la "fonctions de partition": $Z_M = \text{Tr}[\exp(-iHt)]$ (caractérisant le comportement temporel du système) et $Z_E = \text{Tr}[\exp(-\beta H)]$ (caractérisant le comportement thermique du système). Ces quantités sont déterminées simultanément en effectuant le changement de variable

it $\rightarrow\beta$ (rotation de Wick). On peut décomposer Z_M ou Z_E en termes de contributions associées à des intervalles de temps $\varepsilon=T/N$ ou β/N infinitésimaux et écrire par exemple $Z_E=\lim_{N\rightarrow\infty}\text{Tr}[\exp(-\varepsilon H)^N]$. Utilisant la relation de fermeture (1.23) des états cohérents de spins, il en résulte au premier ordre en ε : $Z_M=\int d\Omega \exp[-\mathcal{A}_M(\Omega)]$ ou encore $Z_E=\int d\Omega \exp[-\mathcal{A}_E(\Omega)]$ où les intégrales d'action \mathcal{A}_M ou \mathcal{A}_E pour une chaîne de spins S de longueur N paire en interactions antiferromagnétiques XXX ont pour expression:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_M(\Omega) &= S \sum_j \mathcal{A}_{WZ}(\Omega_j) - \int_0^T dx_0 JS^2 \sum_{j=1}^N \Omega_j(x_0) \cdot \Omega_{j+1}(x_0) \\ \mathcal{A}_E(\Omega) &= -iS \sum_j \mathcal{A}_{WZ}(\Omega_j) + \int_0^T dx_0 JS^2 \sum_{j=1}^N \Omega_j(x_0) \cdot \Omega_{j+1}(x_0)\end{aligned}\quad (1.24)$$

\mathcal{A}_{WZ} est une intégrale d'action qui émerge du recouvrement des états cohérents et existe quel que soit le système considéré. Elle est à l'origine des effets de parité de spin (entier vs. demi-entier) dans les chaînes: en effectuant le changement $\vec{\Phi}_j = (-)^j \Omega_j$ et en posant ensuite $\vec{\Phi}_j = \vec{m}_j + (-)^j \vec{a}_j$ ($\vec{\Phi}_j^2 = 1$ et donc en imposant $\vec{m}_j^2 = 1$ on a $\vec{m}_j \cdot \vec{1}_j = 0$) puis en passant à la limite continue et enfin en intégrant par rapport aux fluctuations de densité de spin $\vec{1}$ (ce champ est à variation rapide tandis que le champ \vec{m} est à basse énergie à variation lente), on transforme l'action \mathcal{A}_M sous la forme:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_M &= \int_0^T dx_0 \mathcal{L}_M(\vec{m}) \text{ avec } \mathcal{L}_M(\vec{m}) = \frac{1}{2g} \left(\frac{1}{v_s} (\partial_0 \vec{m})^2 - v_s (\partial_1 \vec{m})^2 \right) + 2\pi S Q \\ \text{et } Q &= \frac{1}{8\pi} \varepsilon_{\mu\nu} \vec{m} \cdot (\partial_\mu \vec{m} \otimes \partial_\nu \vec{m}) \quad (\varepsilon_{\mu\nu}: \text{tenseur de Lévy - Civita})\end{aligned}\quad (1.25)$$

où ∂_0 et ∂_1 désignent les dérivations temporelles et spatiales, $g=2/S$ est la constante de couplage du modèle et $v_s=2aJS$ une vitesse d'onde de spin. Q est le terme émergent de \mathcal{A}_{WZ} . En imposant que l'action soit finie à l'infini, ce terme ne peut prendre que des valeurs entières. Il décrit le nombre d'enroulements de la sphère unité par le champ \vec{m} . Il contribue à Z_E sous la forme $Z_E = \sum_{Q=0,\infty} \int_{\mathcal{Q}} D\vec{m} \exp[-\mathcal{A}_M(\vec{m})] \exp[2i\pi SQ]$ et est donc sans effet si S est entier, au contraire du cas où S est demi-entier. On ne décrira pas les conséquences du second terme des intégrales d'action (comportant les termes d'interactions entre spins et qui définit plus spécifiquement le modèle sigma non linéaire). On mentionnera cependant que la chaîne à conditions de bords twistées a été considérée par Loss [Los 95].

1.2.4 Hamiltoniens parents et solution VBS

On regroupe dans la famille générale des états liés de valence un ensemble de solutions exactes de Hamiltoniens construits artificiellement dans ce but. Ces états sont utilisés comme états variationnels de modèles dont les solutions exactes sont, par les autres méthodes, difficiles

à obtenir sinon impossibles tels que dans le cas du modèle XXX antiferromagnétique. On distingue parmi eux les états dimères du Hamiltonien de Majumbar-Gosh [Maj 69], les états RVB (Resonating Valence Bond) proposés par Anderson [And 73] et les états VBS (Valence Bond Solid) proposés par Affleck Kennedy Lieb et Tasaki [Aff 87, Aff 88 a]. Ces états liés de valence ont des représentations simples sous forme de diagrammes (plus faciles à appréhender que les états issus par exemple de l'Ansatz de Bethe).

On entend par solution VBS la solution exacte proposée par Affleck et al. [Aff 87, Aff 88 a] pour le modèle AKLT de Hamiltonien:

$$H = J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{3} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \right)^2 \quad (1.26)$$

H constitue un hamiltonien "parent" du modèle XXX de chaîne de spins 1, au sens où la solution VBS possède toutes les propriétés de la phase de Haldane: gap dans le spectre d'excitation, état fondamental singulet et longueur de corrélation de spins à décroissance exponentielle avec la distance.

A l'origine des états VBS se trouve l'idée fondamentale que l'on peut décomposer chaque spin S d'un réseau de N sites en $2NS$ spins $1/2$ virtuels. La valeur du spin S sur un site est restaurée en imposant une condition de symétrisation entre les fonctions d'ondes des spins $1/2$ d'un même site. Entre deux sites voisins, des liens peuvent être créés par le biais d'états liés singulets créant un 'pont'. Conformément à la phase de Haldane, la façon la plus naturelle de créer un état fondamental singulet est de relier chaque site par une liaison de type singulet. Cette procédure de décomposition de spins en spins $1/2$ virtuels avec ou sans création de liens singulets a été notamment appliquée avec succès par Yajima et Takahashi [Yaj 96] pour les chaînes alternées de spins $3/2$ ainsi que par Yamamoto [Yam 96] pour les chaînes de spins $S=2$ en interactions XXX. Ces modèles conduisent à des états fondamentaux similaires aux états VBS du modèle AKLT. Il existe dans la littérature une confusion de terminologie concernant le terme VBS: à l'origine, un état VBS désignait un état fondamental du Hamiltonien AKLT mais on appelle aussi états VBS les états excités issus de ce modèle ou construits par la décomposition en spins virtuels. Affleck et al. [Aff 87] ont en effet distingué les 'états' VBS plus généraux de la 'phase' VBS associée aux états VBS initiaux du hamiltonien AKLT (caractérisée par un état fondamental singulet, un gap dans le spectre d'excitation et une longueur de corrélation exponentiellement décroissante avec la distance). Ainsi, un hamiltonien peut avoir un état fondamental VBS sans être dans une phase VBS.

Ces états peuvent se décrire de diverses façons. Nous prendrons pour formalisme descriptif les bosons de Schwinger et traiterons essentiellement le cas des spins 1. Si a_i^\dagger et b_i^\dagger sont les bosons de Schwinger représentant les opérateurs de créations des spins 'up' et 'down'

pour les spins 1/2, les règles de commutations pour ces opérateurs sont $[a_i, a_j^\dagger] = [b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}$ et $a_i^\dagger |0\rangle = |\uparrow\rangle$ et $b_i^\dagger |0\rangle = |\downarrow\rangle$ avec $|0\rangle$ définissant l'état vide. Les relations entre opérateurs de spins et de bosons peuvent s'écrire selon:

$$S_i^z = \frac{a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i}{2}, \quad S_i^x = \frac{a_i^\dagger b_i + b_i^\dagger a_i}{2}, \quad S_i^y = \frac{a_i^\dagger b_i - b_i^\dagger a_i}{2i} \quad (1.27)$$

et la condition de symétrisation reconstruisant le spin S à partir des spins 1/2 virtuels sur un site est donnée par

$$2S = a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i \quad (1.28)$$

En terme de représentation diagrammatique, un tel état symétrique sur le site i est représenté sur la figure 1.15 où les points représentent les spins virtuels 1/2 et la symétrisation est représentée par le contour ovale sur le site.



Fig. 1.15: représentation diagrammatique de l'état symétrique d'un site

De même, le lien singulet entre les sites i et i+1 s'écrit

$$(a_i^\dagger b_{i+1}^\dagger - b_i^\dagger a_{i+1}^\dagger) \quad (1.29)$$

dont la représentation est donnée à la figure 1.16, le trait horizontal figurant le pont antisymétrique singulet entre les deux sites à spins 1/2 symétrisés.

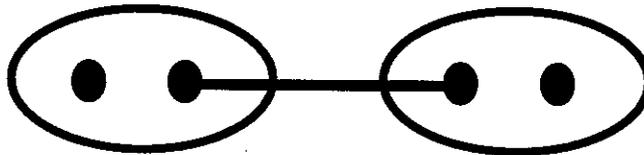


Fig. 1.16: Lien antisymétrique entre deux sites

On peut noter que ce lien antisymétrique est aussi appelé lien (ou état) dimère car les états collectifs dimères de Majumbar-Gosh ne sont rien d'autre que le produit tensoriel de tels états.

Si l'on reproduit la procédure précédente de façon successive, on génère alors un état VBS fondamental. On peut remarquer d'après la forme de la figure 1.16 que les conditions de bords vont jouer un rôle important. En effet, selon la façon dont on boucle la chaîne, il existera dans le cas d'une chaîne ouverte, comme le montre la figure 1.17, deux spins "libres" en bouts de chaîne. En revanche, dans le cas d'une chaîne périodique, comme le montre la figure 1.18,

ces spins libres disparaissent. Cette différence de comportement vis à vis des conditions limites est une distinction d'importance majeure: elle conduit à un état fondamental quasi dégénéré pour une chaîne ouverte de longueur N finie mais un état singulet à la limite thermodynamique.



Fig. 1.17: Diagramme d'une chaîne de spins 1 à conditions de bords ouvertes

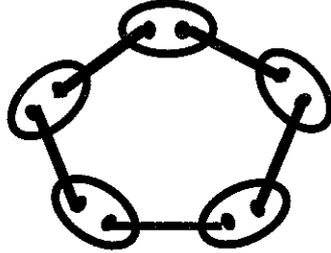


Fig. 1.18: Diagramme d'une chaîne de spins 1 à conditions de bords périodiques

Contrairement à ce que pourrait laisser intuitivement ces représentations diagrammatiques, un état VBS n'est pas un simple produit tensoriel d'états comme pour l'état dimère pur. Sa fonction d'onde est:

$$|\text{VBS}(p, q)\rangle = (a_1^+)^p (b_1^+)^{S-p} (a_N^+)^q (b_N^+)^{S-q} \prod_{j=1}^{N-1} (a_j^+ b_{j+1}^+ - b_j^+ a_{j+1}^+)^S |0\rangle \quad (1.30)$$

où p et q représentent le nombre de spins $1/2$ virtuels en bouts de chaîne, avec $0 \leq p, q \leq S$. Si l'on en cherche une représentation plus intuitive, l'état fondamental peut être représenté au moyen des états propres $-1, 0, 1$ de la composante S^z d'un spin 1. L'état VBS est alors vu comme une succession d'états du type $\dots 0-0 \dots 00+0 \dots 000-0$ qui correspondent à un état antiferromagnétique caché dans une 'mer' de 0. Nous reviendrons sur ce point lorsque nous discuterons de l'ordre caché au § 1.3.

Les états VBS permettent de construire de façon simple le triplet excité au dessus du fondamental dans la phase VBS et dont la structure est équivalente au triplet excité dans la phase de Haldane. Ce triplet excité fut interprété par Knabe [Kna 88] comme étant issu de la brisure d'un pont singulet pour donner un pont triplet de spin $S=1$. Ce type d'excitation fut appelé "crackion": c'est un soliton de spin 1. Pour construire ce crackion, il suffit pour le décrire de remplacer dans la formule (1.38) un pont singulet par les ponts symétriques suivants $(\alpha a_i^+ + \beta b_i^+)(\alpha a_{i+1}^+ + \beta b_{i+1}^+)$ où les paramètres α et β sont associés par $(\alpha^2, \alpha\beta, \beta^2)$ aux valeurs propres S^z $(+1, 0, -1)$ d'un spin 1.

Les états VBS se généralisent aisément aux valeurs de spins $S > 1$. Ainsi les états VBS susceptibles de correspondre aux états de la phase de Haldane de spins $S=2$ sont reportés sur la figure 1.19 sous leurs représentations diagrammatiques, pour les chaînes ouvertes et fermées. La chaîne ouverte possède des spins de bouts de chaîne de valeur $S=1$ conduisant à un état VBS fondamental dégénéré $3^2=9$ fois [Yam 96].

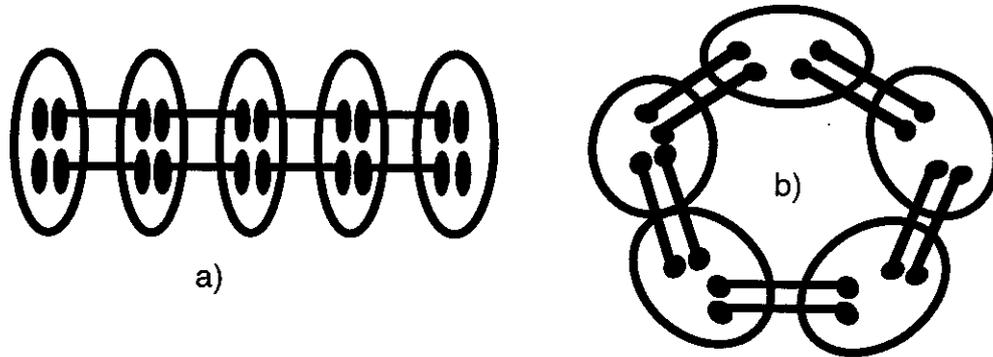


Fig. 1.19: Diagrammes VBS généralisés de chaînes de spins $S=2$ a) condition ouverte b) condition périodique

Enfin, bien que déterminés à l'origine pour une chaîne unidimensionnelle de spins 1, ces états ne se limitent pas seulement à celle-ci mais se généralisent à tout réseau de spins S tel que $S=z/2$ (où z représente le nombre de coordination du réseau) et peuvent être étendus à $nS=z/2$ où n est un entier [Aff 88 a]

1.3 Ordre caché et brisure de symétrie

Un concept approfondissant notre intuition de la phase de Haldane est celui de paramètre d'ordre de corde associé à une symétrie cachée. Ce concept se généralise dans le cas de spins $S > 1$ et laisse entrevoir de possibles nouveaux effets de parité de spin. Aussi en discuterons nous quelques aspects après un bref rappel des théorèmes attachés aux notions d'ordre et de symétrie.

1.3.1 Ordre caché et paramètre d'ordre de corde

Selon le théorème de Mermin et Wagner [Mer 66], aucun ordre magnétique associé à une brisure spontanée de symétrie continue ne peut émerger à température finie d'un système uni- ou bidimensionnel de spins \vec{S}_i en interactions d'échange J_{ij} telles que $(1/N) \sum_{i,j} |J_{ij}| |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{-2} < \infty$ (où $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ est la distance entre deux spins \vec{S}_i et \vec{S}_j), à la limite thermodynamique d'un nombre N infini de spins. A température nulle, un tel ordre magnétique n'est pas exclu. Ainsi dans un système bidimensionnel de spins $S \geq 3/2$ en interactions d'échange antiferromagnétiques isotropes

entre spins proches voisins et sans frustration géométrique, un vecteur d'onde \bar{q} existe tel que $\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{(1/T) \rightarrow \infty} (1/N) \sum_{\alpha} \langle S_{\bar{q}}^{\alpha} S_{-\bar{q}}^{\alpha} \rangle > 0$ où $S_{\bar{q}}^{\alpha} = (1/\sqrt{N}) \sum_j \exp(-i\bar{q} \cdot \bar{r}_j) S_j^{\alpha}$. ($\alpha = x, y, z$) [Nev 86]. A cet ordre dans l'état fondamental est génériquement associée une branche d'excitations dont les énergies convergent continuellement vers l'énergie du fondamental quand les impulsions tendent vers le vecteur d'onde \bar{q} (modes de Goldstone) [Lan 66].

Un corollaire à température nulle du théorème de Mermin et Wagner peut être formulé [Aue 94]. Il énonce que si à la limite thermodynamique d'un nombre N infini de spins, une différence d'énergie finie persiste entre un état fondamental non dégénéré et le premier état excité (gap dans le spectre des excitations), alors le système de spins est dans une phase de désordre quantique. Cette phase se caractérise par des fonctions de corrélation de spins $\langle S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} \rangle$ à décroissance exponentielle avec la distance $|\bar{r}_i - \bar{r}_j|$, définissant une longueur finie de corrélation des spins. Il en est ainsi de la chaîne de spins 1 en interactions d'échange antiferromagnétiques isotropes entre spins proches voisins et, d'une manière générale, de toute chaîne analogue de spins entiers [Hal 83 a, Hal 83 b].

Il n'existe pas de gap dans le spectre des excitations de tout système de spins présentant une brisure spontanée de symétrie continue en raison des modes d'excitations de Goldstone. A l'inverse, une absence de gap ne prouve nullement l'existence d'un ordre magnétique, même dans l'état fondamental. Une phase critique de quasi-ordre est susceptible d'être générée. Cette phase se caractérise par une fonction de corrélation de spins $\langle S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} \rangle$ à décroissance algébrique avec la distance $|\bar{r}_i - \bar{r}_j|$, qui s'annule à la limite thermodynamique d'un nombre N infini de spins quand cette distance tend vers l'infini, même à température nulle (i.e. quel que soit le vecteur d'onde \bar{q} on a $\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{(1/T) \rightarrow \infty} (1/N) \sum_{\alpha} \langle S_{\bar{q}}^{\alpha} S_{-\bar{q}}^{\alpha} \rangle = 0$). A cette phase sont associées, aux énergies infiniment proches de l'énergie du fondamental, des excitations qui ne s'apparentent pas nécessairement aux modes de Goldstone mais sont de nature solitonique. Il en est ainsi de la chaîne de spins 1/2 en interactions d'échange antiferromagnétiques proches voisins isotropes et, d'une manière générale, de toute chaîne analogue de spins demi-entiers [Aff 86].

On constate enfin que le théorème de Mermin et Wagner n'écarte pas l'éventualité de brisures spontanées de symétries discrètes.

Les paramètres d'ordre traditionnel de Néel et Ferro sont définis dans une direction α (où $\alpha = x, y$ ou z) par les expressions suivantes

$$O_{\text{Néel}}^{\alpha}(\mathbf{H}) = \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} (-1)^{i-j} \langle S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} \rangle_{\mathbf{H}} \quad (1.31)$$

$$O_{\text{Ferro}}^{\alpha}(\mathbf{H}) = \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \langle S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} \rangle_{\mathbf{H}}$$

où le symbole $\langle \rangle_H$ signifie la valeur moyenne de l'opérateur considéré sur le fondamental de l'hamiltonien H. Il se définit à partir d'un opérateur à deux composantes locales. De façon générale, des opérateurs locaux du type (1.31) sont bien adaptés pour caractériser des brisures de symétries locales. Dans le cas des systèmes de type Haldane cependant, ces opérateurs s'annulent et on ne peut ainsi distinguer de phases ordonnées traditionnelles (voir par exemple les calculs numériques effectués par Hatsugai et Kohmoto [Hat 91]).

Nous avons remarqué au §1.2.4 concernant les systèmes de type Haldane que la structure du fondamental VBS est en fait celui d'un ordre antiferromagnétique caché dans une 'mer' de 0 de type (000+-00+-000000+-0000+-00+000-). Au vu notamment de la structure apparemment désordonnée des états fondamentaux VBS et sur la base des théorèmes rappelés au début de ce paragraphe, expliquer l'origine du gap de Haldane par l'intermédiaire de symétries brisées discrètes peut paraître étonnante. Cependant, si l'on peut construire une observable permettant de révéler cet ordre caché, l'explication de l'existence d'un gap peut être mieux comprise. Cet ordre caché constitue, avec les spins de bouts de chaînes, deux caractéristiques fondamentales des états VBS associées aux phases de Haldane.

Den Nijs et Rommelse [Den,90] ont introduit un paramètre caractérisant l'ordre caché appelé paramètre d'ordre de corde pour le cas des systèmes de Haldane de spins 1. Ce paramètre d'ordre de corde se définit par les formules suivantes (où $\alpha=x,y$ ou z)

$$O_{\text{Corde}}^{\alpha} = \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} O_{\text{Corde}}^{\alpha}(i, j) \quad (1.32)$$

$$O_{\text{Corde}}^{\alpha}(i, j) = \left\langle S_i^{\alpha} \exp \left[i\pi \sum_{k=i+1}^{j-1} S_k^{\alpha} \right] S_j^{\alpha} \right\rangle_H$$

Ce paramètre ne s'annule pas dans la phase de Haldane des chaînes de spins 1 pour toutes les directions α et brise ainsi une symétrie de type $Z_2 * Z_2$ cachée (symétrie discrète d'un angle π autour de l'axe x ou z) [Ken 92 a, Ken 92 b]. Oshikawa [Osh 92] a généralisé cette notion de paramètre d'ordre de corde par l'intermédiaire de l'opérateur de corde généralisé de type:

$$O_{\text{Corde}}^{\alpha}(\theta) = \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} O_{\text{Corde}}^{\alpha}(\theta)(i, j) \quad (1.33)$$

$$O_{\text{Corde}}^{\alpha}(\theta)(i, j) = \left\langle S_i^{\alpha} \exp \left[i\theta \sum_{k=i+1}^{j-1} S_k^{\alpha} \right] S_j^{\alpha} \right\rangle_H$$

où θ représente l'angle de rotation. Cette brisure de symétrie cachée de type $Z_2^*Z_2$ révélée par le paramètre d'ordre de Den Nijs et Rommelse n'est cependant généralisable qu'aux seuls cas où S sont des entiers impairs. Ainsi, pour $S=2$, le paramètre d'ordre $O_{\text{Corde}}^\alpha(\pi)=0$ mais $O_{\text{Corde}}^\alpha(\frac{\pi}{2})$ est maximum et caractérise un ordre caché [Osh 92, Hat 92, Nis 95]. En parallèle, l'étude faite par Totsuka et Suzuki [Tot 95] a précisé cette notion de maximum en démontrant qu'il existe pour chaque spin S entier, S maximum du paramètre d'ordre caché pour des valeurs d'angles telles que

$$\theta \approx \frac{(2n-1)\pi}{S} \quad (1.34)$$

avec n prenant successivement les valeurs $n=1,2,\dots,S$.

1.3.2 Brisure de symétrie cachée dans les chaînes de spins

1.3.2.a Phase VBS et de Haldane

Un ordre existant mais étant caché, il est raisonnable de penser que celui-ci émerge d'une symétrie elle même cachée. Dans le but de révéler une brisure de symétrie cachée dans les phases de type VBS, Kennedy et Tasaki [Ken 92 a, Ken 92 b] ont introduit une transformation, que nous appellerons TKT, unitaire non locale U . Nous avons vu au §1.2.4 que les états VBS représentent les états fondamentaux (ou proches) de ceux de la phase de Haldane. Ainsi, cette brisure de symétrie cachée ne se limite pas au modèle AKLT mais est susceptible de se manifester dans la phase de Haldane. La TKT peut s'écrire de façon compacte, forme proposée par Oshikawa [Osh 92], par l'expression suivante

$$U = U^{-1} = \prod_{j < k} \exp\left(i\pi S_j^z S_k^x\right) \quad (1.35)$$

Cette transformation modifie les hamiltoniens originaux en les faisant passer d'une somme de termes à plus proches voisins en une somme de termes globalement locaux, généralisable à des hamiltoniens polynomiaux [Osh 92]. Ainsi le hamiltonien de Heisenberg entre plus proche voisins est projeté dans un hamiltonien local. Cette TKT donne les propriétés suivantes aux opérateurs de spins:

$$US_j^x U^{-1} = S_j^x \exp\left[i\pi \sum_{k=j+1}^L S_k^x\right] \quad (1.36)$$

$$US_j^y U^{-1} = \exp\left[i\pi \sum_{k=1}^{j-1} S_k^z\right] S_j^y \exp\left[i\pi \sum_{k=j+1}^L S_k^x\right] \quad (1.37)$$

$$US_j^z U^{-1} = \exp \left[i\pi \sum_{k=1}^{j-1} S_k^z \right] S_j^z \quad (1.38)$$

Les expressions (1.36, 1.37, 1.38) permettent ainsi d'effectuer les transformations unitaires sur des polynômes arbitraires de spins et notamment, sur l'observable locale suivante

$$US_j^\alpha S_k^\alpha U^{-1} = -S_j^\alpha \exp \left[i\pi \sum_{m=j+1}^{k-1} S_m^\alpha \right] S_k^\alpha, \quad \text{si } \alpha = x, z \quad (1.39)$$

qui n'est autre que l'opérateur d'ordre de corde défini par Den Nijs et Rommelse pour les variables x ou y .

Si on définit par \tilde{H} le hamiltonien issu de la TKT tel que $\tilde{H} = UHU^{-1}$ où H est un hamiltonien général polynomial, une relation explicite peut s'établir entre ordre caché et ordre Ferro sur les états fondamentaux associés aux hamiltoniens respectifs H et \tilde{H} , qui s'exprimera par la forme suivante

$$O_{\text{corde}}^\alpha(H) = O_{\text{Ferro}}^\alpha(\tilde{H}), \quad \text{pour } \alpha = x, z \quad (1.40)$$

Dans les chaînes de spins 1 dont les états VBS sont les états proches des états fondamentaux, la TKT permet de révéler ainsi l'ordre caché sous forme de corde en un ordre Ferro dans les directions x ou z .

Il reste maintenant à définir quelle symétrie est brisée dans l'hamiltonien \tilde{H} pour comprendre l'origine du gap de Haldane. Le hamiltonien de Heisenberg est de symétrie $O(3)$, c'est à dire qu'il est invariant par une rotation continue, quelque soit l'axe choisi. Dans le cadre d'une transformation unitaire, les hamiltoniens transformés gardent la même symétrie que les originaux, qui dans le cas présent sera transformée en symétrie majoritairement non locale. Kennedy et Tasaki ont montré que la seule symétrie locale existant après transformation des hamiltoniens des phases de Haldane sera de type $Z_2 * Z_2$, c'est à dire symétrie discrète d'un angle π autour des seuls axes particuliers X ou Z . Cette symétrie $Z_2 * Z_2$, cachée dans les hamiltoniens originaux, peut être caractérisée par les deux paramètres d'ordre $O_{\text{Ferro}}^X(\tilde{H})$ et $O_{\text{Ferro}}^Z(\tilde{H})$. Selon les phases rencontrées dans les hamiltoniens, les paramètres d'ordre traditionnels ou de cordes varient des valeurs finies aux valeurs nulles en fonction de la présence ou non d'une symétrie particulière brisée. Dans le cas des phases de Haldane, les deux paramètres d'ordre de corde précédents sont non nuls, caractéristique d'une symétrie brisée. On peut donc considérer que le gap de Haldane est une résultante de cette brisure de symétrie.

Comme nous l'avons vu à propos des chaînes ouvertes au §1.2.4, les états VBS associés possèdent une dégénérescence d'ordre 4 due aux spins de bouts de chaînes. Sous l'effet de la

TKT unitaire, on s'attend aussi à ce que l'état fondamental soit de dimension 4. Kennedy et Tasaki ont montré que ces quatre états fondamentaux sont les seuls états fondamentaux et qu'ils sont tous différents. Ainsi, il existe une différence à la limite thermodynamique entre l'hamiltonien original dégénéré et le transformé non dégénéré. Chaque état du fondamental dégénéré (ou chaque état transformé) donne une valeur finie au paramètre d'ordre de corde (paramètre d'ordre Ferro) [Fàt 93].

Nous allons préciser quelques points concernant l'hamiltonien (1.4) (cf. §1.1.3.b). Cet hamiltonien possède une symétrie globale $O(3)$ dans le cas Heisenberg isotrope ($\lambda=1$ et $D=0$), $O(2)$ autrement. Si l'on ne considère que le cas antiferro pur où $\lambda \geq 0$, il existe trois phases principales qui sont la phase de Haldane représentée schématiquement figure 1.12 (cf. §1.1.3.b) (comprise pour $D=0$ entre $\lambda \approx 0.03$ et $\lambda \approx 1.17$), la phase Antiferro (comprise pour $D=0$ entre $\lambda > 1.17$ et $\lambda \rightarrow \infty$) et la phase large-D (comprise pour $\lambda=0$ entre $D \approx 1.0$ et $D \rightarrow \infty$). Vis à vis de l'ordre des états fondamentaux, Kennedy et Tasaki ont montré les trois points suivants:

i) la phase de Haldane est telle que pour l'ordre de corde, $O_{\text{Corde}}^{\alpha} > 0$ pour $\alpha=x,z$ et $O_{\text{Corde}}^y = 0$ alors que $O_{\text{Néel}}^{\alpha} = 0$ pour $\alpha=x,y,z$. Il y a dans cette phase brisure complète de symétrie $Z_2 * Z_2$. Il existe un gap dans le spectre d'excitation.

ii) la phase Antiferro est telle que $O_{\text{Corde}}^z > 0$ et $O_{\text{Corde}}^{\alpha} = 0$ pour $\alpha=x,y$. De même, $O_{\text{Néel}}^z > 0$ et $O_{\text{Néel}}^{\alpha} = 0$ pour $\alpha=x,y$. Il y a vis à vis de l'ordre de Néel brisure partielle de symétrie $O(3)$ et vis à vis de l'ordre caché brisure d'une des symétrie Z_2 . Il existe un gap dans le spectre d'excitation.

iii) la phase large D, où $D > 0$, est telle que $O_{\text{Corde}}^{\alpha} = 0$ et $O_{\text{Néel}}^{\alpha} = 0$ pour $\alpha=x,y,z$. Il n'existe pas de symétrie brisée dans cette phase et pas de gap dans le spectre d'excitation.

Des études numériques sont venues corroborer ces résultats [Gir 89, Hat 91, Hat 92, Yam 93, Sak 94]. Le tableau 1 récapitule leurs résultats qualitatifs entre ordre caché et symétries brisées [Hat 91].

Phase	$Z_2(z)$	O_{Corde}^z	$Z_2(x)$	O_{Corde}^x
Large D	0	Zéro	0	Zéro
Haldane	1	Fini	1	Fini
Antiferro	1	Fini	0	Zéro

Tableau 1: ordre de corde et symétrie brisée, 0 signifiant non brisée et 1 brisée

1.3.2.b Autres cas

Dans tous les cas des spins pairs, notamment pour $S=2$, la transformation de Kennedy-Tasaki ne permet pas de révéler d'ordre caché brisant une symétrie. Il ne peut alors pas y avoir de symétrie brisée de type $Z_2 \times Z_2$ expliquant le gap de Haldane mais probablement une symétrie plus complexe du fait même de la dégénérescence 9 des états associés au fondamental VBS pour $S=2$. Ainsi, la vision simple que l'on peut se faire du gap de Haldane issu d'une symétrie brisée cachée de type $Z_2 \times Z_2$ dont le paramètre d'ordre est celui de Den Nijs et Rommelse n'est adaptée qu'au seul cas du spin 1. Même si l'on peut définir des paramètres d'ordre caché pour le cas des spins entiers, ils servent essentiellement à caractériser la phase de Haldane vis à vis d'autres phases dans la mesure où il est difficile de trouver une transformation analogue à la TKT permettant de révéler une symétrie brisée.

Nous avons remarqué au §1.2.1.a que le cas limite $\lambda \rightarrow \infty$ de l'hamiltonien de spins 1/2 alternés défini par l'expression (1.3) représentait une chaîne de spins 1 dans la mesure où les spins se couplent deux à deux pour former un trimère (interaction ferromagnétique \equiv contrainte de symétrisation par site du modèle VBS) [Hid,92]. Ainsi, comme dans le cas des spins 1, on peut s'attendre à ce qu'il existe une brisure de symétrie $Z_2 \times Z_2$ dans le cas limite $\lambda \rightarrow \infty$ et que l'on puisse y appliquer la TKT pour ce cas limite. Ce modèle possède un gap dans le spectre d'excitation au dessus du fondamental, un état fondamental singulet à la limite thermodynamique ainsi qu'une décroissance exponentielle de la longueur de corrélation antiferromagnétique pour toute la zone allant de $\lambda \approx -1$ jusqu'à $\lambda \rightarrow \infty$. Hida [Hid,92] a ainsi étudié numériquement le paramètre d'ordre de Den Nijs et Rommelse selon l'axe z dans cette zone, y compris au point $\lambda = -1$ qui correspond au point de phase XY (liquide de spins) sans gap. Il a ainsi montré qu'il variait de façon continue pour s'annuler au point $\lambda = -1$, passant par une valeur maximum pour le point correspondant au dimère pur. Il a ainsi défini dans ce cas le paramètre d'ordre de corde comme étant une mesure de la force des ponts singulets localisés. Une représentation schématique de ces comportements est rappelée figure 1.22. En parallèle à ce travail, Kohmoto et Tasaki [Koh,92] ont défini un opérateur de corde pour le cas $S=1/2$ ainsi qu'une double transformation, moins intuitive que la TKT, montrant que le système de type Haldane pour $S=1$ et le cas limite des spins 1/2 alternés étaient dans une même phase, brisant une symétrie de type $Z_2 \times Z_2$.

Ainsi, si l'existence du gap dans les hamiltoniens de type Haldane pour des spins 1 ou ceux qui leurs sont connectés pour les spins 1/2 alternés est mieux comprise, notamment par le biais d'ordre caché et de symétries discrètes brisées, la généralisation à des spins quantiques de valeurs supérieures reste difficile.

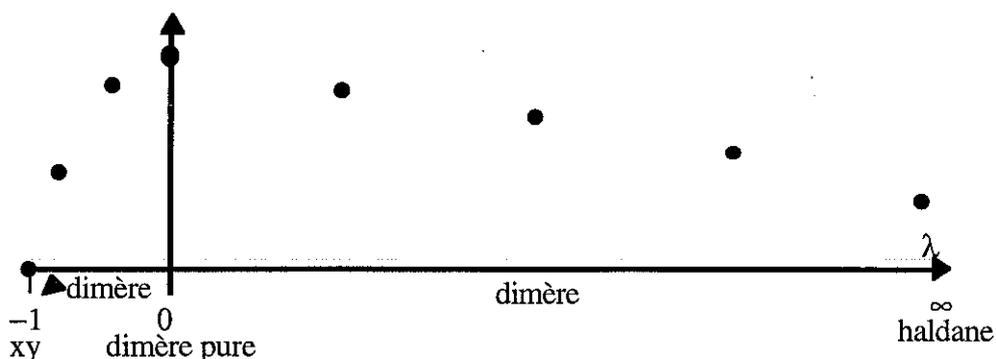


Fig. 1.22: Représentation qualitative du paramètre d'ordre de corde en fonction de λ

- Conclusion:

Outre la variété des états fondamentaux et excitations qu'il laisse entrevoir, on retiendra qualitativement de ce premier chapitre, une omniprésence de phénomènes spécifiques des chaînes finies. Interviennent autant des effets de conditions de bords (chaîne ouverte ou chaîne périodique) que des effets de parité de la longueur N des chaînes. De telles chaînes existent expérimentalement, généralement en raison d'imperfections structurales. Cependant, il est difficile d'en analyser les comportements, soit parce qu'ils sont masqués par ceux, à la limite thermodynamique, des chaînes de taille macroscopique, soit parce que la distribution trop importante de taille ne permet que des manifestations indirectes de comportements spécifiques. Les études numériques ne se sont cependant dans beaucoup de cas pas intéressées aux effets spécifiques de taille finie. A l'exception de certaines, elles n'ont souvent considéré que des chaînes périodiques (éventuellement ouvertes) de longueur N paire adaptées à des extrapolations à la limite thermodynamique et dont les spectres sont en maintes circonstances parfaitement contrôlés par les méthodes de la théorie des champs à invariance conforme: il a été par exemple démontré que le fondamental et les états excités de chaîne de spins $1/2$ en interactions XXZ (avec $J_{xy} > J_z$) et de longueur N paire dépendent analytiquement de N avec des coefficients identifiés: $E_0 = AN - \pi c / 6N + O(N^{-1})$ et $E_n - E_0 = 2\pi X_n / N + O(N^{-1})$ ($c=1$: charge centrale de la théorie conforme correspondante et X_n : dimensions d'échelle des transformations d'échelle). Ceci n'est pas le cas avec des chaînes de longueur N impaire où, par exemple, la dépendance de E_0 avec N ne met pas en évidence une anomalie conforme identifiée (ceci très probablement en raison de l'existence d'un soliton dans le fondamental). Au niveau des approches formelles, des effets de taille finie ont également pu être mentionnés dans certains cas. Dans les deux chapitres qui suivent et qui exposent les études que nous avons explicitement effectuées, nous sondons différents aspects de ces effets de taille finie en considérant leurs actions sur la susceptibilité magnétique et la raideur de spin.

Chapitre 2

Effets de parité dans les chaînes antiferromagnétiques de spins $1/2$

Chapitre 2

Effets de parité dans les chaînes antiferromagnétiques de spins $1/2$

Ce chapitre est consacré à nos études spécifiques des effets de parité de taille (sous diverses conditions de bords) dans les chaînes antiferromagnétiques de spins $1/2$. A cette fin, nous analysons le comportement de la susceptibilité magnétique ainsi que celui de la raideur de spin. Si la susceptibilité est une grandeur mesurable expérimentalement et ayant fait l'objet de nombreuses études, la raideur de spin reste une grandeur thermodynamique à finalité essentiellement théorique (il existe cependant un lien entre la raideur de spin et la susceptibilité magnétique transverse en mode hydrodynamique) à laquelle nous avons essayé de nous attacher plus spécialement (cf. §2.1). On définira en fait plusieurs formes de raideur de spin inhérentes aux conditions de contraintes et/ou de bords appliquées.

Les études numériques envisagées en température nécessitent la caractérisation d'un large spectre énergétique ainsi qu'une souplesse d'utilisation des conditions de bords. Parmi les approches numériques habituelles, on discernera très superficiellement les diagonalisations exactes (fournissant tous les états quantiques mais limitées en nombre de spins - typiquement de l'ordre de 10 spins $1/2$), les méthodes itératives de Lanczos et variantes associées (fournissant les états de portions de spectres d'énergie de chaînes de spins environ deux fois plus grandes), les différentes variantes (World Line, Transfert Matrix Method etc.) de la simulation Monte-Carlo (traitant de chaînes de spins dix fois plus grandes mais aux erreurs statistiques délicates à contrôler, éventuellement traitées par les méthodes d'entropie maximale) ou les récents algorithmes de matrices densité des groupes de renormalisation quantique - DMRG Method - (fournissant les états du fondamental de chaînes de spins également dix fois plus grandes mais mettant en jeu des conditions de bords de sous-blocs intermédiaires extrêmement délicates à gérer). Nous avons opté pour la diagonalisation exacte afin non seulement d'obtenir tous les états quantiques (l'observation d'effets de parité n'étant pas restrictive aux seuls états

fondamentaux) mais aussi, de traiter (sans restrictions et contraintes aucunes) les différentes conditions de bords considérées.

Pour des raisons techniques, nous nous sommes limités dans le cadre des spins $1/2$ à des systèmes de taille nanoscopique allant jusqu'à 10 spins.

2.1 Méthode des torsions et raideur de spin

La détermination des corrélations et longueurs de corrélation magnétiques, généralement sur l'état fondamental d'un système physique, est une mesure traditionnelle de l'ordre magnétique. A température nulle et sans perturbations extérieures, elles mesurent la stabilité du système vis à vis des fluctuations quantiques. Un état ordonné sera insensible à ces fluctuations et pourra être considéré comme stable. Au contraire, un état désordonné sera sensible aux fluctuations et pourra être considéré comme instable. Ces corrélations et longueurs de corrélation, bien que complètement représentatives du système physique considéré et expérimentalement observables, présentent le désavantage d'être longues à déterminer numériquement. Par une telle approche, la caractérisation d'effets de parité dans les chaînes peut s'avérer donc longue voire difficile.

Récemment, Ueno et al. [Uen 89, Uen 91] ont proposé une approche de caractérisation de l'ordre et de la stabilité vis à vis des fluctuations quantiques par la méthode dite des torsions. Cette approche repose sur la détermination de la grandeur thermodynamique appelée raideur de spin. Pour une chaîne de spins, elle nécessite l'application de "torsions". La raideur de spin est liée à la notion d'ordre car un ordre à longue distance produit par nécessité une raideur de spin forte [Oka 95]. A l'opposé, un système désordonné aura une raideur nulle. Elle est équivalente à la notion de constante de rigidité en mécanique. Si la méthode des torsions est une approche moins précise que celle des corrélations (impossibilité de définir des vecteurs d'ondes associés à l'ordre, aspect quantitatif plus difficile, etc...), elle présente l'avantage de pouvoir caractériser des phases magnétiques distinctes tout en restant simple et rapide dans sa détermination numérique. Cette méthode a été appliquée en premier lieu dans des cas classiques [Mon 91, Caf 94], mais ne présente aucune restriction d'application aux cas quantiques [Shi 93, Fuk 95, Fei 95, Oka 95, Jon 96]. La détermination de la raideur de spin engendrée par une torsion appliquée sur un état quantique particulier permet également de déterminer la stabilité de cet état vis à vis de la torsion créée. La notion de stabilité est associée dans le cas de la raideur de spin au gain ou à la perte d'énergie générée par cette torsion. Ainsi, à un état instable sera associée une diminution de l'énergie et donc une raideur négative. A l'opposé, une augmentation de l'énergie sera associée à un état stable et donnera une raideur positive.

Vis à vis des effets de parité, la raideur de spin est extrêmement intéressante car cette grandeur est supposée être une grandeur caractéristique mésoscopique (reflétant un comportement d'universalité au sens des transitions de phases), équivalent magnétique des courants permanents dans les matériaux conducteurs. Elle est donc supposée être sensible aux effets de parité de taille [Los 95].

Ainsi, nous avons choisi comme principal outil d'investigation numérique des effets de parité la raideur de spin, en nous attachant à définir les principales formes de raideur rencontrées. Nous nous attacherons également à explorer les diagrammes de phase et à baser notre analyse sur les rappels du chapitre 1 (états VBS, modèles XX, etc...). La raideur de spin peut se définir par l'intermédiaire de la fonction de partition et se définit par l'expression

$$\rho_S = \frac{1}{2} N \left. \frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2} \right|_{\theta \rightarrow 0} \quad (2.1)$$

où $F = -T \ln(Z)$ représente l'énergie libre du système soumis aux conditions d'angles de bords θ [Los 95] et N est le nombre de sites de la chaîne considérée. D'une façon générale, la torsion considérée est physiquement créée par l'intermédiaire des conditions de bords et/ou de contraintes appliquées. On peut noter que si l'on s'intéresse à la raideur de spin dans un état propre donné, on peut faire appel à une énergie libre partielle.

Afin de rendre la raideur de spin indépendante de la taille de la chaîne de façon explicite, nous définissons la raideur de spin normalisée à chaque site du réseau, ρ_{SN} , sous la forme suivante

$$\rho_{SN} = \frac{\rho_S}{N} \quad (2.2)$$

Cette raideur normalisée permet de rendre compte plus facilement les effets de parité de taille observés.

Comme nous le verrons dans la suite de ce chapitre, le paramètre angulaire de torsion θ peut être déterminé dans des chaînes périodiques ou ouvertes. Le système d'axes de référence sera celui des angles polaires traditionnels rappelés en annexe.

2.2 Chaînes à conditions de bords périodiques

Nous allons dans la suite de ce paragraphe nous intéresser au cas de chaînes à conditions de bords périodiques. Par définition, si N représente le nombre de spins dans la chaîne, la

condition de périodicité traditionnelle se définit pour les opérateurs S^Z et S^\pm agissant dans l'espace des spins par les conditions suivantes sur le dernier site

$$S_{N+1}^Z = S_1^Z \quad (2.3)$$

$$S_{N+1}^\pm = S_1^\pm \quad (2.4)$$

Une telle chaîne périodique unidimensionnelle porte le nom d'anneau de spins.

Si l'on considère une chaîne périodique décrite par l'hamiltonien XXX, ce dernier prend la forme suivante

$$H = J \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} = J \sum_{i=1}^N H_{i,i+1} \quad (2.5)$$

Les conditions de périodicité (2.3) et (2.4) impliquent que l'on ai

$$H_{N,N+1} = H_{N,1} \quad (2.6)$$

Par convention, l'échange antiferromagnétique sera normalisé à $J=1$ dans les trois directions (sauf contraire), et la température sera donnée en unité de J/k_B (où k_B est la constante de Boltzman) que nous prendrons en unité de J ($k_B=1$).

Les tailles de nos chaînes étant limitées, les différents niveaux d'énergie que nous avons rencontré sont discrets. Par convention, nous avons choisi de nommer gap de taille finie la séparation en énergie entre ces niveaux discrets (en l'occurrence entre le niveau fondamental et le/les premier(s) excité(s)).

2.2.1 Effets de parité dans la susceptibilité longitudinale

Ce paragraphe est consacré à l'influence de la parité de taille sur la susceptibilité longitudinale, exemple concret de l'influence de la parité sur les grandeurs thermodynamiques. Cette influence fut notamment observée numériquement par Bonner et Fisher [Bon 64] dans ce même type de chaîne. Comme dans le cas de la raideur de spin définie en (2.2), nous considérerons ici la susceptibilité longitudinale normalisée par site. Par raison de simplicité, nous la déterminerons selon l'axe z de quantification. On définira dans la suite la susceptibilité normalisée par la grandeur thermodynamique suivante

$$\chi_{ZN} = -\frac{1}{N} \left. \frac{\partial^2 F}{\partial B_z^2} \right|_{B_z} \rightarrow 0 \quad (2.7)$$

où $F = -T \ln(Z)$ est l'énergie libre et N la taille du réseau de spins.

La susceptibilité longitudinale pour une température fixée se comprend physiquement comme la réponse du système physique à un champ magnétique appliqué. A température nulle, le champ tend à lever la dégénérescence des états propres de l'hamiltonien. La température quant à elle, peuple les différents niveaux d'énergie, qui contribuent à leur manière à la susceptibilité .

Considérons une chaîne antiferromagnétique périodique de N spins $1/2$ décrite par un hamiltonien XXX défini par l'expression (2.5). Dans la mesure où l'on s'intéresse aux aspects liés à la parité de taille et que ceux-ci se manifestent dans le cas présent aux basses températures, nous nous sommes limités à une zone restreinte en température (de l'ordre de quelques J). Nous avons représenté figure 2.1 le comportement de la susceptibilité longitudinale normalisée en fonction de la température pour différentes longueurs N de chaînes. On distingue sur la figure deux zones distinctes de comportements. Ces régions correspondent respectivement à une région que nous définirons comme quantique associée aux basses températures, située en dessous d'une température $T=0.5J$, et à une région que nous définirons comme classique au delà de $T=0.5J$. Ces deux régions sont reliées par une zone transitionnelle intermédiaire autour de $T=0.5J$.

Dans la région quantique, on distingue très nettement une très forte influence de la parité de taille sur la susceptibilité. Notamment, la susceptibilité est toujours plus forte pour les chaînes de longueur N impaire que pour les chaînes de longueur N paire. A très basse température, la susceptibilité devient nulle pour N pair alors qu'elle est finie pour N impaire. Ce comportement est associé au nombre quantique de spin S des états fondamentaux dans la mesure où se sont les seuls contribuant à la susceptibilité. Pour N pair, l'état fondamental d'une chaîne de spins $1/2$ est un singulet magnétique ($S=0$). Un tel état est insensible à un champ longitudinal B_z (couplage Zeeman nul sur le seul état disponible à cette échelle d'énergie). La susceptibilité magnétique longitudinale est donc nulle. Pour N impaire, en raison de l'invariance du système vis à vis du renversement de temps (théorème de Kramers), le niveau fondamental est au moins un doublet magnétique. Il est donc intrinsèquement sensible au champ magnétique et donne une susceptibilité finie. Nos calculs effectués montrent en l'occurrence que pour N impaire, le niveau fondamental est un quadruplet magnétique. Ainsi, il se manifeste de forts effets de parité dans la susceptibilité longitudinale dont l'origine vient de la forte différence de nature des états fondamentaux vis à vis des effets de parité (cf. § 1.1.3.a).

En analysant plus en détail cette région quantique, on constate que pour N pair, la susceptibilité normalisée est d'autant plus forte que N est élevé. Pour N impaire, la susceptibilité est d'autant plus faible que N est élevé. Cette distinction reflète à la fois la nature magnétique du fondamental et la diminution en $1/N$ du gap dû aux tailles finies. Pour N pair, la diminution du gap associé aux effets de taille finie rapproche les premiers niveaux excités magnétiques du fondamental. La contribution de ceux-ci à la susceptibilité pour une température donnée croît

donc proportionnellement à la décroissance du gap. En revanche, pour les chaînes de longueur N impaire, le fondamental quadruplet qui est composé de solitons de spins $1/2$ subit la contribution d'états excités triplets qui sont des solitons de spins 1 (deux solitons de spins couplés par paire) et sont moins susceptibles que le quadruplet. La susceptibilité décroît donc proportionnellement à la croissance de N . On peut ainsi s'attendre à un comportement uniforme et indépendant de la parité à la limite thermodynamique situé dans une partie intermédiaire entre les deux extrêmes des chaînes paires et impaires. Ce comportement est cohérent avec la limite thermodynamique (qui doit présenter une susceptibilité indépendante des effets de taille et/ou des conditions de bords) où l'état fondamental est singulet mais sans gap dans le spectre d'excitation. Il en résulte une susceptibilité longitudinale finie, comme prédite par les solutions de l'Ansatz de Bethe et confirmées par les extrapolations numériques.

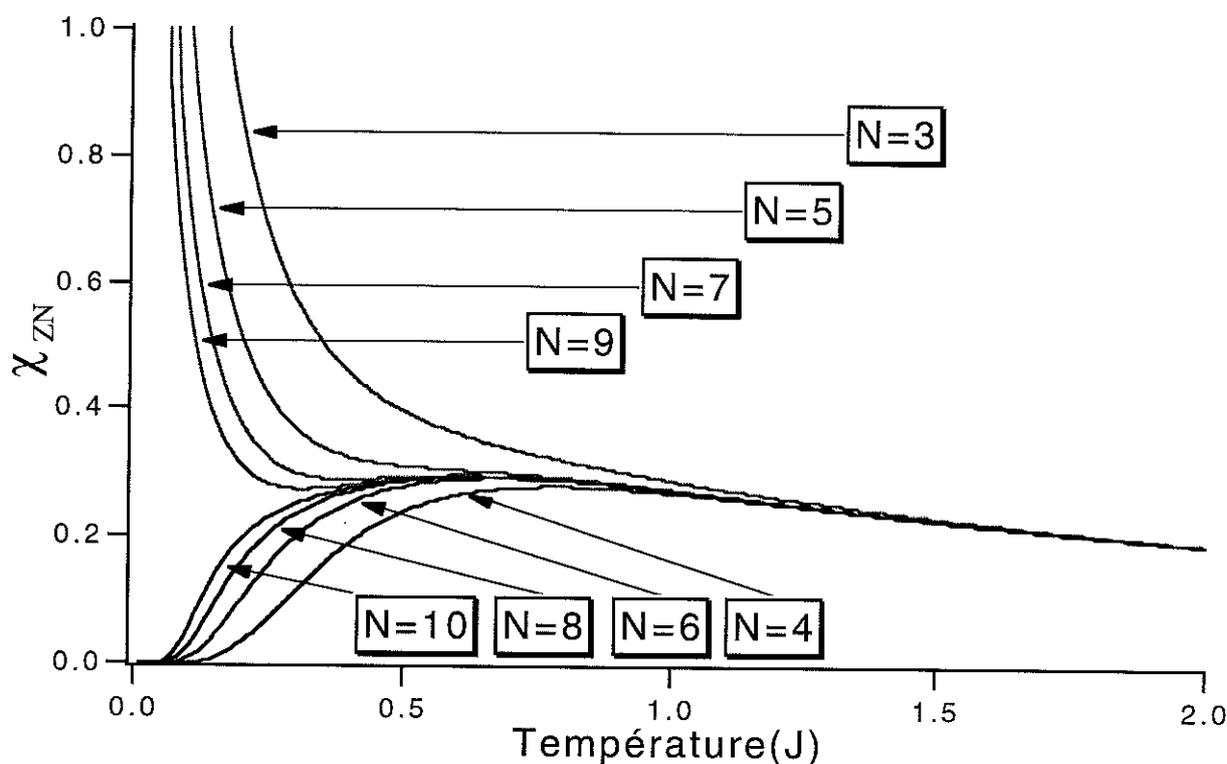


Fig. 2.1: Susceptibilité normalisée pour différentes longueurs de chaînes: cas XXX

Au delà de la région quantique très marquée, la zone que nous avons qualifiée d'intermédiaire est une région plus diffuse vis à vis des effets de parité. Elle présente notamment un maximum de la susceptibilité pour N pair, caractérisé par la bosse de la figure 2.2 qui est une caractéristique de la susceptibilité 1D antiferromagnétique. Ce comportement est d'autant plus accentué dans les chaînes finies où l'existence d'un gap dans le spectre d'excitation dû aux effets de taille associés à un état fondamental singulet donne une chute exponentielle de la susceptibilité à basse température. Pour N impaire, la susceptibilité passe également par ce maximum intermédiaire mais pour des valeurs de $N > 5$. Ces comportements persistent à la limite thermodynamique. Cette zone intermédiaire correspond à une zone de transition entre la région

des basses températures où l'influence du J est dominante et où tous les états ne sont pas peuplés et, la zone des plus hautes températures où tous les niveaux sont peuplés.

Au delà de ce maximum, la susceptibilité est paramagnétique, décroissante en température en $1/T$. La susceptibilité normalisée devient alors insensible aux effets de taille et de parité de taille observés à basse température.

Nous avons de même considéré une chaîne décrite par un hamiltonien de type XX correspondant à l'hamiltonien défini par l'expression (1.1) pour lequel la valeur du paramètre $\lambda=0$. Ce Hamiltonien est résolu exactement (cf. §1.2.2), par une procédure de fermionisation de Jordan-Wigner puis une bosonisation. Le diagramme de phase des excitations de basse énergie à la limite thermodynamique donne pour ce hamiltonien la phase XY équivalente thermodynamique du cas précédent, à savoir un état fondamental singulet et une absence de gap dans le spectre d'excitation (cf. §1.1.3.a). Nous avons représenté figure 2.2 le comportement en température de la susceptibilité normalisée du modèle XX périodique pour différentes tailles de longueur N de chaînes. L'analyse de la figure faite précédemment reste valable ici, à savoir l'existence de deux zones bien distinctes de comportements, différences observables notamment par l'influence de la parité et de la taille dans ces régions. On notera toutefois que les amplitudes observées ici sont beaucoup plus fortes que dans le cas précédent. Les deux régions distinctes sont également reliées par une région intermédiaire autour des bosses de susceptibilité.

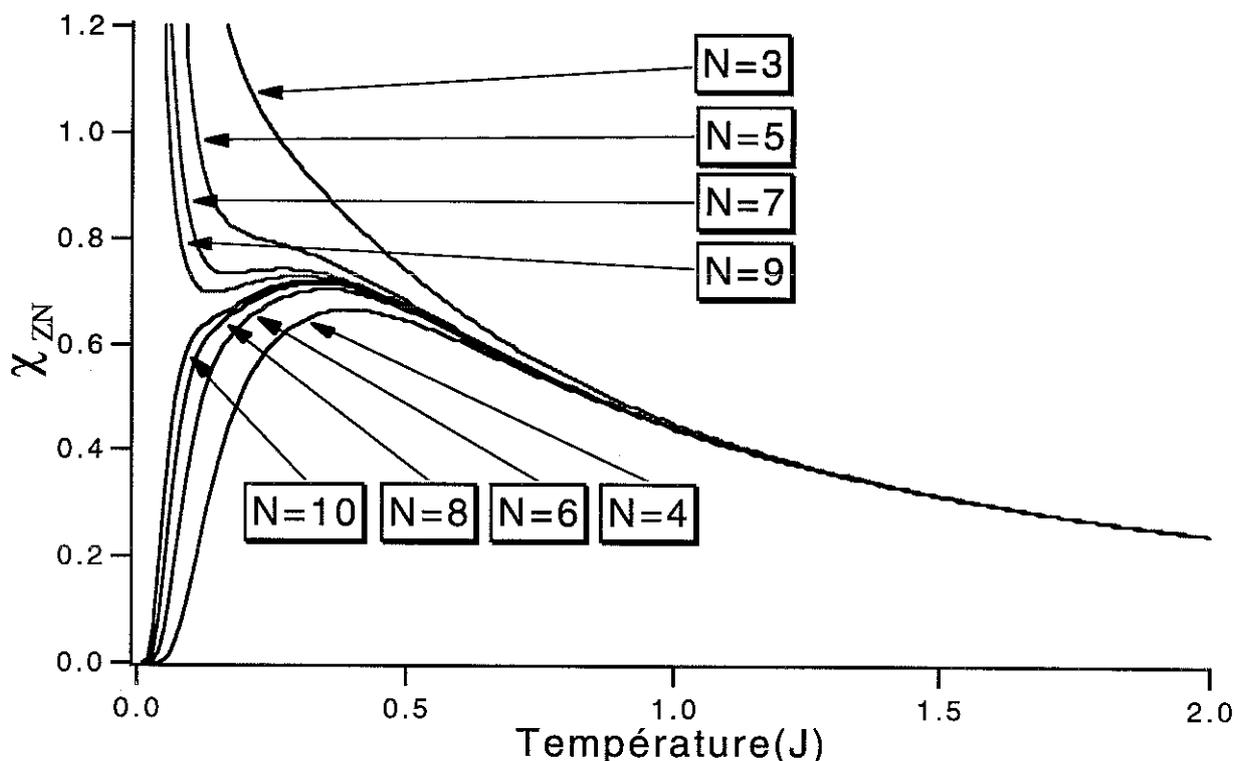


Fig. 2.2: Susceptibilité normalisée pour différentes longueurs de chaînes: cas XX

Dans la zone quantique, la susceptibilité dépend fortement de la taille et de la parité de taille. On distingue une fois de plus les chaînes de longueur N paire finies possédant un état fondamental singulet qui, associé au gap dans le spectre d'excitation dû aux tailles finies, donne une susceptibilité nulle. Comme dans le cas XXX, le respect du théorème de Kramers pour N impair donne au niveau fondamental un multiplet magnétique et donc une susceptibilité finie, indépendamment de l'existence ou non d'un gap. Dans le cas des chaînes impaires périodiques, conformément aux rappels du §1.1.3.a, le multiplet magnétique est un quadruplet magnétique, énergétiquement plus faible que celui issu du modèle XXX. L'influence de la taille sur la susceptibilité normalisée est grande. La susceptibilité est d'autant plus forte que N est élevé pour N pair alors que pour N impair, la susceptibilité est d'autant plus faible que N est élevé. On peut ainsi s'attendre également à un comportement uniforme et indépendant de la parité et de la taille à la limite thermodynamique. Cette susceptibilité doit être située dans une partie intermédiaire entre les deux extrêmes de nos chaînes de longueur N paire et impaire.

A plus haute température, la susceptibilité passe par un maximum pour les chaînes de longueur N paire et les longues chaînes impaires correspondant à la transition entre la zone où l'influence du J est prédominante et la zone de peuplement thermique. Si l'amplitude de la susceptibilité à température identique est plus forte pour la chaîne XX que pour la chaîne XXX précédente, la position moyenne du maximum est en revanche située à plus basse température. La position de ce maximum est de l'ordre de $T=0.3J$. Cette différence peut s'interpréter par une amplitude des énergies extrêmes du spectre d'excitation plus faible dans les systèmes finis pour les chaînes XX que pour les chaînes XXX.

Au delà du maximum, la susceptibilité normalisée acquiert un comportement de type paramagnétique, décroissant proportionnellement à $1/T$. Le peuplement thermique l'emporte alors sur l'influence de l'échange antiferromagnétique et les effets de taille et de parité de taille sont inexistantes.

2.2.2 Raideur de spin sous l'influence d'un déphasage aux bords de chaîne

Nous allons poursuivre cette étude de l'influence de la parité de taille sur les comportements thermodynamiques par l'analyse du comportement de la raideur de spin avec la parité. Afin de montrer qualitativement les types de comportements attendus, nous entamons cette partie par une étude numérique basée sur l'approche théorique faite par Loss et Maslov [Los 95].

Dans la mesure où certains résultats se répéteront par la suite (comportement à haute température, zone transitionnelle basse->haute température, plateaux, etc...), nous analyserons

dans le détail ici ces comportements, que nous ne ferons que rappeler sans les détailler dans les chapitres suivants.

Dans l'approche théorique nous servant de base d'étude, le paramètre angulaire permettant le calcul de la raideur de spin est défini par une condition de périodicité particulière. Loss et al. proposent en effet une périodicité tenant compte d'un déphasage local des opérateurs de spins, laissant la condition périodique (2.3) inchangée mais remplaçant l'expression (2.4) par l'expression suivante [Fât 93, Los 95]

$$S_{N+1}^{\pm} = e^{\pm i\theta} S_1^{\pm} \quad (2.8)$$

Cette condition s'applique de façon équivalente aussi bien aux spins 1/2 que, comme nous le verrons au chapitre 3, aux spins 1.

L'étude faite par Loss et al. porte sur l'influence de la parité de taille sur le comportement en température de la raideur de spin dans un anneau de taille mésoscopique. Cet anneau est décrit par un hamiltonien de type XXX antiferromagnétique défini par (2.5). Dans le cadre de cette étude, le cas des spins 1/2 est abordé par l'intermédiaire d'une double projection dans des systèmes physiques équivalents, une transformation de Jordan-Wigner (permettant de projeter le problème de spins décrit plus haut dans un problème de fermions sans spins) puis une bosonisation (permettant de traiter ce problème par une approche de type liquide de Luttinger) (cf. §1.2.2). Les résultats issus de cette double transformation prédisent un comportement en température présentant trois régimes distincts, se définissant en parallèle avec l'évolution de la température comme étant un régime quantique, un régime semi-classique et enfin un régime classique. Chaque régime se caractérise par une dépendance identique de la raideur de spin vis à vis de la parité du nombre de spins présents dans l'anneau. En l'occurrence, Loss et al. prédisent une raideur de spin négative (appelée 'dia') pour un nombre de spins impair et à l'inverse, une raideur de spin positive (appelée 'para') pour un nombre de spins pair. Comme nous l'avons précisé au §2.1, la raideur de spin mesure à la fois l'ordre et la stabilité d'un système vis à vis d'une fluctuation tendant à le déstabiliser. Un système sera d'autant plus raide qu'il sera ordonné. Il sera stable si la raideur est positive et instable si elle est négative. Si l'angle considéré est très faible, cette variation angulaire locale peut être considérée comme une petite fluctuation quantique ou une petite perturbation. En ce sens et dans ce cas précis, il est possible de raisonner, pour comprendre et prédire les comportements générés par la raideur de spin, sur les solutions du système non perturbé.

L'hamiltonien considéré dans nos diagonalisations exactes est représentable par la formule (2.5) avec les conditions de bords définies par les expressions (2.3) et (2.8). A titre indicatif, l'angle que nous avons choisi de prendre, ayant une valeur identique pour toutes nos études de raideur de spin, est de $\theta=10^{-3}$ Rad. L'allure générale de la raideur de spin normalisée

de la formule (2.2) en fonction de la température pour différentes tailles de chaînes est représentée figure 2.3. On y distingue deux régions de comportements distincts, en l'occurrence une région que nous qualifierons de région à comportement classique pour des températures $\geq 0.8J$ et une région de comportement quantique pour des valeurs de température $< 0.8J$. Une zone de transition assure la continuité en température entre ces deux régions au voisinage du point $0.8J$.

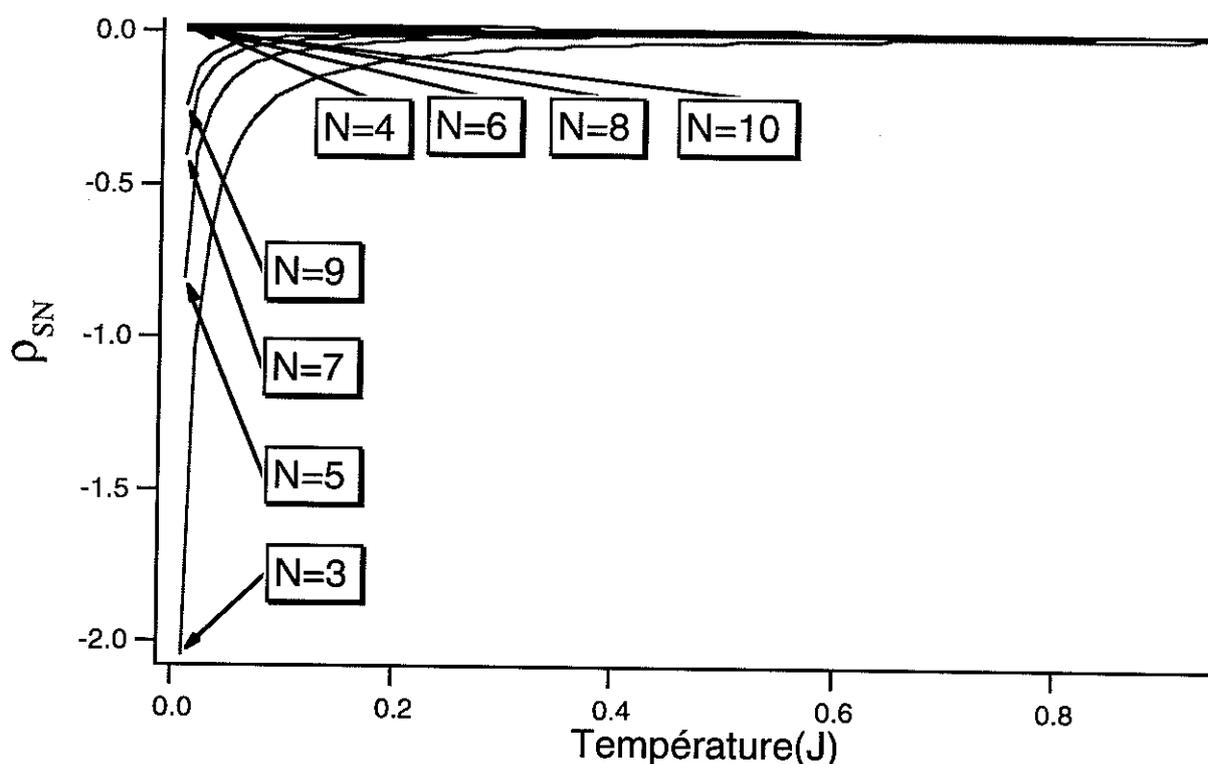


Fig. 2.3: Raideur normalisée pour un déphasage au bord de chaîne

La région quantique se caractérise notamment par des effets de parité de taille (chaînes de longueur N paire et impaire distinctes) ainsi que par des effets de taille (par exemple, les courbes pour $N=3,5,7,9$ sont distinctes) de la raideur de spin. A l'opposé, la zone classique ne présente aucun effet ni de parité, ni de taille. A la différence des prédictions faites par Loss et Maslov, on ne peut distinguer ici de région intermédiaire caractérisée par un comportement semi-classique original. Ceci peut se comprendre par la taille des systèmes considérés dans leur analyse, en l'occurrence mésoscopique, qui autorise plus probablement l'émergence d'un comportement de type semi-classique. Dans nos calculs, la petite taille des chaînes rend moins probable l'émergence de tels comportements.

Nous avons représenté figure 2.4 la raideur de spin dans la région quantique. Dans le cas des chaînes de longueur N impaire, la raideur de spin est négative, comme le prédit l'étude théorique. Comme nous l'avons précisé, à température fixée, une valeur négative de la raideur de spin signifie que le système est instable vis à vis du déphasage. En d'autres termes, le couplage

génère des excitations plus basses en énergie que le système dans son état sans la "torsion". Dans le cas présent d'une chaîne impaire de spins 1/2 pour le modèle XXX, le fondamental est un quadruplet. Comme les angles considérés sont petits, on peut considérer qu'ils correspondent aux états subissant la torsion. Les solitons étant par nature des états instables, ils donnent une raideur négative. La partie basse température de la figure 2.4 présente une amplitude de l'ordre de l'unité, d'autant plus faible (en valeur absolue) que le nombre de spins dans la chaîne est élevé. Cette évolution est celle d'une phase de quasi-ordre à la limite thermodynamique, ce qui est le cas pour le modèle XXX de spins 1/2 (les corrélations transverses diminuent algébriquement en $1/N$). La raideur passe ainsi de $\rho_{SN} \approx -2.1$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx -0.4$ pour $N=9$. On observe une décroissance (toujours en valeur absolue) en température de la raideur, qui dans le cas présent est très abrupte. Cette décroissance de la raideur avec la température est une caractéristique de celle-ci. Le peuplement des niveaux d'énergie par activation thermique, diminuant les corrélations transverses, rend le système moins raide. A suffisamment haute température, la raideur de spin devient nulle et aucun effet de taille ni donc de parité de taille n'existe .

Pour les chaînes de longueur N paire, la situation est différente. L'insert de la figure 2.4 représente un agrandissement de la région quantique pour ces chaînes paires. La raideur de spin est ici positive comme le prédit Loss et al. A température fixée, la perturbation amenée par la condition (2.8) ne déstabilise donc pas les états propres de l'hamiltonien XXX. Dans la région basse température, les chaînes de longueur N paire présentent une amplitude 100 à 1000 fois plus faible que les chaînes de longueur N impaire. L'évolution avec N est également celle d'une phase de quasi-ordre avec une raideur d'autant plus faible que la taille est grande. On constate dans la zone basse température que la décroissance de la raideur de spin intervient après un plateau où elle est constante, la largeur des plateaux étant d'autant plus petite que N est grand. L'existence de ces plateaux et leur évolution avec N est un comportement pour la raideur qui se répète dans nos systèmes. Ces plateaux reflètent les gaps existants dans nos chaînes dûs aux effets de taille finie et la raideur observée doit correspondre à celle du fondamental. On pourra remarquer que l'existence de gap n'étant pas réservée uniquement aux seuls effets de taille finie, l'observation de tels plateaux en température de la raideur est un moyen de caractérisation de gap. Nous déterminerons par la suite des exemples numériques de raideur normalisée que nous prendrons toujours au niveau de ceux-ci, quand ils existeront. Au niveau des plateaux, les valeurs passent ici de $\rho_{SN} \approx 21.10^{-3}$ pour $N=4$ à $\rho_{SN} \approx 7.10^{-3}$ pour $N=10$. Au delà des plateaux, la raideur normalisée décroît régulièrement due au peuplement thermique des niveaux, comme pour les cas impairs.

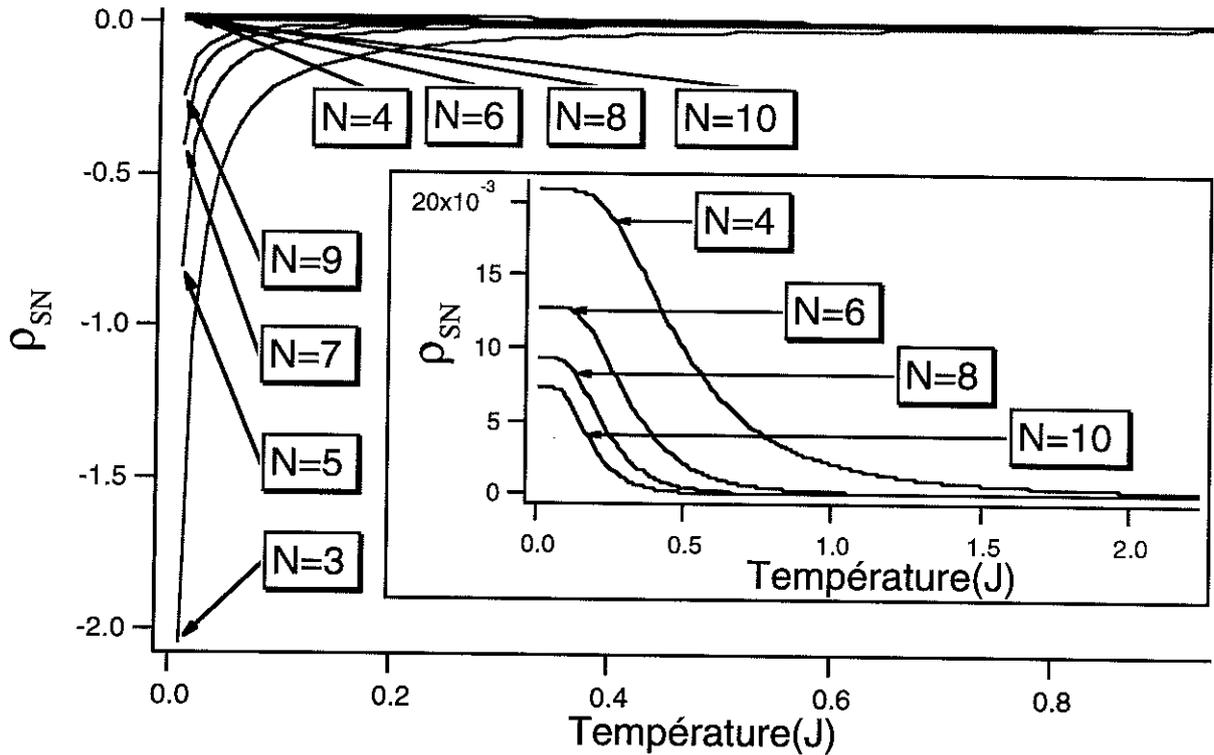


Fig. 2.4: Raideur de spin dans la région quantique

Afin de ne pas réitérer l'analyse des comportements à plus haute température, nous avons choisi de préciser le comportement de la raideur dans la partie basse température de la région de comportement classique, correspondant à la fin de la zone transitionnelle et au début de la région classique. Cette analyse nous permet de spécifier le passage de la région quantique à la région classique ainsi que de définir ce que nous appellerons par la suite le comportement classique de la raideur normalisée. Nous avons représenté figure 2.5 la raideur dans cette région. On remarquera que, bien que la zone représentée soit relativement étroite en température, le comportement de la raideur normalisée de spin y est représentatif de la zone intermédiaire et de la région classique. De plus, si un comportement de type semi-classique devait exister, conformément aux prédictions de Loss et al., il se manifesterait dans cette zone.

L'analyse de cette figure montre qu'à l'exception des chaînes à petit nombre de spins, la distinction entre chaînes de longueur N paire et impaire, tout comme les effets de taille, disparaissent. De plus, conformément au comportement attendu à plus haute température, la raideur de spin normalisée devient nulle. Les petites chaînes tendent vers une valeur également nulle à plus haute température que nous n'avons pas représentée ici. Aucun comportement de type semi-classique n'est observé dans cette zone transitionnelle, la taille de nos chaînes se révélant être trop faible pour de tels effets.

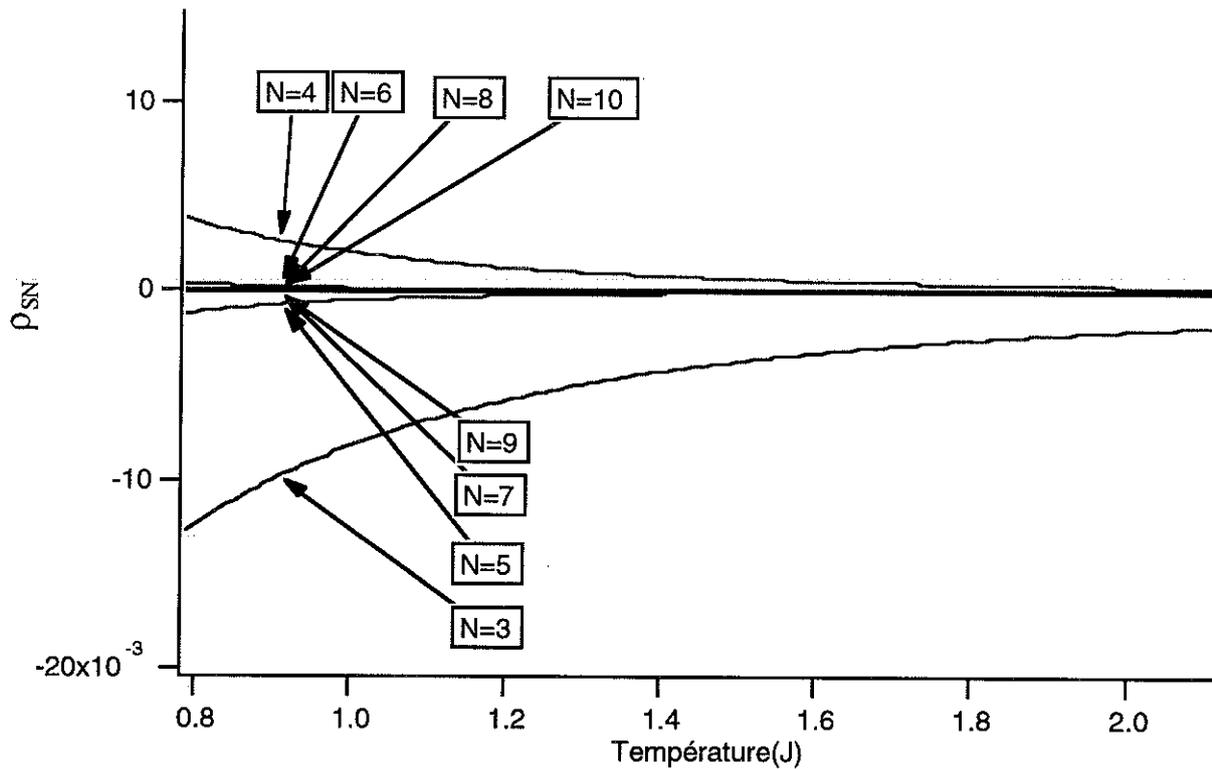


Fig. 2.5: Raideur normalisée dans la région des basses températures de la région classique

2.2.3 Raideur de spin sous l'influence de champs magnétiques aux bords de chaîne

En conservant la condition de périodicité traditionnelle définie par les conditions (2.3) et (2.4), nous allons dans ce paragraphe nous intéresser à la raideur de spin générée à partir d'une nouvelle forme de torsion, présentant comme précédemment une base expérimentale potentielle. Par l'application de champs magnétiques orthogonaux appliqués aux bords d'une chaîne, il est possible de créer une torsion au sein de la chaîne. Bien que la condition de bords périodiques puisse donner à cette forme de torsion un aspect saugrenu, elle garde une utilité tant théorique (quant à l'influence des conditions de bords sur la raideur de spin engendrée), que pratique (pouvant concerner des études faites sur les chaînes en anneaux de spins). Toutefois, la forme même de la torsion créée permet moins facilement de comprendre par un raisonnement intuitif la raideur engendrée et la dépendance qu'elle peut montrer vis à vis des effets de parité. Par hypothèse, nous supposons que l'axe de la chaîne correspond à l'axe y de notre repère d'axes et que chaque spin est numéroté de 1 à N .

Une chaîne décrite par l'hamiltonien (2.5) soumise à un fort champ magnétique B_z sur le premier spin (de façon à bloquer la chaîne à cette extrémité dans un état $m_{1z}=+1/2$) et à un faible champ magnétique orthogonal au précédent sur le dernier spin N , créé par hypothèse une faible torsion dans la chaîne. On peut noter que la symétrie $O(3)$ de l'hamiltonien XXX isotrope permet

de prendre le champ orthogonal aussi bien selon l'axe x que selon l'axe y . Par raison de simplicité numérique (évitant des termes imaginaires), nous avons considéré un champ appliqué dans la direction x .

Du fait de l'application du champ B_z sur le premier spin et du champ B_x sur le dernier spin, il faut tenir compte pour la diagonalisation de la contribution Zeeman à l'hamiltonien (2.5) qui prend la forme suivante

$$H_{\text{zeeman}} = g\mu_b (S_1^z B_z + S_N^x B_x) \quad (2.9)$$

La nature de la torsion ainsi créée nous permet de définir une raideur de spin normalisée associée au paramètre angulaire θ défini par l'expression suivante

$$\tan(\theta) = \frac{B_x}{B_z} \quad (2.10)$$

A titre indicatif, l'angle que nous avons généré ici possède la même valeur commune à toutes nos études de raideur de spin, soit $\theta=10^{-3}$ Rad.

Sur la base de cette nouvelle torsion, nous avons représenté figure 2.6 le comportement de la raideur de spin normalisée en fonction de la température pour différentes tailles de chaînes. Nous avons choisi une zone de température suffisamment large pour englober à la fois les effets de parité de taille à basse température, ainsi que l'évolution de la raideur à plus haute température. Comme précédemment, on peut distinguer deux régions caractéristiques de raideur correspondant à une petite région quantique subissant une forte influence d'effets de parité de taille et une large région classique indépendante des effets de taille. La raideur normalisée dans ces deux zones est positive, reflétant une stabilité vis à vis des fluctuations générées et décroissante avec la température.

Afin d'étudier plus spécifiquement la région quantique, la figure 2.7 représente la raideur normalisée dans la zone des basses températures. Il s'y reflète une séparation très nette de la raideur en fonction de la parité et du nombre de spins. La raideur est positive, toujours plus forte pour les cas impairs que pour les cas pairs. De même, la largeur des plateaux dépend fortement de la parité, avec des largeurs beaucoup plus fortes pour N pair que pour N impair. Pour N impair, la raideur à température fixée décroît d'autant plus que N augmente. Au niveau des plateaux, elle passe de $\rho_{SN} \approx 0.92$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx 0.82$ pour $N=9$. Pour N pair, et contrairement aux cas impairs, la raideur de spin à température fixée augmente d'autant plus que la taille est grande. Au niveaux des plateaux, on va de $\rho_{SN} \approx 0.48$ pour $N=4$ à $\rho_{SN} \approx 0.56$ pour $N=10$. Le fait que la raideur décroisse pour un nombre de spins impair et croisse pour un nombre pair suggère que la raideur doit converger vers une limite finie, de valeur intermédiaire, à la limite thermodynamique et à basse température.

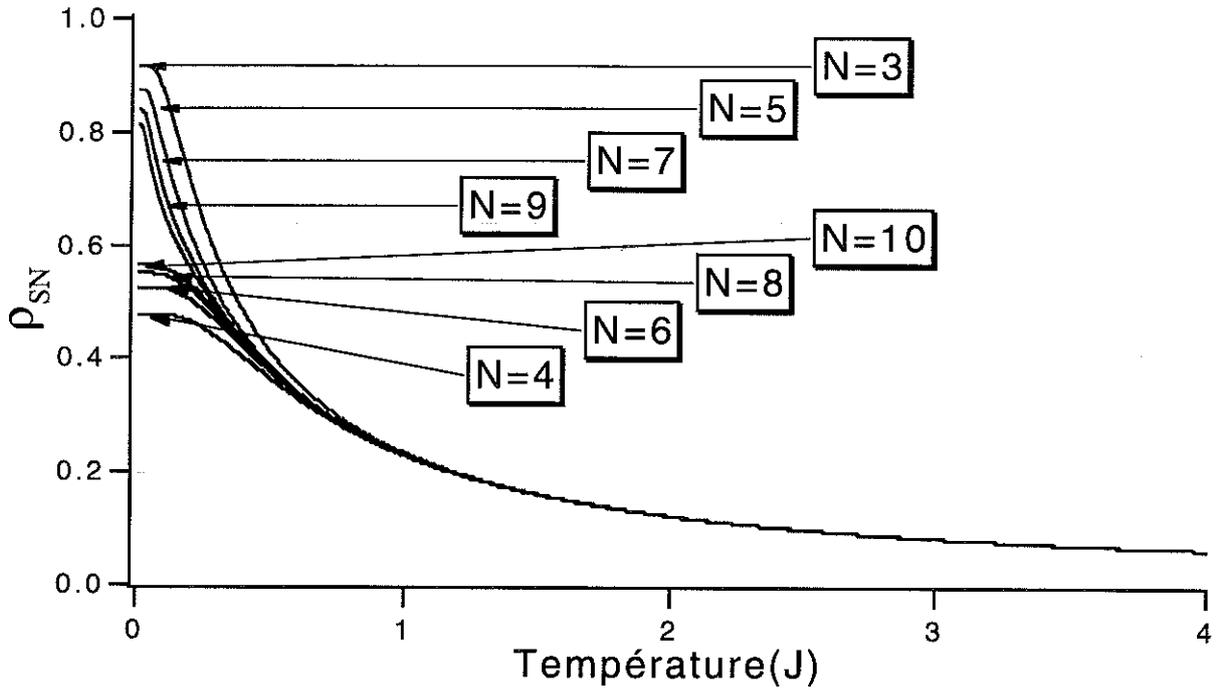


Fig. 2.6: Raideur normalisée pour une torsion créée par des champs magnétiques orthogonaux

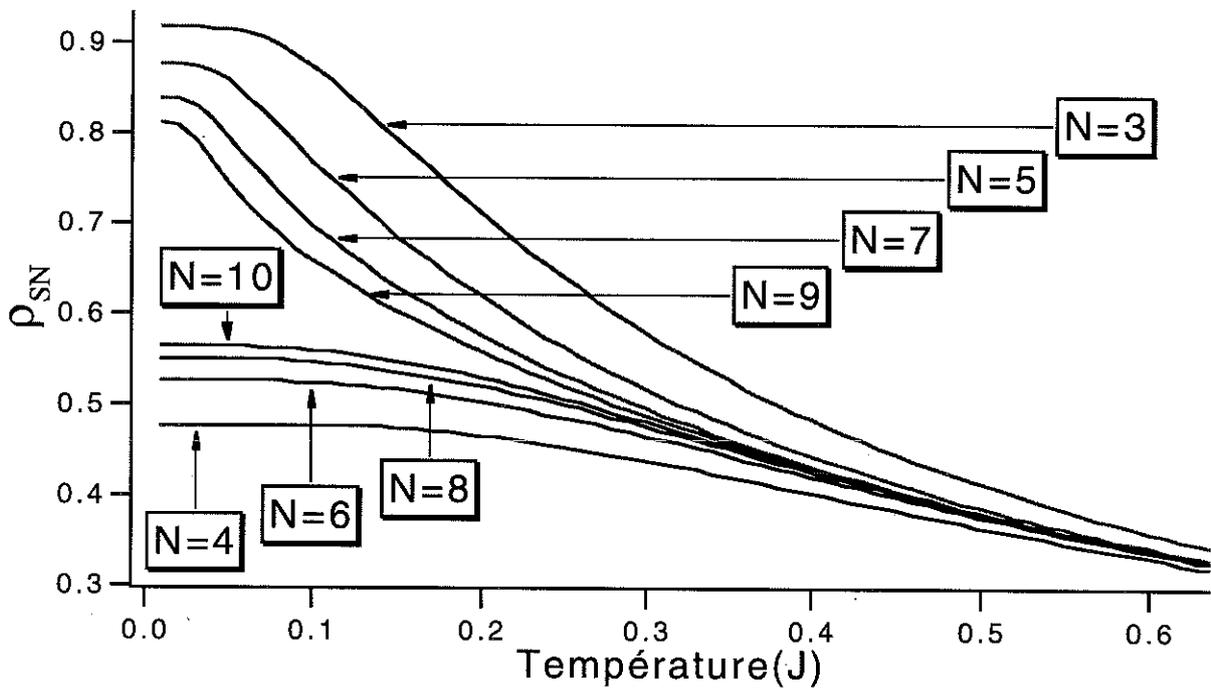


Fig. 2.7: Raideur de spin dans la région quantique.

Au delà d'une température de l'ordre de J , où la raideur de spin normalisée est $\rho_{SN} \approx 0.2$, le comportement devient classique, se caractérisant par une absence notable d'influence à la fois de la taille et de la parité de taille. A partir d'une température de l'ordre de $2J$, la faible décroissance de la raideur avec la température est quasiment linéaire. Elle tend vers une valeur nulle dans la limite des hautes températures conformément au comportement attendu.

2.3 Chaînes à conditions de bords ouvertes

Nous allons nous intéresser dans la suite de ce chapitre au cas des chaînes ouvertes. A ce titre, en reprenant le formalisme utilisé au début du §2.2, l'hamiltonien représentatif unidimensionnel XXX à N spins prend la forme générale suivante

$$H = J \sum_{i=1}^{N-1} \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} = J \sum_{i=1}^{N-1} H_{i,i+1} \quad (2.11)$$

où $J > 0$ dans le cas antiferromagnétique.

2.3.1 Effets de parité dans la susceptibilité longitudinale

Nous traiterons dans ce paragraphe la susceptibilité longitudinale normalisée définie au §2.2.1 considérée dans les chaînes ouvertes.

Afin de nous familiariser avec ces comportements, commençons par une chaîne décrite par un hamiltonien de spins 1/2 de type XXX avec conditions de bords ouvertes, décrite par l'hamiltonien d'expression (2.11). La figure 2.8 représente la susceptibilité normalisée en fonction de la température pour différentes tailles de chaînes. Comme pour le cas périodique équivalent, deux régions principales de comportement vis à vis des effets de parité émergent, régions que nous qualifierons encore une fois de quantique et de classique. Une zone de transition intermédiaire possédant un comportement difficilement analysable assure la continuité en température. A la limite thermodynamique, le diagramme de phase des excitations de basse énergie (cf. §1.1.3.a) présente un état fondamental singulet magnétique et sans gap pour les premiers états excités.

Dans la région quantique, les effets de parité et de taille sont très marqués, reflétant notamment les effets de parité associés majoritairement aux états fondamentaux. Ainsi, pour N pair, l'état fondamental est un singulet magnétique donnant une susceptibilité nulle due au gap dans le spectre (ceci n'est plus vrai à la limite thermodynamique). Pour N impair, le niveau fondamental correspond à un multiplet magnétique, générant naturellement une susceptibilité finie. Le multiplet magnétique est en l'occurrence ici un doublet. A température fixée, la taille des chaînes influe fortement sur la susceptibilité. Elle est d'autant plus forte que N est élevé pour N pair et inversement, d'autant plus faible que N est élevé pour N impair. Comme nous l'avons déjà défini dans le cas périodique, ces effets correspondent à la contribution progressive des états excités à la susceptibilité du fondamental. L'extrapolation à l'infini suggère, en première

hypothèse, une susceptibilité intermédiaire qui correspond au comportement attendu à la limite thermodynamique.

La zone transitionnelle présente un maximum pour les cas pairs pour une température voisine de $T=0.5J$, peu différente du cas périodique. Elle correspond à une zone de compétition entre l'échange et la température. Il est à noter que l'amplitude des maximums ainsi que la position de ceux-ci sont influencés fortement par les conditions de bords dans les petites chaînes alors qu'elles deviennent moins influentes pour les plus longues.

Au delà de la région quantique et de la zone de transition, le comportement de la susceptibilité normalisée devient paramagnétique, suivant une loi de Curie en $1/T$. Elle est indépendante de la taille et des effets de parité de taille du réseau de spins.

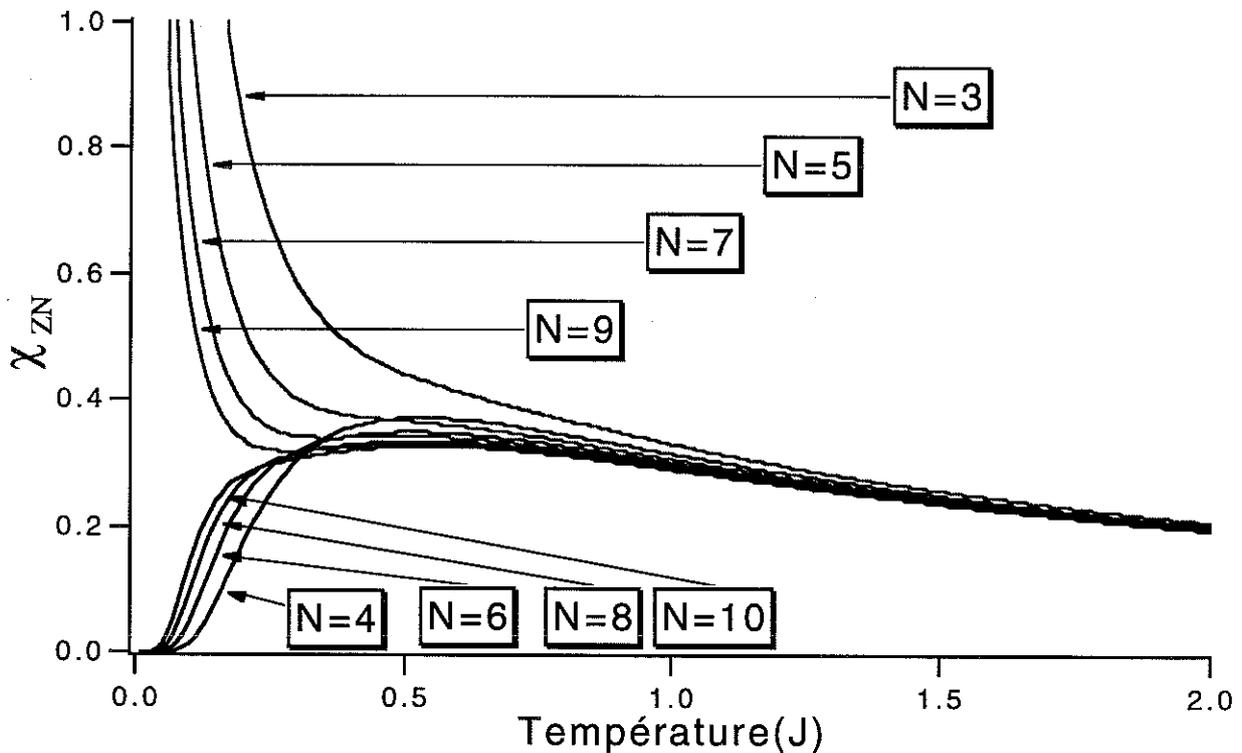


Fig. 2.8: Susceptibilité normalisée pour différentes longueurs de chaînes: cas XXX

Considérons maintenant le cas d'une chaîne ouverte de spins 1/2 définie par un hamiltonien de type XX, décrite également par la forme (2.11) mais privée de la partie selon l'axe z. La susceptibilité normalisée pour ce cas spécifique en fonction de la température est représentée figure 2.9 pour différentes tailles de chaînes. Comme dans le cas du passage d'une chaîne décrite par un hamiltonien XXX à un hamiltonien XX (cf. §2.2.1), l'amplitude de la susceptibilité, à température équivalente, est plus forte dans le cas XX que dans le cas XXX. La position du maximum y est cependant plus basse en température que dans le cas XXX. On distingue encore une fois deux régions bien distinctes de comportements vis à vis des effets de

parité et de taille (quantique et classique), reliées par une zone transitionnelle aux comportements plus diffus. La taille finie génère un gap dans le spectre d'excitation, écartant ainsi le système du comportement à la limite thermodynamique où le fondamental est un singulet et le spectre d'excitation sans gap.

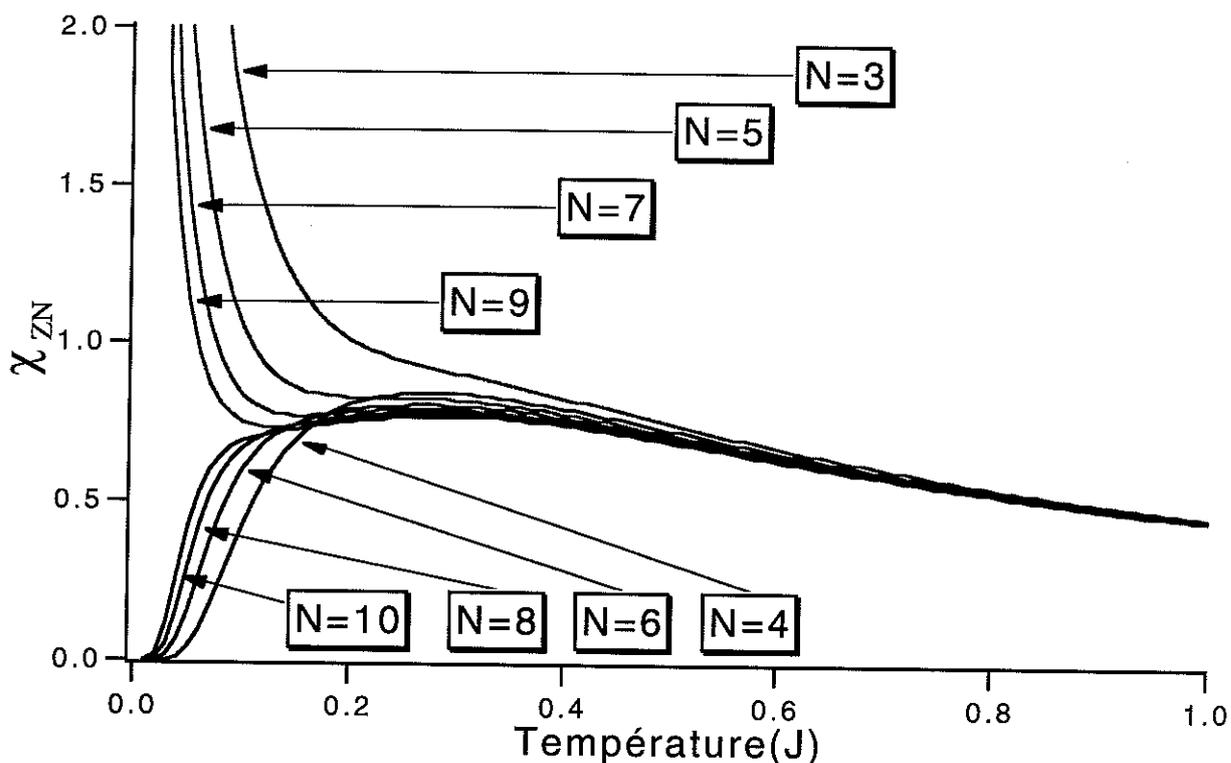


Fig. 2.9: Susceptibilité normalisée pour différentes longueurs de chaînes: cas XX

Dans la région quantique, la susceptibilité présente de forts effets de parité associés aux influences de la parité de taille sur les états magnétiques fondamentaux. Ces derniers correspondent à un singulet magnétique pour les chaînes de longueur N paire et un multiplet magnétique qui est un doublet pour les chaînes de longueur N impaire. En tenant compte de l'existence d'un gap dans le spectre d'excitation dû aux effets de taille finie, la susceptibilité à basse température donne, dans le cas limite $T=0$, une valeur nulle pour les chaînes de longueur N paire et finie pour les chaînes de longueur N impaire. Les effets de taille sont similaires aux cas précédents, avec une susceptibilité d'autant plus forte (faible) que N est élevé dans les cas pairs (impairs).

Au delà du maximum de position relative $T \approx 0.3J$ caractérisant la zone intermédiaire, le peuplement thermique des différents niveaux donne une susceptibilité normalisée de type paramagnétique, décroissante en $1/T$. La susceptibilité normalisée devient indépendante des effets de parité et de taille, traduisant une diminution des corrélations longitudinales avec la température.

2.3.2 Raideur de spin sous l'influence de champs magnétiques aux bords de chaîne

Nous avons défini au paragraphe 2.2.2 le cas d'une torsion créée par des champs magnétiques orthogonaux appliqués aux extrémités d'une chaîne, cette dernière étant soumise à des conditions de périodicité définies par les relations (2.3) et (2.4). Nous allons dans ce paragraphe nous intéresser à la même forme de torsion générée mais pour une chaîne soumise à des conditions de bords ouvertes. Cette étude se veut être notamment une étude comparative de l'influence de la condition de bords pour une telle torsion.

Par analogie aux précédentes études, nous avons représenté figure 2.10 l'allure générale de la raideur de spin normalisée dans une région de température suffisamment large pour englober à la fois la région quantique et la région classique. Si l'on compare les allures générales des comportements à celles du cas périodique de la figure 2.6, la seule différence notable observée ici se déroule dans la zone quantique. Notamment, on constate un rapprochement entre les niveaux de raideur des valeurs de N paires et impaires conservant toutefois les effets de parité.

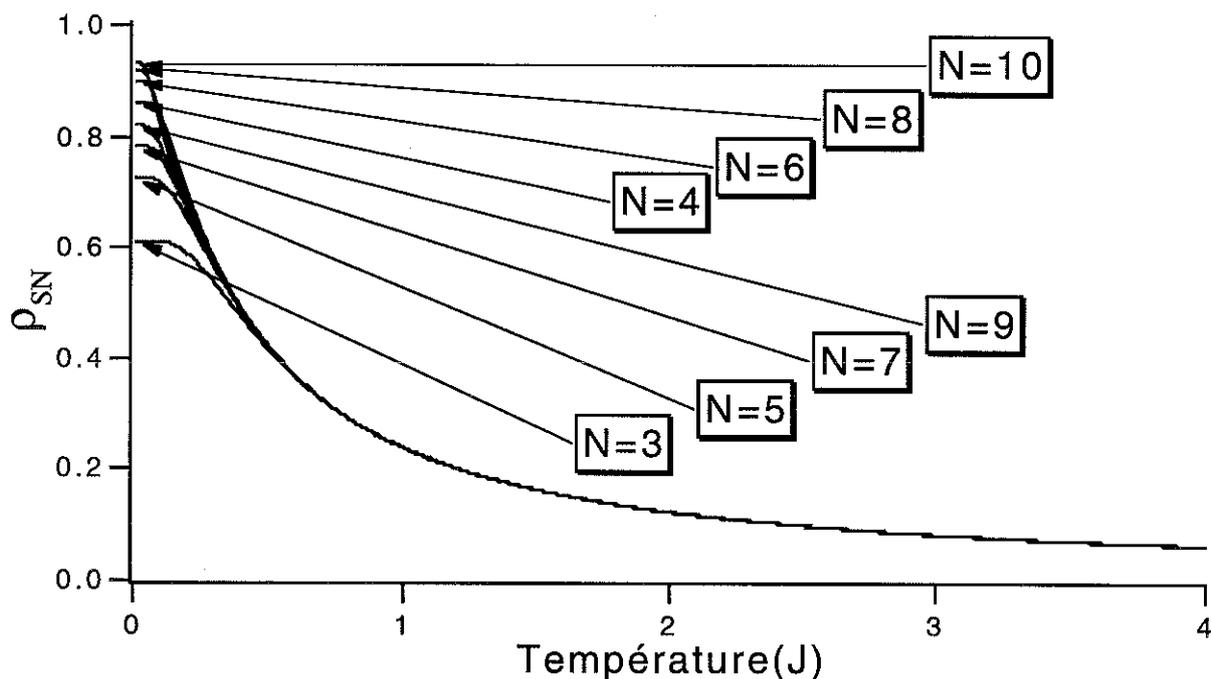


Fig. 2.10: Raideur normalisée pour une torsion créée par des champs magnétiques orthogonaux

Dans la région classique, la décroissance de la raideur suit les mêmes tendances que le cas périodique. Elle décroît régulièrement avec l'augmentation de température et on ne peut y distinguer d'effets de parité de taille ni d'effets de taille. L'unique courbe restante converge vers la raideur nulle à plus haute température.

Afin de préciser d'avantage l'analyse à basse température, nous avons représenté à la figure 2.11 la raideur dans la zone de comportement quantique. Il s'y manifeste de forts effets de parité de taille. La raideur pour tous les N pairs est plus forte, à très basse température, que pour tous les N impairs. Ce comportement est opposé à celui observé lors du cas périodique. La distinction entre chaîne de longueur N paire et impaire se manifeste également dans la largeur des plateaux observés qui sont plus larges pour les chaînes de longueur N impaire que pour les chaînes de longueur N paire. Ce comportement est également opposé au cas périodique traité au §2.2.2.

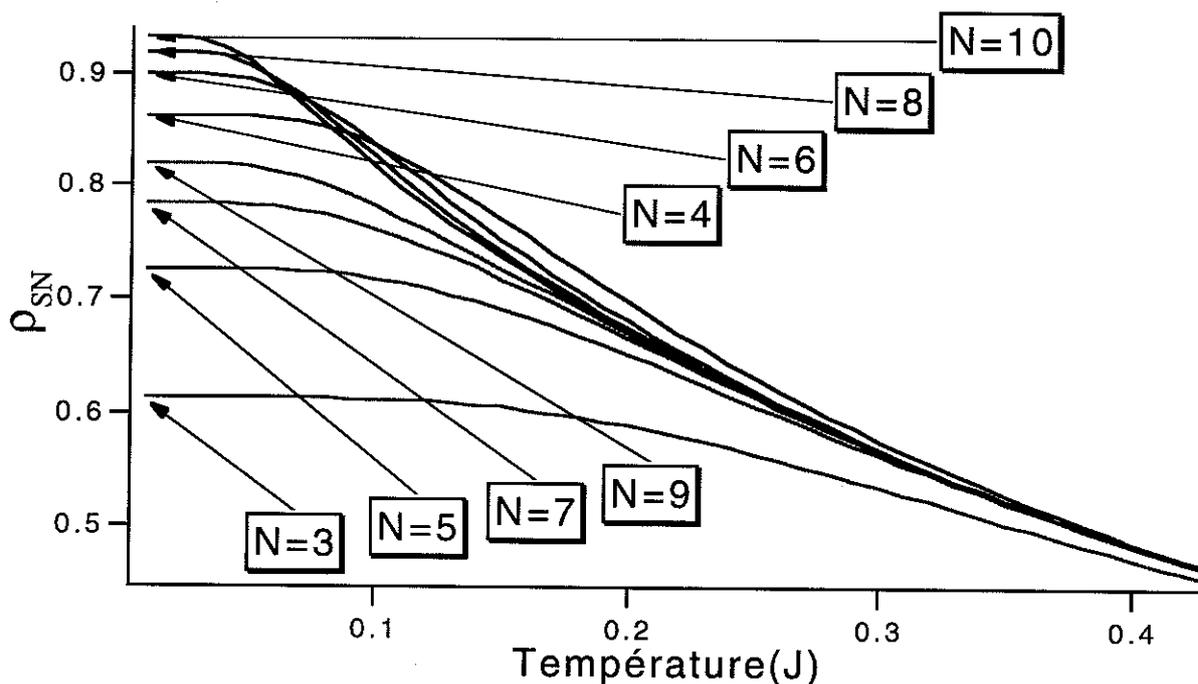


Fig. 2.11: Raideur de spin dans la région quantique

Dans le cas des chaînes paires et à basse température, la raideur est d'autant plus forte que N est grand. Cette tendance laisse supposer que l'on génère une phase d'autant plus ordonnée quand N croît. On passe ainsi au niveau des plateaux de $\rho_{SN} \approx 0.86$ pour $N=4$ à $\rho_{SN} \approx 0.94$ pour $N=10$. Cette tendance change cependant avec l'augmentation de température où la hiérarchie s'inverse à partir d'un point de croisement des courbes. Cette distinction de comportement est liée à la forte décroissance de la largeur des plateaux avec N pour N pair. Ainsi, pour $N=10$, le régime de décroissance commence beaucoup plus bas en température que celui du cas $N=4$. La courbe de raideur de $N=10$ croise celle du cas $N=4$ quand celui-ci commence juste à s'écarter de son plateau. Ce point de croisement doit disparaître cependant quand N croît. Contrairement à la susceptibilité, le passage chaîne ouverte \rightarrow chaîne périodique montre une forte dépendance de la raideur vis à vis des conditions de bords.

Dans le cas des chaînes de longueur N impaire, en accord aux cas pairs (mais en opposition aux cas impairs des chaînes périodiques), la raideur normalisée est d'autant plus forte

que N est élevé. Cette croissance au niveau des plateaux donne des points allant de $\rho_{SN} \approx 0.62$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx 0.82$ pour $N=9$. On ne constate pas de renversement de hiérarchie, contrairement aux cas pairs. Ceci se comprend sur la base de l'analyse des cas pairs car la largeur de ceux-ci est beaucoup plus faible ici. Les régimes de décroissance commencent dans une région de température plus restreinte et aucune courbe ne peut rattraper l'autre.

2.3.3 Chaîne semi-contrainte

Nous allons dans la suite de ce chapitre nous intéresser à la raideur de spin normalisée dans le cas de chaînes soumises à des contraintes. Les contraintes considérées ici simulent un blocage de spin quantique dans une direction que nous prendrons selon l'axe de quantification. Ce type de contrainte peut se comprendre physiquement comme résultant d'un fort champ magnétique appliqué sur une extrémité de la chaîne ou, d'un blocage dû à l'interface de couches minces magnétiques. Toutefois, comme nous l'avons précisé à propos des contraintes de champs, la semi-contrainte peut rendre difficilement compréhensible (sauf cas particulier) certains comportements de la raideur dans le détail. Nous essayerons donc de dégager les principales caractéristiques que la raideur de spin permet de déduire relativement aisément.

Nous définirons par chaîne semi-contrainte une chaîne de $N+1$ spins considérée comme bloquée quantiquement (sur son axe de quantification) à l'une de ses extrémités, l'autre étant laissée sans contrainte. Le paramètre angulaire θ nécessaire au calcul de la raideur de spin s'obtient en faisant une rotation sur le spin bloqué (rotation de l'axe de quantification).

Considérons l'hamiltonien XXX à $N+1$ spins défini par (2.11). Le terme de couplage supplémentaire $H_{N,N+1}$ décrivant le couplage spécifique avec le spin bloqué s'exprime à l'aide des opérateurs d'échelle S^+ et S^- sous la forme

$$H_{N,N+1} = \vec{S}_N \vec{S}_{N+1} = S_N^z S_{N+1}^z + \frac{1}{2} (S_N^+ S_{N+1}^- + S_N^- S_{N+1}^+) \quad (2.12)$$

Représentons par $|S\rangle$ l'état quantique du spin $N+1$ dans la direction de quantification selon l'axe z de notre chaîne (dans le cas des spins $1/2$, $S=1/2$) sur lequel nous voulons effectuer une rotation d'un angle θ autour de l'axe y dans le plan (xOz) (en prenant ici par convention l'axe de la chaîne le long de l'axe y). Par l'intermédiaire de cette rotation, l'état bloqué $|S\rangle$ donne un nouvel état bloqué $|\Psi\rangle$.

L'état $|\Psi\rangle$ peut s'exprimer, à l'aide de la relation de fermeture dans la base des spins de ce nouvel état (défini par un nouveau système d'axes propres x_1, y_1 et z_1) et de l'opérateur de rotation (cf. Annexe), par la relation générale suivante

$$|\psi\rangle = \sum_m |m\rangle \langle m|\psi\rangle = \sum_m |m\rangle \langle m|D(0, \theta, 0)|S\rangle \quad (2.13)$$

avec m représentant une valeur propre associée à S^z (sur son système d'axes propres définis par x_1, y_1 et z_1) pour le spin $N+1$. En conservant les expressions de l'annexe, les opérateurs $D(0, \theta, 0)$ donnent les éléments de matrices suivants

$$d_{mS}^S(-\theta) = \langle m|D(0, \theta, 0)|S\rangle \quad (2.14)$$

Les expressions des kets et des bras donnent dans ce formalisme (en respectant les propriétés des matrices de rotation)

$$|\psi\rangle = \sum_m d_{mS}^S(-\theta)|m\rangle \quad (2.15)$$

$$\langle\psi| = \sum_{m'} d_{Sm'}^S(\theta)\langle m| \quad (2.16)$$

En tenant compte du blocage et de la rotation, les opérateurs S_{N+1}^z , S_{N+1}^+ , et S_{N+1}^- sont remplacés dans (2.12) par les nombres suivants

$$\begin{aligned} \langle\psi|S_{N+1}^z|\psi\rangle &= C_{N+1}^z \\ \langle\psi|S_{N+1}^+|\psi\rangle &= C_{N+1}^+ \\ \langle\psi|S_{N+1}^-|\psi\rangle &= C_{N+1}^- \end{aligned} \quad (2.17)$$

dont la forme analytique générale est la suivante

$$\begin{aligned} C_{N+1}^z &= \sum_m \left(d_{Sm}^S(\theta) \right)^2 \\ C_{N+1}^+ &= \sum_m d_{Sm+1}^S(\theta) d_{Sm}^S(\theta) \langle m+1|S_{N+1}^+|m\rangle \\ C_{N+1}^- &= \sum_m d_{Sm-1}^S(\theta) d_{Sm}^S(\theta) \langle m-1|S_{N+1}^-|m\rangle \end{aligned} \quad (2.18)$$

Ainsi, le terme de couplage supplémentaire (2.12) peut s'écrire sous la forme suivante

$$H_{N,N+1} = C_{N+1}^z S_N^z + \frac{1}{2} \left(C_{N+1}^- S_N^+ + C_{N+1}^+ S_N^- \right) \quad (2.19)$$

où les opérateurs pour le spin bloqué ont été remplacés par des nombres. On remarque que le blocage suivi de la rotation dans le plan (xOz) transforme l'hamiltonien (2.12) à 2 sites en hamiltonien (2.19) à 1 site. L'espace de Hilbert d'un hamiltonien de $N+1$ spins $1/2$ soumis à une semi-contrainte est réduit de la dimension 2^{N+1} à la dimension 2^N . La diagonalisation d'un hamiltonien à $N+1$ spins revient, du fait de la contrainte de blocage du spin $N+1$, à diagonaliser un hamiltonien à N spins. Ce blocage revient ainsi à appliquer un couplage spécifique sur le N ième spin .

Les nombres C_{N+1}^z , C_{N+1}^+ et C_{N+1}^- définis par l'expression (2.19) se déterminent analytiquement à l'aide du formalisme des matrices de rotation (cf. Annexe). Dans le cas des spins $S=1/2$ où $m=\{-1/2,1/2\}$ et à l'aide des résultats de l'annexe, les expressions (2.18) prennent les valeurs suivantes

$$\begin{aligned} C_{N+1}^z &= \frac{\text{Cos}(\theta)}{2} \\ C_{N+1}^+ &= \frac{\text{Sin}(\theta)}{2} \\ C_{N+1}^- &= \frac{\text{Sin}(\theta)}{2} \end{aligned} \quad (2.20)$$

Nous avons jusqu'à présent caractérisé l'influence de la contrainte et du paramètre angulaire sur les termes de l'hamiltonien indépendamment de la valeur de l'échange et de l'angle de torsion considéré. Comme les chaînes étudiées sont antiferromagnétiques, l'angle θ reste le seul paramètre libre qu'il nous faut fixer. Dans le cas des systèmes semi-contraints et contraints, deux définitions principales de raideur de spin peuvent être générées. La définition de l'angle θ reflétant l'écart à l'axe z du spin bloqué étant indépendant du terme de couplage antiferromagnétique, il peut respecter ou non l'alternance antiferromagnétique. La raideur de spin normalisée traitée dans la suite de ce paragraphe (que nous considérerons comme "normale") sera par définition celle dont la contrainte sur le dernier spin respecte l'alternance antiferromagnétique des spins. Une condition d'angle frustrant le respect de l'alternance antiferromagnétique sera dans ce cas appelée "anormale"(antipériodique).

Ainsi, pour une chaîne semi-contrainte de spins 1/2, si l'on considère le premier spin en position 'up', l'angle du dernier spin à considérer sera θ pour les chaînes de longueur $N+1$ impaire et $\theta+\pi$ pour les chaînes de longueur $N+1$ paire. De plus, le paramètre N utilisé pour dimensionner les chaînes sera, comme dans tous les cas discutant des systèmes soumis à des contraintes, relatif au nombre de spins non contraints pour la chaîne de dimension $N+1$. La distinction entre N et $N+1$ est importante pour toute analyse en termes d'effets de parité des états fondamentaux.

Afin d'appliquer concrètement le formalisme présenté, la chaîne semi-contrainte la plus simple à laquelle nous nous soyons intéressés correspond à une chaîne décrite par un hamiltonien XXX. Les résultats de la raideur normalisée issus des calculs numériques sont représentés figure 2.12. Quelque soit la valeur du nombre N considéré, on observe que la raideur de spin normalisée est nulle pour toutes les températures. Ce comportement peut se comprendre par la nature de l'action physique créée à notre extrémité. En effet, le blocage exercé sur le spin $N+1$ et la rotation associée ne créent qu'une torsion locale dans la chaîne, revenant ainsi à renormaliser la valeur du spin N . L'absence de torsion globale, en tenant compte de la faible valeur de θ , n'engendre qu'une variation d'énergie libre inférieure au bruit numérique. La

définition de la raideur de spin étant basée sur la méthode des torsions, l'absence de torsion globale suffisamment forte implique qu'aucune raideur n'émerge du bruit numérique. On peut noter cependant que la raideur nulle ici est de nature physique différente de celle vue dans les cas classiques à haute température qui, elle, est due au peuplement thermique des états propres.

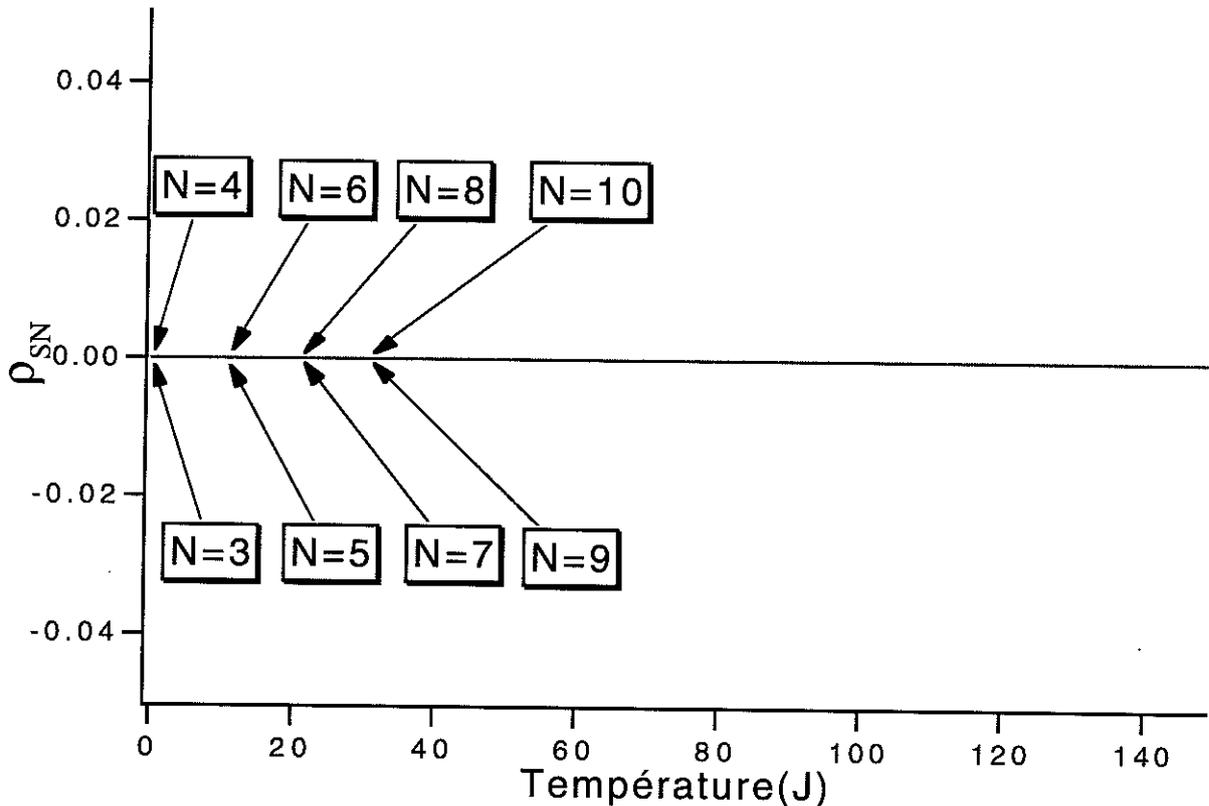


Fig. 2.12: Raideur normalisée pour une chaîne XXX semi-contrainte

Afin de créer une torsion effective dans la chaîne, nous avons introduit une anisotropie d'échange. Cette anisotropie donne une contribution plus forte aux termes hors diagonaux de l'hamiltonien, permettant ainsi de faire émerger la raideur de spin au dessus du bruit numérique. Nous avons choisi de caractériser les effets de parité de taille dans l'hamiltonien du modèle XXZ. Le diagramme de phase de basse énergie de cet hamiltonien figure 1.9 se caractérise par l'existence de deux phases selon la valeur du rapport J_X/J_Z des échanges (suivant les axes respectifs de la chaîne où nous prendrons par convention $J_X=1J$). Le point particulier donnant l'hamiltonien XXX est un point limite séparant une phase Antiferro pour $J_Z > J_X$ dont le cas limite est Ising et une phase XY pour $J_Z < J_X$ dont la limite dans le cas antiferromagnétique est XY. On peut ainsi s'attendre à des propriétés particulières de la raideur de spin dues aux phases générées et des effets de parité potentiellement associés à celles-ci. Dans la phase Antiferro, pour les chaînes finies et ouvertes, les états fondamentaux sont des doublets quelque soit la parité. Dans la phase XY, l'état fondamental est singulet pour $N+1$ pair et un doublet pour $N+1$ impair. Dans les deux cas, le gap des effets de taille finie éloigne le comportement de certaines propriétés à la limite thermodynamique. La contrainte appliquée modifie quant à elle le spectre énergétique.

Dans la mesure où les comportements classiques ne présentent généralement pas de propriétés spécifiques liés aux parités de taille et que la raideur normalisée y est nulle à haute température, nous limiterons les figures présentées dans la suite de ce chapitre aux seuls cas des basses températures (en unité de J).

Au titre d'une étude proche du point particulier XXX de changement de phase, nous avons représenté figure 2.13 le comportement de la raideur de spin normalisée pour le cas spécifique d'une chaîne de type légèrement Antiferro pour $J_x/J_z=0.99$ (soit 1 % d'échange en moins dans le plan XY). Ce point correspond sur la figure 1.9 au point $\lambda=1.01$. Bien que cette anisotropie soit faible, la raideur engendrée est faible (comparativement à celles déjà observées) mais suffisamment forte pour donner une raideur prépondérante au bruit numérique. Dans la gamme de température choisie (région quantique), elle est positive et présente des effets de parité de taille distinguant bien les cas N pairs et N impairs. Les valeurs de N impaires ont notamment une raideur normalisée toujours plus forte que les N pairs. Pour N pair, les courbes présentent des plateaux associés au gap de taille finie. La raideur normalisée est d'autant plus forte que N est élevé et passent pour les plateaux de $\rho_{SN}\approx 0.85 \cdot 10^{-3}$ pour $N=4$ à $\rho_{SN}\approx 1.03 \cdot 10^{-3}$ pour $N=10$. Pour N impair en revanche, les plateaux se confondent à basse température, avec pour valeur $\rho_{SN}\approx 1.25 \cdot 10^{-3}$. Ce comportement suggère que l'état fondamental possède une raideur si forte qu'elle est insensible à la taille, comportement attendu pour un système ordonné. Pour N impair correspond une chaîne de dimension $N+1$ paire. Le blocage a probablement figé l'état fondamental pour $N+1$ pair dans la phase antiferro (un comportement "anormal" d'angle θ devrait s'accompagner dans ce cas des courbes négatives et symétriques par rapport à l'axe des températures, ce qui a été observé numériquement). Pour N pair en revanche, l'état fondamental est sensible à l'évolution de N et ne serait pas ordonné. A partir de ces plateaux, la raideur diminue progressivement avec la température. Au dessus de $0.5J$, le comportement devient classique avec une décroissance en température indépendante de N , tendant vers une valeur commune nulle à plus haute température.

Nous venons de préciser que la faiblesse de la raideur observée était probablement due à la petitesse de l'anisotropie imposée. Sous cette hypothèse, l'augmentation de cette anisotropie d'échange doit être accompagnée d'une augmentation de la raideur observée. Afin de préciser ce point, nous avons considéré une anisotropie plus forte en prenant pour le rapport des échanges la valeur $J_x/J_z=0.9$, soit $\lambda=1.1$ figure 1.9. La raideur normalisée pour ce cas est représentée figure 2.14. Comme nous pouvons le constater, l'allure générale et donc l'analyse qualitative faite précédemment est identique au cas $J_x/J_z=0.99$, avec pour seule variation notable l'amplitude de la raideur qui y est accrue. Elle est en l'occurrence multipliée par un facteur 10 dans le cas des chaînes où N est pair mais par un facteur légèrement inférieur à 10 dans le cas où N est impair. Les effets de parité persistent. Il existe encore une convergence des plateaux pour N impair. Le comportement à haute température est classique, indépendant de N , tendant régulièrement vers

zéro. Le point de transition zone quantique \rightarrow zone classique reste de l'ordre de $T=0.5J$, ne subissant pas un facteur 10.

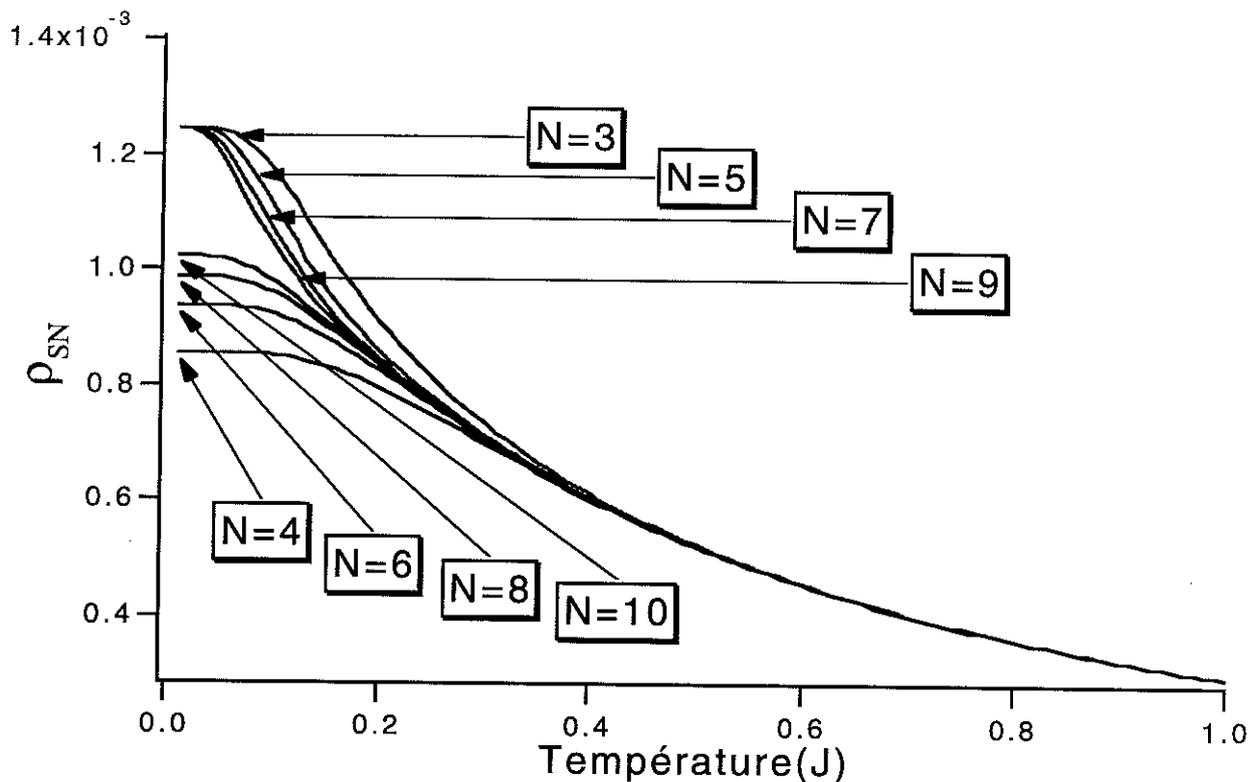


Fig. 2.13: Raideur normalisée pour une chaîne XXZ semi-contrainte avec $J_x/J_z=0.99$

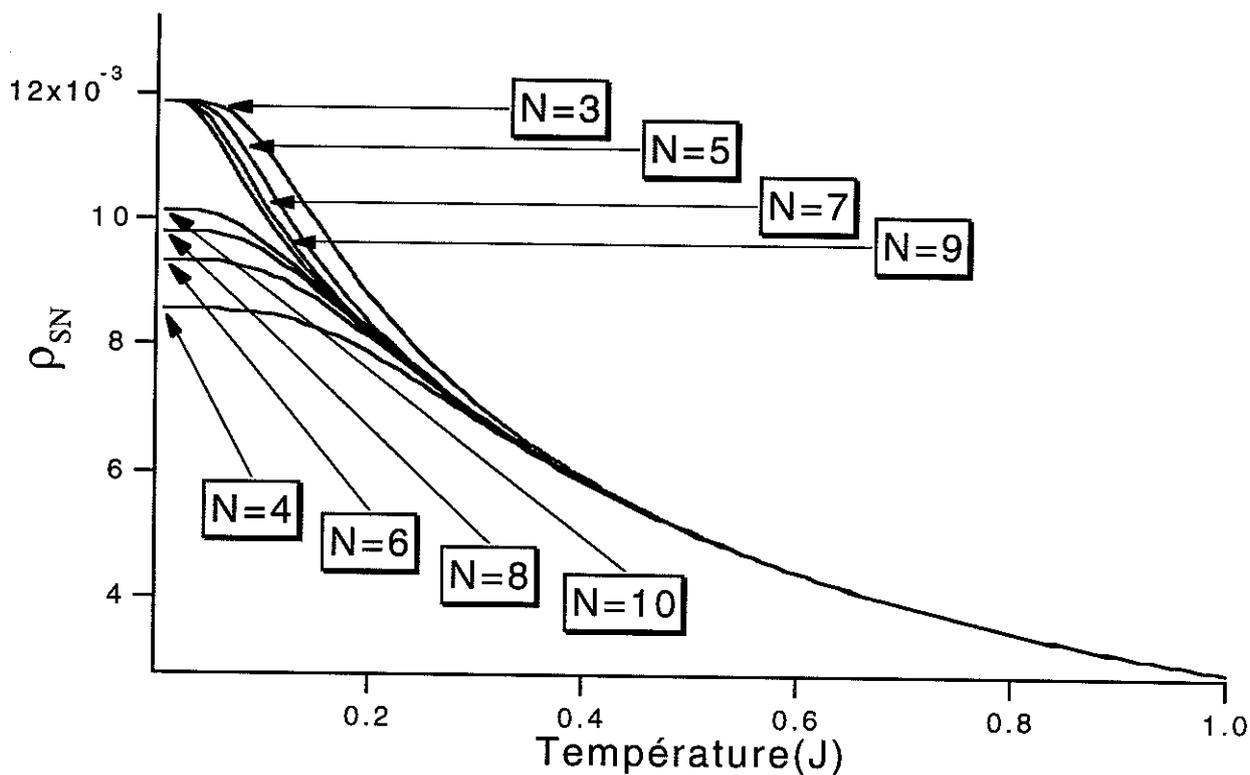


Fig. 2.14: Raideur normalisée pour une chaîne XXZ semi-contrainte avec $J_x/J_z=0.9$

Nous avons également considéré dans le cas de l'hamiltonien XXZ la phase XY pour les chaînes telles que $J_x > J_z$. Afin d'étudier l'influence de la parité sur la raideur dans cette nouvelle phase, nous avons considéré le cas proche du point limite XXX pour lequel $J_x/J_z = 1.01$, soit $\lambda = 0.99$ figure 1.9. La raideur de spin normalisée en fonction de la température pour différentes valeurs de N est représentée figure 2.15. Dans ce cas particulier, la raideur est négative quelque soit la valeur de N , présentant comme au cas précédent des effets de parité notoires à basse température. Dans cette dernière partie, la valeur absolue de la raideur est notamment plus forte dans tous les cas où N est impair par rapport aux cas pairs. Comme nous l'avons défini précédemment, une valeur négative de la raideur traduit une instabilité des états contraints vis à vis de la fluctuation introduite. Dans le cas présent et pour une phase XY non contrainte, on génère un état dans le plan XY. La condition de contrainte figeant un spin selon l'axe z , il sera par nature instable et donnera ainsi une raideur négative. On peut remarquer que la figure 2.11 est identique au cas cité plus haut où $J_x/J_z = 0.99$ par symétrie par rapport à l'axe des températures. Pour N impair, la valeur absolue de la raideur est d'autant plus faible que N est grand, les courbes se confondant au niveau des plateaux en un point unique localisé à $\rho_{SN} \approx -1.25 \cdot 10^{-3}$. Ce comportement est probablement également dû à l'émergence d'un ordre pour N impair dans le plan XY. La largeur des plateaux suit l'évolution du gap des effets de taille finie. Pour N pair, la valeur absolue de la raideur est d'autant plus forte que N est grand, comportement différent du cas impair. Les plateaux sont bien distincts, leurs largeurs décroissantes avec N . La raideur varie de $\rho_{SN} \approx -0.86 \cdot 10^{-3}$ pour $N=4$ à $\rho_{SN} \approx -1.05 \cdot 10^{-3}$ pour $N=10$. Passés ces plateaux, la raideur croît régulièrement pour atteindre au delà d'une température de $0.5J$ le comportement classique indépendant de tout effet de N et tendant progressivement vers une raideur nulle.

Conformément au raisonnement déjà utilisé relatif à l'influence de l'anisotropie sur la raideur observée, nous avons représenté à la figure 2.16 le cas particulier où $J_x/J_z = 1.1$ ($\lambda = 0.9$ figure 1.9), soit une anisotropie d'échange 10 fois plus forte que dans le cas précédent. L'analyse qualitative du comportement est identique au cas précédent, avec la présence d'une raideur négative et de deux zones bien distinctes en température. Quantitativement, la raideur normalisée est elle même 10 fois plus forte sauf dans le cas où N est impair où elle est légèrement supérieure au facteur 10. Le point transitionnel zone quantique \rightarrow zone classique est inchangé aux incertitudes près.

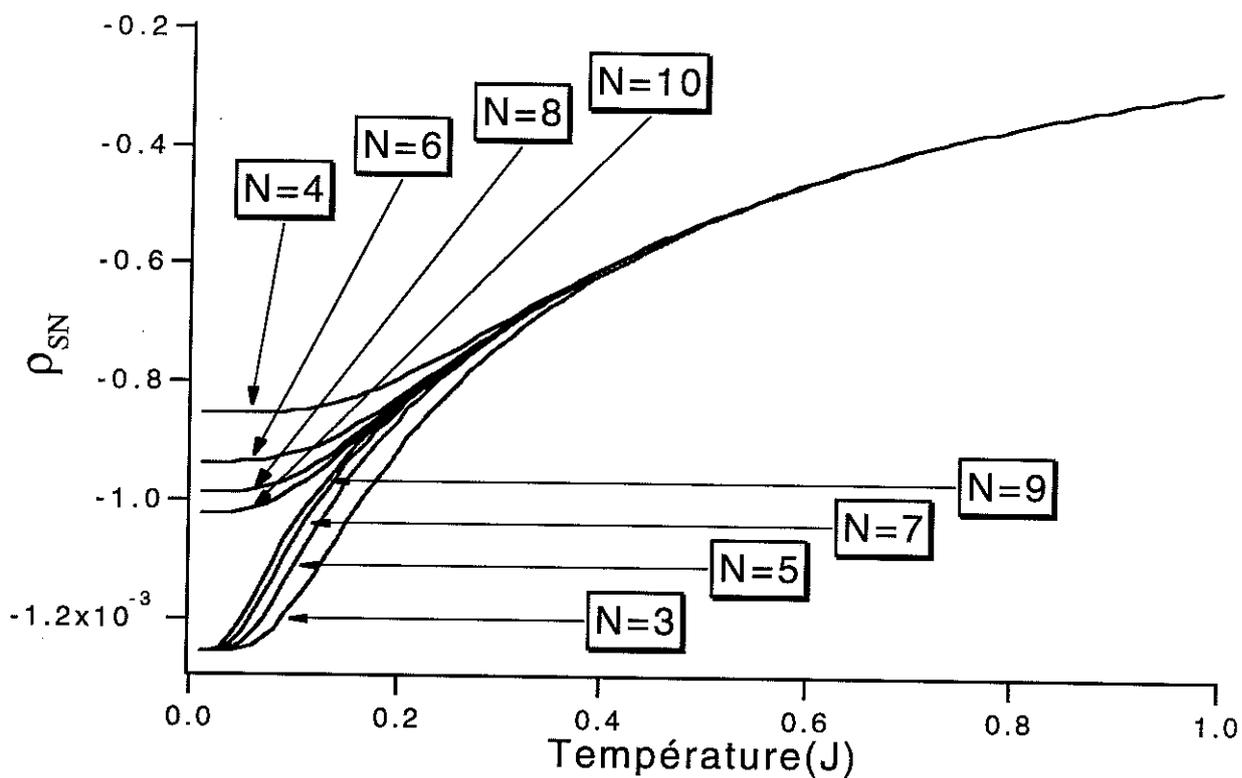


Fig. 2.15: Raideur normalisée pour une chaîne XXZ semi-contrainte avec $J_x/J_z=1.01$

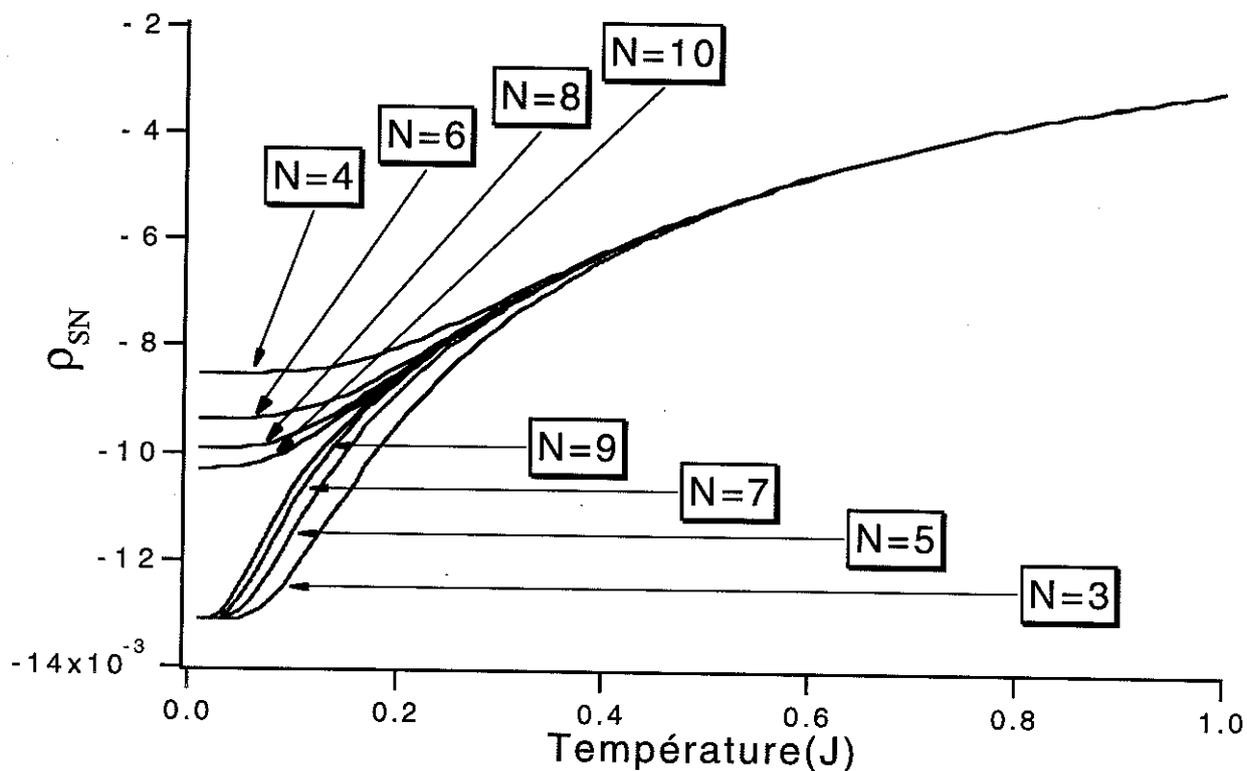


Fig. 2.16: Raideur normalisée pour une chaîne XXZ semi-contrainte avec $J_x/J_z=1.1$

2.3.4 Chaîne contrainte

Nous allons dans la suite de ce chapitre considérer le cas des chaînes contraintes. Au cours du précédent paragraphe, la notion de chaîne semi-contrainte a été définie comme étant une chaîne ayant une extrémité bloquée quantiquement dans une direction particulière, l'autre extrémité étant laissée libre. De façon analogue, nous définirons la notion de chaîne contrainte comme étant une chaîne bloquée à ses deux extrémités dans des directions particulières. La torsion nous servant à calculer la raideur sera générée en tournant un des spins bloqués. Afin de créer une torsion au sein d'une chaîne contrainte, nous prendrons par convention le premier spin figé en position haute ($m_z=+1/2$), le dernier spin étant quant à lui bloqué en position haute dans le cas d'un nombre de spins impair et basse dans le cas d'un nombre de spins pair. La condition "normale" d'angle respectant l'alternance antiferromagnétique sera pour une chaîne de longueur $N+2$ impaire $\theta+\pi$ et θ pour une chaîne de longueur $N+2$ paire.

De façon équivalente au cas semi-contraint, le blocage des spins aux extrémités réduit l'espace de Hilbert. Si N représente le nombre de spins libres dans une chaîne contrainte, l'espace de Hilbert passe sous l'effet de la contrainte d'une dimension 2^{N+2} à 2^N . En associant aux spins des extrémités les indices de sites respectifs 0 et $N+1$, les termes de couplage supplémentaires à considérer dans la diagonalisation de l'hamiltonien de chaîne libre (2.11) seront le terme correspondant au premier spin figé d'expression

$$H_{0,1} = S_0^z S_1^z \tag{2.21}$$

que l'on peut réécrire du fait de nos conditions de blocage pour le spin 0 sous la forme

$$H_{0,1} = C_0^z S_1^z \tag{2.22}$$

où C_0^z est un nombre. Le couplage sur le dernier spin est identique à celui du système semi-contraint $H_{N,N+1}$ défini par l'expression (2.19) du paragraphe §2.3.3. Dans le cas des spins 1/2, on a $C_0^z=1/2$ et les expressions (2.20) pour $H_{N,N+1}$.

Afin d'analyser l'influence de la parité de taille sur la raideur de spin normalisée à partir de cette nouvelle définition de torsion, l'hamiltonien le plus simple et représentatif choisi dans une première approche correspond encore à celui d'une chaîne XXX de dimension $N+2$ contrainte. Les courbes de raideur normalisée en fonction de la température pour différentes tailles N sont représentées figure 2.17. Le comportement à plus haute température étant de type classique, avec une valeur limite nulle, nous avons consacré notre analyse sur la région quantique.

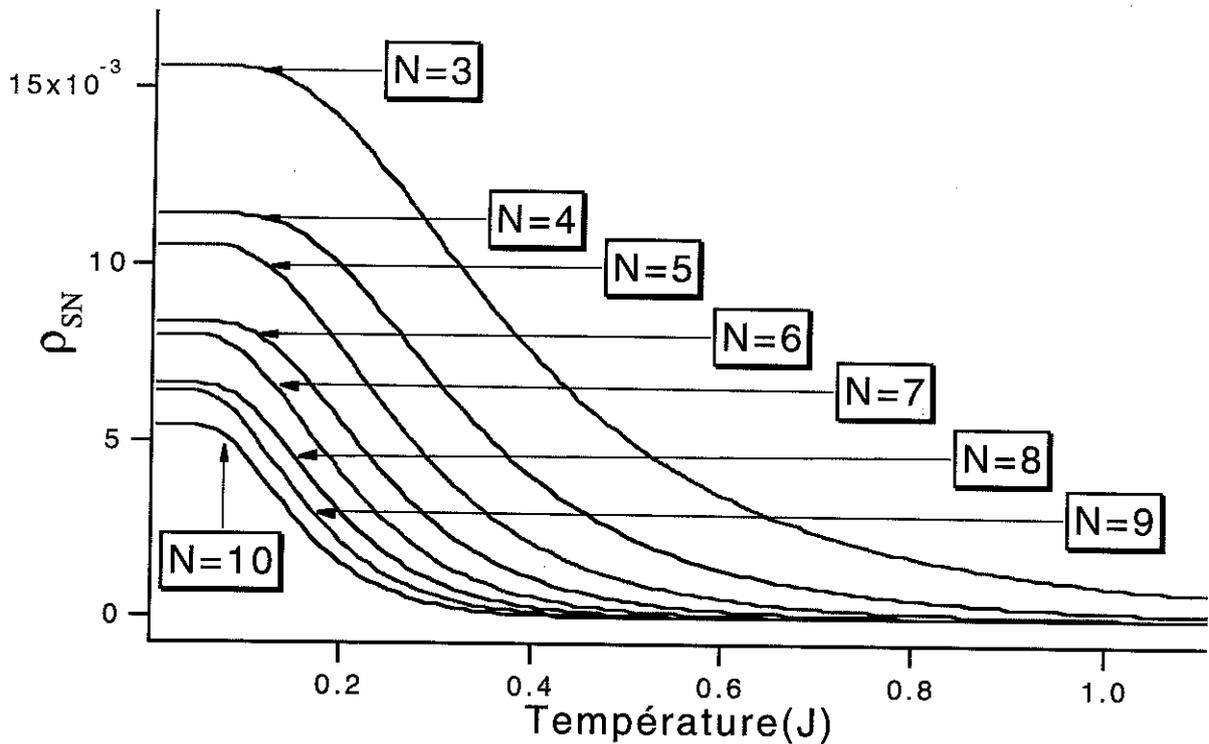


Fig. 2.17: Raideur normalisée pour une chaîne contrainte de type XXX

Contrairement aux raideurs rencontrées jusqu'à présent, aucune dépendance très nette de la raideur vis à vis d'effets de parité de taille ne se distingue ici. Elle est positive mais faible quelque soit N , d'autant plus faible que N est grand. Les plateaux à basse température suivent l'évolution caractéristique de la décroissance du gap de taille finie. Les points situés au niveau de ceux-ci décroissent de $\rho_{SN} \approx 15.8 \cdot 10^{-3}$ pour $N=3$ et $\rho_{SN} \approx 5.5 \cdot 10^{-3}$ pour $N=10$. Toutefois, l'évolution de ceux-ci avec la taille des chaînes semble distinguer de légers effets de parité. La décroissance des plateaux issue des valeurs paires de N est plus forte que celle issue des valeurs impaires de N .

Au paragraphe 2.3.3, nous avons été conduits par nécessité (afin de créer une raideur supérieure au bruit numérique) d'introduire dans nos calculs l'hamiltonien XXZ. Cette procédure nous a naturellement conduit à définir les caractéristiques de la raideur dans les deux phases des chaînes XXZ antiferromagnétiques. Nous allons dans la suite de ce chapitre réitérer cette procédure, analysant les caractéristiques de la raideur dans les différentes phases d'une variante de l'hamiltonien XXX contraint en nous efforçant de relever les effets de parité observés.

Afin notamment de contrôler si la méthode des torsions reste pertinente dans la caractérisation de divers changements de phases quantiques, nous avons choisi d'introduire des termes d'échange seconds voisins à l'hamiltonien XXX. L'expression générale (1.2) d'un tel hamiltonien en fonction du rapport des échanges entre premiers et seconds voisins $\alpha = J_2/J_1$

(dans le cas d'échanges isotropes) ainsi que le diagramme de phase attendu à la figure 1.9 ont été définis au premier chapitre (cf. §1.1.3.a). Dans cet hamiltonien sans contrainte, un changement de phase au voisinage du point critique $\alpha_c=0.25$ séparant une phase XY (état fondamental singulet sans gap dans le spectre d'excitation à la limite thermodynamique) d'une phase dimère (état fondamental doublet avec gap dans le spectre d'excitation à la limite thermodynamique) est attendu. Dans le cadre de notre étude et en accord avec ce principe de validation de la méthode des torsions, nous nous sommes intéressés à l'émergence potentielle d'effets de parité de N pour une variation du paramètre α . Les valeurs de α portent sur une gamme suffisamment large pour inclure les phases spécifiques attendues du cas non contraint.

Afin de caractériser l'influence relative du terme d'échange seconds voisins, la première valeur abordée correspond à $\alpha=0.01$. La phase du Hamiltonien non contraint sur la figure 1.9 se situe dans une phase XY, avec un état fondamental très proche de celui issu du modèle XXX, le couplage supplémentaire pouvant être considéré comme perturbatif. Il doit en être probablement de même dans le cas du modèle XXX contraint si l'on rajoute un tel couplage. Cette hypothèse nous permet de prédire que la raideur de spin normalisée à basse température (où l'état fondamental joue un rôle prépondérant) doit se comporter de façon quasi similaire pour $\alpha=0.01$ que dans le cas XXX contraint étudié précédemment. La figure 2.18 représente la raideur de spin normalisée en température pour $\alpha=0.01$. Les résultats obtenus sont ainsi complètement cohérents avec l'hypothèse avancée plus haut. Le comportement en température aussi bien que la dépendance au paramètre N est totalement identique au cas XXX contraint. La faible manifestation notable d'effets de parité à travers la différence de régime de décroissance de la raideur avec N est confirmée. Cette dernière caractéristique est d'autant plus marquée que N est grand. La raideur à basse température présente les plateaux caractéristiques du gap de taille finie puis décroît régulièrement en température jusqu'à la limite classique nulle. On peut remarquer que cette limite classique est atteinte à des températures relativement faibles, inférieure à $T=0.4J$ pour $N=10$.

La progression dans le diagramme de la figure 1.9 (cf. §1.1.3.a) nous amène naturellement à l'étude du point intermédiaire $\alpha=0.1$. Ce point est relativement éloigné du point critique de telle sorte qu'il est hors de la zone d'incertitude de ce point limite. Il est également intéressant car nous savons que l'hamiltonien non contraint pour ce point possède un spectre de basse énergie de phase XY (état fondamental singulet sans gap dans le spectre d'excitation à la limite thermodynamique) mais le couplage seconds voisins ne peut plus être nécessairement perturbatif. En tenant compte des contraintes appliquées, il n'est donc plus possible de prédire l'allure de la raideur par un raisonnement perturbatif. La raideur de spin normalisée en fonction de la température pour ce point intermédiaire est représentée figure 2.19 pour différentes tailles de chaînes. Bien que les comportements y soient globalement assez similaires au cas précédent, un regard plus détaillé permet de percevoir de notables différences. A valeur de N égale, la

raideur est plus faible que pour le cas précédent. A basse température, on a respectivement $\rho_{SN} \approx 13.9 \cdot 10^{-3}$ pour $N=3$ contre $\rho_{SN} \approx 15.8 \cdot 10^{-3}$ pour le cas $\alpha=0.01$.

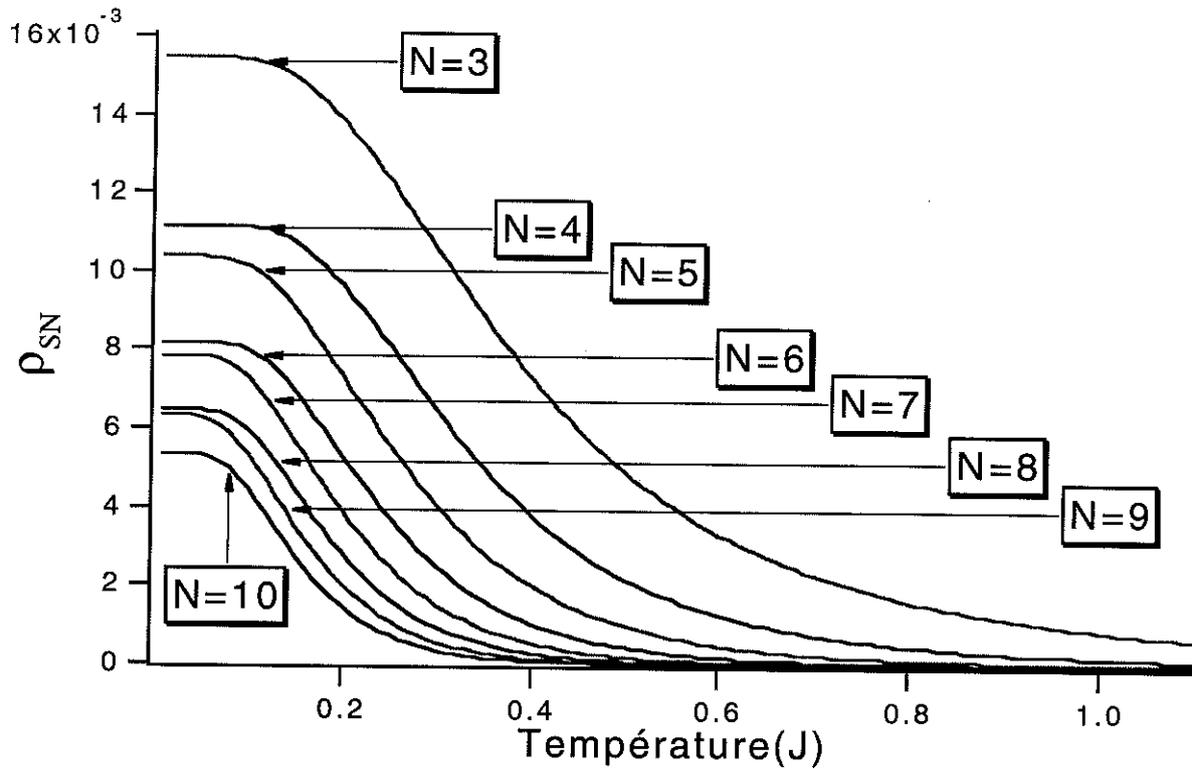


Fig. 2.18: Raideur normalisée pour une chaîne XXX contrainte seconds voisins où $J_2/J_1=0.01$

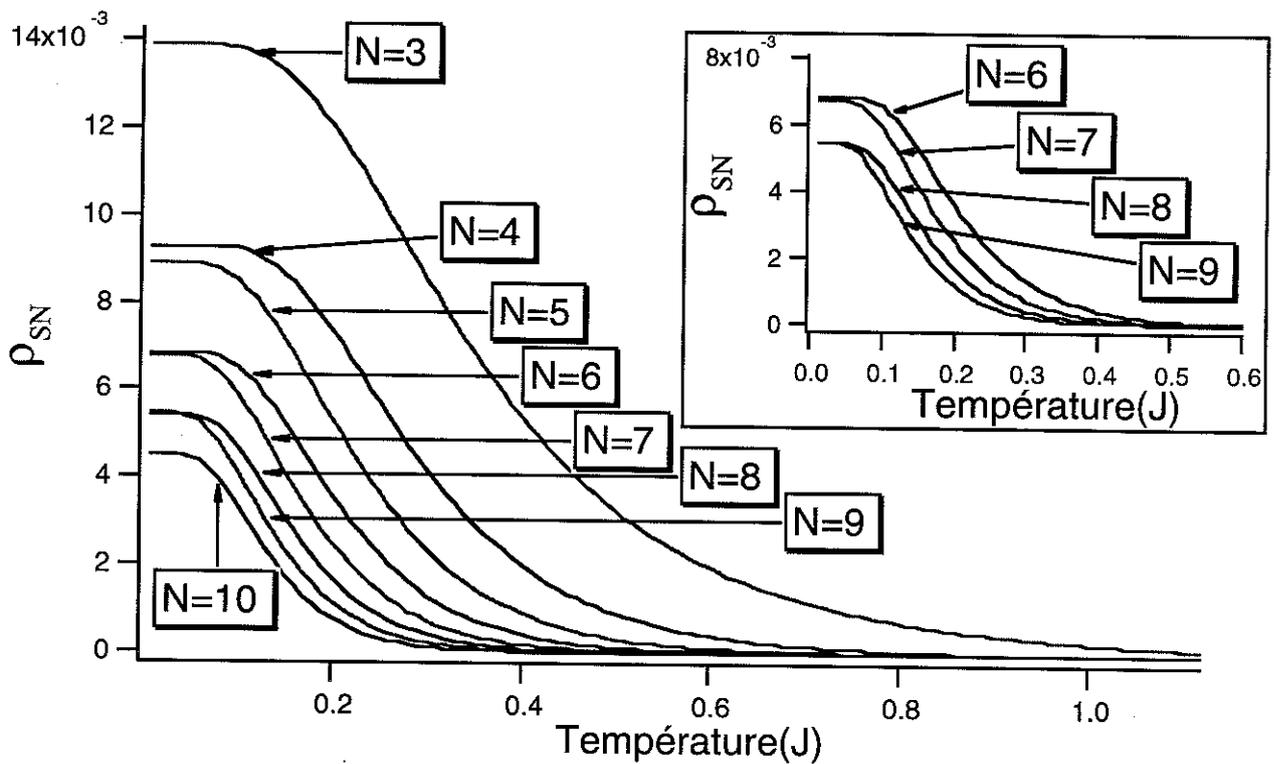


Fig. 2.19: Raideur normalisée pour une chaîne XXX contrainte seconds voisins où $J_2/J_1=0.1$

L'insert de la figure 2.19 précise ce comportement pour les couples $N=6,7$ et $N=8,9$ à très basse température. On y constate que l'évolution du couple $N=6,7$ vers le couple $N=8,9$ s'accompagne d'une raideur beaucoup plus faible pour $N=8$. La raideur suit la caractéristique des plus hautes températures (pour ces couples) de décroissance plus forte avec N de la raideur pour N pair par rapport à N impair pour les valeurs jusqu'à $N=8$. Cette caractéristique n'est plus vraie à partir du couple $N=8,9$ pour lequel il existe une petite zone en température qui suit une tendance inverse. Pour $\alpha=0.1$, cette zone reste cependant limitée à une température d'environ $0.05J$ au delà de laquelle le comportement devient analogue au couple $N=6,7$. Il existe ainsi un point pour lequel la raideur pour $N=8$ égale celle de $N=9$. Ce comportement brisant l'alternance et distinguant petit à petit les chaînes de longueur N paire à celles de longueur N impaire est une signature probable d'effets de parité. Cette caractéristique semble l'être dans toute la zone XY.

Du fait de l'existence d'une zone d'incertitude théorique autour du point de changement de phase $\alpha_c=0.25$, l'étude de la raideur de spin au niveau de la zone de transition nécessite de prendre au minimum 3 points proches de celle-ci, chacun étant situé dans une phase bien identifiée différente des autres. Cette zone d'incertitude étant incluse dans la zone comprise entre les points $\alpha=0.24$ et $\alpha=0.26$, nous avons associé aux 3 points minimum nécessaires les paramètres $\alpha=0.24$, $\alpha=0.25$ et $\alpha=0.26$. Les figures respectives de ces points pour la raideur de spin normalisée en fonction de la température pour différentes valeurs de N sont représentées aux figures 2.20, 2.21 et 2.22.

La figure 2.20 présente la raideur normalisée obtenue dans cette phase sous contrainte. On y constate l'émergence nette d'effets de parité de N . Ceux-ci se manifestent principalement à basse température. Ainsi, la raideur passe d'une situation où elle est plus forte pour N impair que pour N pair, tendance s'inversant à partir d'une température critique. Cela correspond à la généralisation à toutes les valeurs de N du comportement observé pour le couple $N=8,9$ du cas $\alpha=0.1$. La décroissance en température de la raideur suit donc des régimes de décroissance différents dépendant de la parité. Le point de température critique correspondant au point d'intersection entre cas pairs et impairs pour un couple donné est d'autant plus proche de $T=0$ que N est élevé. Les plateaux à basse température présentent également des effets de parité. En effet, si l'on observe une décroissance de la largeur de ceux-ci avec l'augmentation de N pour toutes les valeurs de N , cette décroissance est plus prononcée pour les valeurs de N paires que pour les valeurs de N impaires.

Des effets spécifiques ne reflétant pas d'effets de parité émergent naturellement comme l'apparition à plus haute température de raideurs de spin négatives pour les petites valeurs de N ($N=3,4,5$). Bien que ce dernier comportement persiste sur une gamme de température de l'ordre de J , il converge vers le cas classique de raideur nulle.

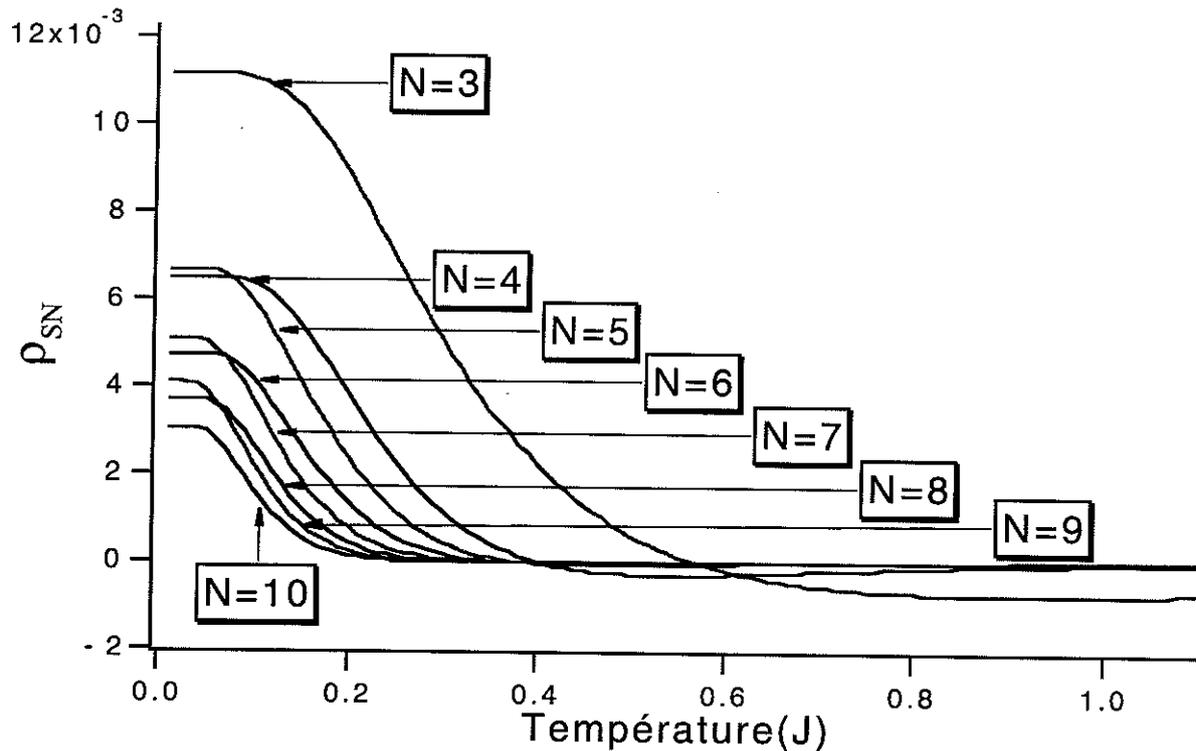
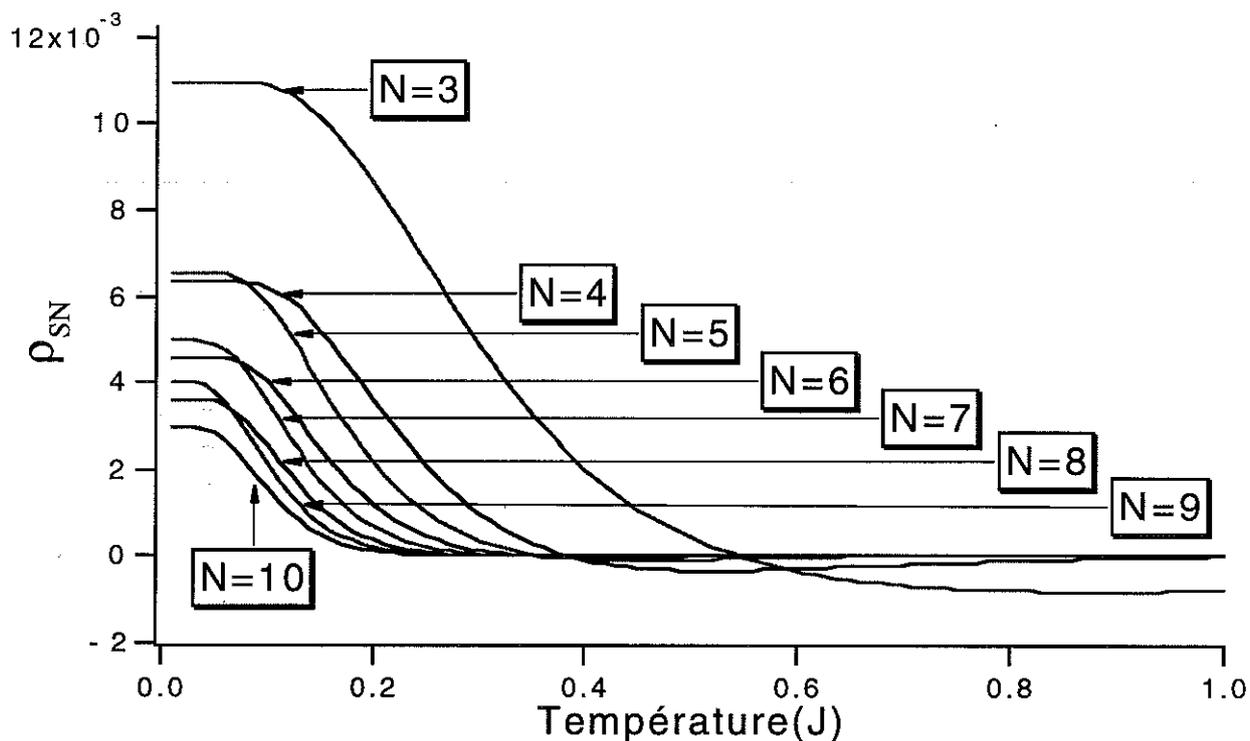
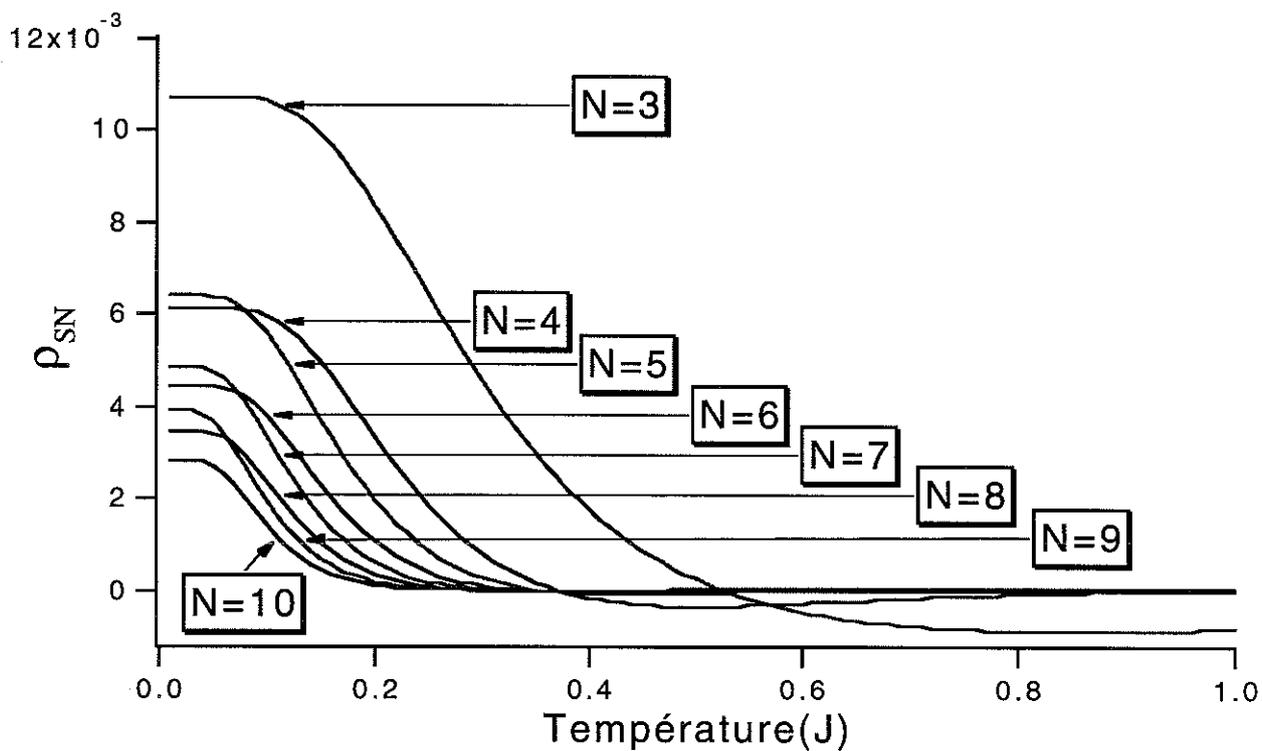


Fig. 2.20: Raideur normalisée pour une chaîne XXX contrainte seconds voisins où $J_2/J_1=0.24$

Si l'on considère maintenant le point critique $\alpha_c=0.25$, il se trouve dans la zone d'incertitude citée précédemment. Le comportement caractéristique de la raideur est dominé, soit par les tendances issues de la phase XY contrainte, soit par celles issues de la phase dimère contrainte. La raideur normalisée correspondant à cette zone est représentée figure 2.21.

On constate sur cette figure que les commentaires effectués pour le cas précédent sont encore effectifs, à savoir effets de parité marqués tant au niveau des plateaux que sur les régimes de décroissance en température. L'influence de N reste dominante à basse température. La zone où la raideur normalisée devient négative présente cependant de légères différences vis à vis du cas $\alpha=0.24$. A N équivalent, la température où la raideur devient négative est plus basse. Ainsi, pour $N=4$, elle passe de $T=0.4J$ dans le cas $\alpha=0.24$ à $T=0.38J$ dans le cas $\alpha=0.25$. De plus, $N=6$ devient de même très légèrement négatif. On ne peut cependant parler ici de prédominance des caractéristiques d'une phase par rapport à une autre.

Le dernier point défini au voisinage de la zone d'incertitude correspond au cas particulier où $\alpha=0.26$. Dans le cas non contraint et d'après la figure 1.9, c'est un point de la phase dimère (état fondamental doublet et gap dans le spectre d'excitation à la limite thermodynamique). Le comportement de la raideur doit posséder les caractéristiques principales de cette phase tout en conservant les influences de la précédente. La figure 2.22 représente les courbes de la raideur normalisée pour ce dernier cas. Malgré le changement de phase théoriquement prédit, les courbes présentées ne reflètent pas d'effets particuliers visibles marquants comparativement aux deux cas précédents.

Fig. 2.21: Raideur normalisée pour une chaîne XXX contrainte seconds voisins où $J_2/J_1=0.25$ Fig. 2.22: Raideur normalisée pour une chaîne XXX contrainte seconds voisins où $J_2/J_1=0.26$

Nous avons représenté figure 2.23 la raideur de spin normalisée pour différentes valeurs de N pour $\alpha=0.3$. Ce point particulier se situe dans la phase dimère de l'hamiltonien sans contrainte, présentant le même intérêt d'étude que le point $\alpha=0.1$. Ce point se situant au delà de la zone d'incertitude, la raideur doit manifester les caractéristiques relatives à cette phase. On constate sur la figure 2.23 que les effets de parité à basse température s'accroissent, permettant ainsi de distinguer de plus en plus les chaînes où N est pair de celles où N est impair. En accord avec ces comportements, on remarque que si précédemment les raideurs formaient des couples de valeurs proches, ils deviennent moins marqués ici. Les valeurs des plateaux correspondent ainsi à $\rho_{SN} \approx 10 \cdot 10^{-3}$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx 2.37 \cdot 10^{-3}$ pour $N=10$. Les valeurs de la raideur à basse température sont d'autant moins fortes que α est élevé. Pour les petites valeurs de N , la zone de raideur négative commence pour des températures de moins en moins élevées, rejoignant la zone classique de raideur nulle à haute température.

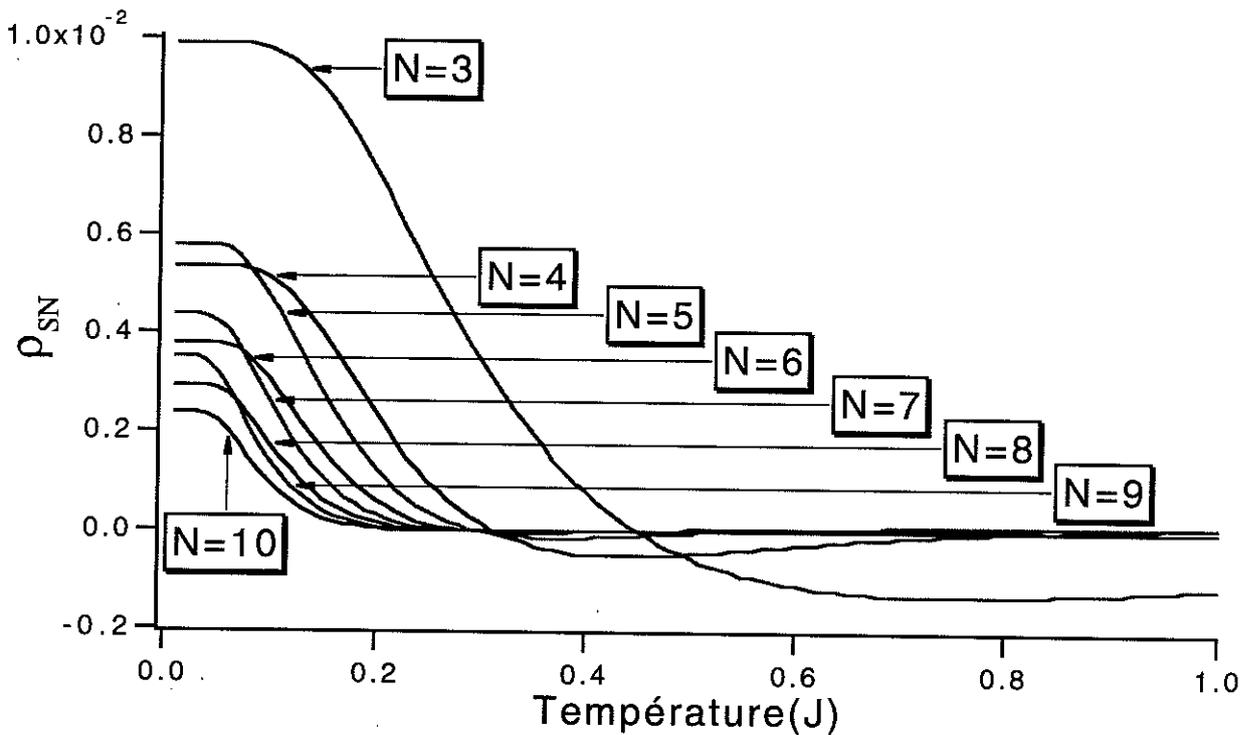


Fig. 2.23: Raideur normalisée pour une chaîne XXX contrainte seconds voisins où $J_2/J_1=0.3$

Le point caractéristique de la phase dimère de l'hamiltonien J_1 - J_2 correspond au cas spécifique $\alpha=0.5$. Ce point, dont il existe une solution exacte résolue par Majumbar-Gosh (cf. §1.1.3.a), possède à la limite thermodynamique un état fondamental dimère pur. Il est légitimement intéressant afin de caractériser idéalement la raideur de spin dans la phase dimère. Il se situe, de plus, loin de la zone d'incertitude. Les résultats de la raideur de spin normalisée sont représentés, dans une zone de température étendue à la figure 2.24 et, pour une zone plus restreinte des basses températures figure 2.25. Si les comportements à la figure 2.24 sont relativement complexes à analyser, l'agrandissement à basse température de la figure 2.25

permet de distinguer l'émergence d'effets de parité très forts. On y distingue ainsi qu'en dehors de $N=4$, la raideur normalisée pour N pair est inférieure à tous les cas de N impair.

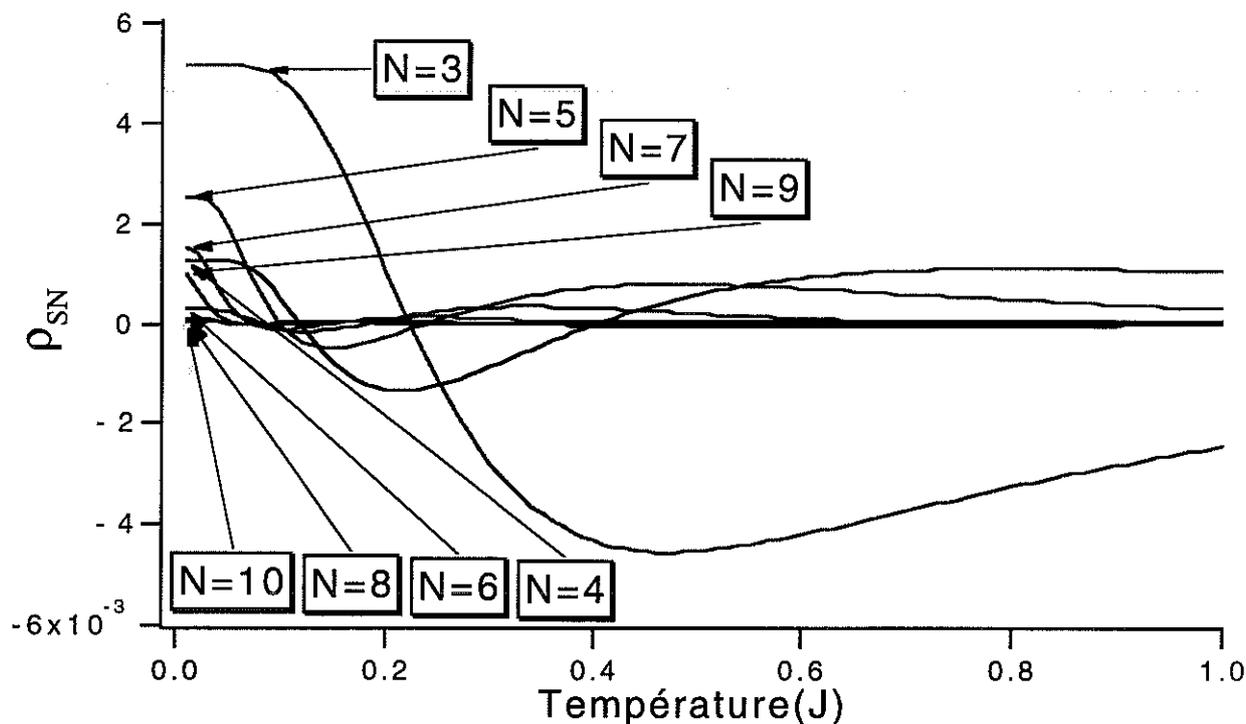


Fig. 2.24: Raideur normalisée pour une chaîne XXX contrainte seconds voisins où $J_2/J_1=0.5$

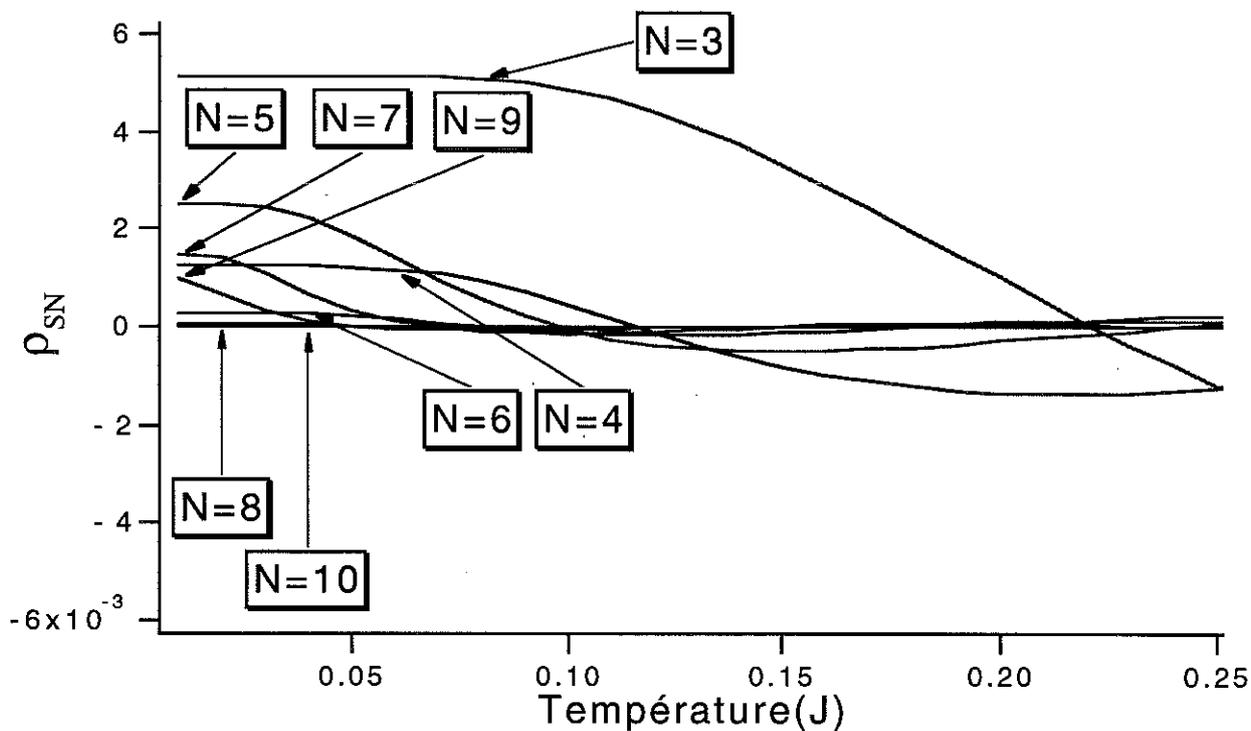


Fig. 2.25: Raideur de spin dans la zone restreinte de $J_2/J_1=0.5$

- Conclusion:

Après une définition générale de la raideur de spin, caractérisant notre outil principal de sonde d'effets de parité de taille, nous avons analysé de façon plus précise la susceptibilité longitudinale et la raideur de spin pour des chaînes soumises à des conditions de bords périodiques et ouvertes. Dans les deux cas, des comportements spécifiques vis à vis des effets de parité de taille ont été montrés.

Dans le cas périodique, la susceptibilité longitudinale dans les hamiltoniens XXX et XX étudiés montre des effets de parité très marqués aux basses températures dus essentiellement à la nature magnétique différente des états fondamentaux vis à vis de la parité de taille. On a des singulets pour les chaînes paires et des multiplets pour les chaînes impaires. La raideur de spin a , quant à elle, été précisée pour deux formes de torsions, chacune d'elle présentant de nets effets de parité. L'étude d'une torsion générée par un déphasage local se compare très bien à l'étude faite par Loss et Maslov. Elle distingue très nettement la raideur positive pour les chaînes de longueur N paire de la raideur négative pour les chaînes de longueur N impaire dans la région de comportement quantique, ainsi que le comportement indépendant de la taille et de la parité de taille dans la région classique, conformément aux prédictions théoriques. La faible taille de celles-ci ne nous a cependant pas permis de distinguer de région à tendance semi-classique. Les études de raideur générée par des champs orthogonaux appliqués en bords de chaîne, malgré la contrainte que ceux-ci impliquent, présentent également de forts effets de parité, conformément aux comportements attendus pour les chaînes périodiques sans contraintes.

Dans le cas des chaînes ouvertes, la susceptibilité longitudinale pour les hamiltoniens XXX et XX étudiés montre également de forts effets de parité. La distinction entre chaîne périodique et chaîne ouverte y est cependant très peu sensible dans ce cas. Les comportements de la susceptibilité du fondamental sont qualitativement équivalents à basse température, singulet pour les chaînes de longueur N paire et multiplet pour les chaînes de longueur N impaire. La raideur de spin a été précisée pour trois formes distinctes de torsions, chacune d'elles présentant également de nets effets de parité. La raideur générée par des champs orthogonaux appliqués en bords de chaîne présente de forts effets de parité, qui se distinguent nettement du cas équivalent en chaîne périodique. Une torsion générée par une semi-contrainte a permis d'analyser plus spécifiquement la raideur pour les différentes phases caractéristiques de l'hamiltonien XXZ. Cette analyse a ainsi permis de distinguer très nettement à la fois ces phases caractéristiques, ainsi que des effets de parité s'y reflétant. On a notamment distingué une raideur négative dans la phase XY et respectivement positive dans la phase Antiferromagnétique. Les effets de parité se caractérisent notamment à basse température par une signature d'ordre pour N pair contrairement au cas impair. L'influence de l'anisotropie se caractérisant par une raideur d'autant plus forte en

valeur absolue que l'échange est anisotrope. Enfin, une étude sur une condition de chaînes contraintes sur la base de l'hamiltonien sans contrainte avec échange premiers et seconds voisins J_1 - J_2 pour une gamme étendue du paramètre $\alpha=J_1/J_2$ allant de la phase XY à la phase dimère pure a montrée l'émergence progressive de comportements spécifiques de la raideur de spin normalisée de ces phases. On passe ainsi d'une raideur positive et sans effets de parité manifestes pour la phase XY, à une raideur présentant de forts effets de parité et ayant des régions négatives de plus en plus basses en température pour la phase dimère.

Si les effets de parité se manifestent à la fois dans la susceptibilité et dans la raideur de spin, cette dernière permet cependant de déduire plus d'informations vis à vis des tailles finies et des effets de parité. Ainsi, la caractérisation, dans le cas des spins 1/2, de phases différentes est plus fine du fait de l'émergence progressive des caractéristiques en termes de raideur de ces phases. Une phase plus ordonnée caractérisée par un maximum de raideur permet ainsi de se donner une idée de l'évolution des corrélations avec la température. La notion de stabilité des états d'une phase, en fonction des effets de parité, permet également de se faire une idée de la nature possible des excitations existantes à la limite thermodynamique. Enfin, les différentes formes par lesquelles se manifestent les effets de parité, à savoir par la forme générale des courbes ou par l'existence des plateaux qui reflètent ceux-ci (dans le cas de nos chaînes finies), rendent la raideur de spin également plus intéressante vis à vis des effets de parité.

Chapitre 3

Effets de parité dans les chaînes antiferromagnétiques de spins 1

3.1.1 Effets de parité dans la susceptibilité longitudinale

Nous avons introduit au §2.2.1 du chapitre 2 la susceptibilité concernant les spins 1/2 pour des chaînes périodiques. Nous conservons ici le formalisme des spins 1/2 utilisé dans ce paragraphe en l'appliquant au cas des spins 1. La susceptibilité normalisée est décrite par l'expression (2.7) et les conditions de périodicités par les expressions (2.3) et (2.4).

Afin de présenter des exemples concrets de manifestations d'effets de parité dans la susceptibilité longitudinale, nous nous sommes intéressés à l'hamiltonien représentatif et très étudié du modèle XXX de spins 1. Comme pour le cas identique des spins 1/2 du §2.2.1, le hamiltonien est défini par l'expression (2.5). La figure 3.1 montre la susceptibilité normalisée en fonction de la température pour différentes tailles de longueur N de chaînes pour cet hamiltonien. La susceptibilité présente deux régions pertinentes, que nous pouvons également définir en tant que région quantique dans la partie basse température où les effets de parité et de taille sont bien distincts et, une région de comportement classique paramagnétique à plus haute température, dépourvue d'effets de parité et de taille. Ces deux régions sont reliées par une région intermédiaire, moins marquée cependant que dans les spins 1/2. Comme pour le chapitre précédent, dû à la petite taille des chaînes étudiées, il existe un gap de taille finie dans le spectre des excitations.

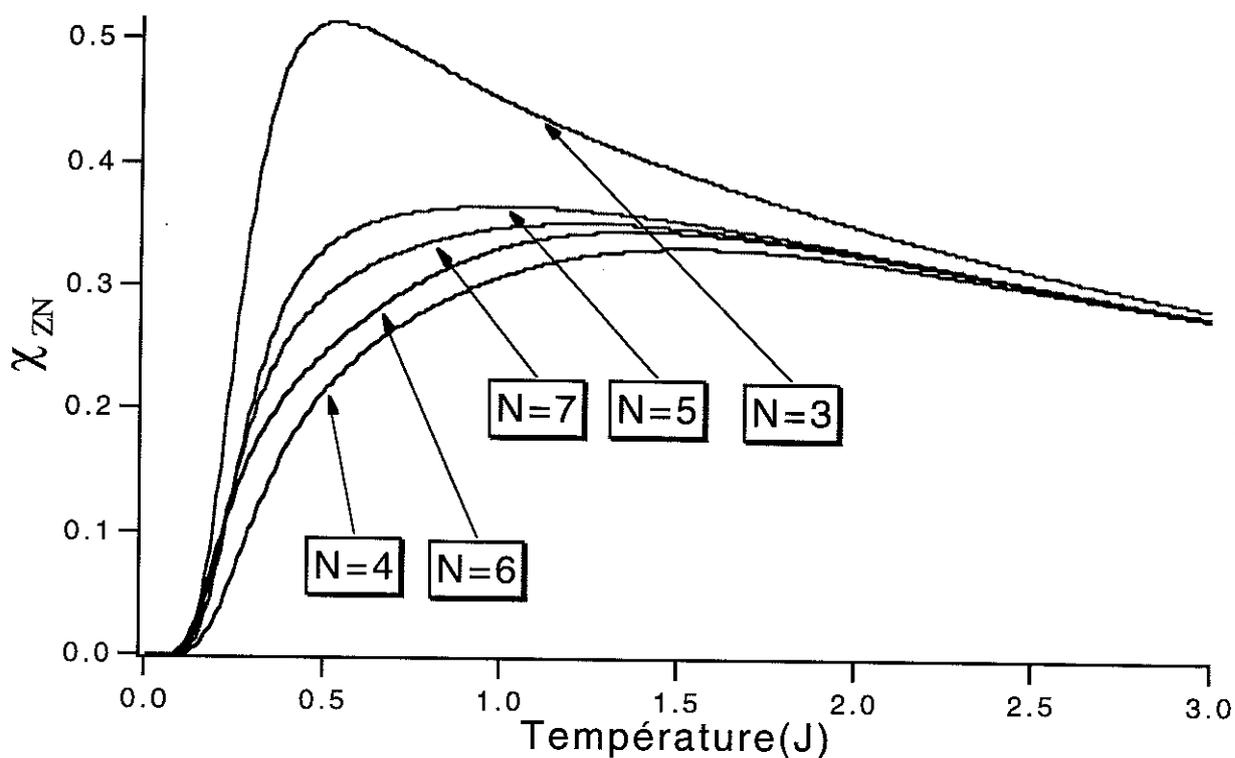


Fig. 3.1: Susceptibilité normalisée pour différentes longueurs de chaînes: cas XXX

Bien que les effets de parité soient nets dans la zone quantique entre les chaînes de tailles paires et impaires, on constate que le cas limite des très basses températures est moins marqué que pour les spins $1/2$. Cette distinction résulte du fait que la susceptibilité est ici nulle dans les cas pairs et impairs. Cette valeur nulle à température nulle, indépendamment de la parité de N , est caractéristique d'un état singulet prédit dans le cadre des états VBS pour les chaînes périodiques (cf. §1.2.4). De façon analogue aux spins $1/2$, on peut constater que pour N pair, la susceptibilité est d'autant plus forte que N est élevé alors que pour N impair, la susceptibilité est d'autant plus faible que N est élevé. Cette distinction résulte de la nature magnétique différente des excitations pour N pair et impair qui contribuent, par décroissance progressive du gap des effets de taille finie, à la susceptibilité.

A plus haute température, la susceptibilité passe par un maximum, plus accentué et plus bas en température pour les valeurs de N impaires que pour les valeurs de N paires. Cette zone transitionnelle garde cependant ses effets de parité, plus marqués ici pour les spins 1 que pour les spins $1/2$ où cette zone était plus diffuse (cf. Fig. 2.1). Au delà du maximum, la susceptibilité rejoint une zone de comportement paramagnétique, décroissante en $1/T$, où la susceptibilité normalisée est indépendante de N et de sa parité.

Nous nous sommes de même intéressés au cas d'une chaîne de spins 1 décrite par un hamiltonien de type XX. Cependant, contrairement au cas des spins $1/2$ où le passage du modèle XXX au modèle XX se faisait sans changement de phase particulière (cf. Fig.1.8), ce passage s'accompagnera ici d'un changement de phase. On passe ainsi, à la limite thermodynamique, de la phase de Haldane (définie par un état fondamental singulet et un gap dans le spectre d'excitation) à la phase XY (définie par un état fondamental singulet mais sans gap dans le spectre d'excitation)(cf. Fig. 1.11). Cependant, ce changement de phase est sans conséquence apparente dans le cas périodique fini : Les deux phases présentent un gap dû aux effets de taille finie et les états fondamentaux sont des singulets indépendamment de la parité des chaînes (cf. §1.1.3.b). La susceptibilité normalisée obtenue ici est représentée figure 3.2. Comme pour les cas présentés au §2.2.1, le passage du modèle XXX au modèle XX s'accompagne globalement à température identique d'une susceptibilité plus forte dans le cas XX.

La région quantique présente, comme dans le cas du modèle XXX, une susceptibilité nulle à très basse température, caractéristique d'un état singulet magnétique séparé par un gap de ses premiers niveaux excités magnétiques. Au delà de cette extrémité nulle, des effets de parité et de taille apparaissent, avec notamment une susceptibilité normalisée d'autant plus forte que N est grand dans les chaînes de longueur N paire et, d'autant plus faible que N est grand pour les chaînes de longueur N impaire. Ces effets de parité émergent à plus haute température, permettant de préciser que les états fondamentaux dans ces modèles ne sont pas les seuls à subir l'influence des parités de taille, comme pour le cas XXX.

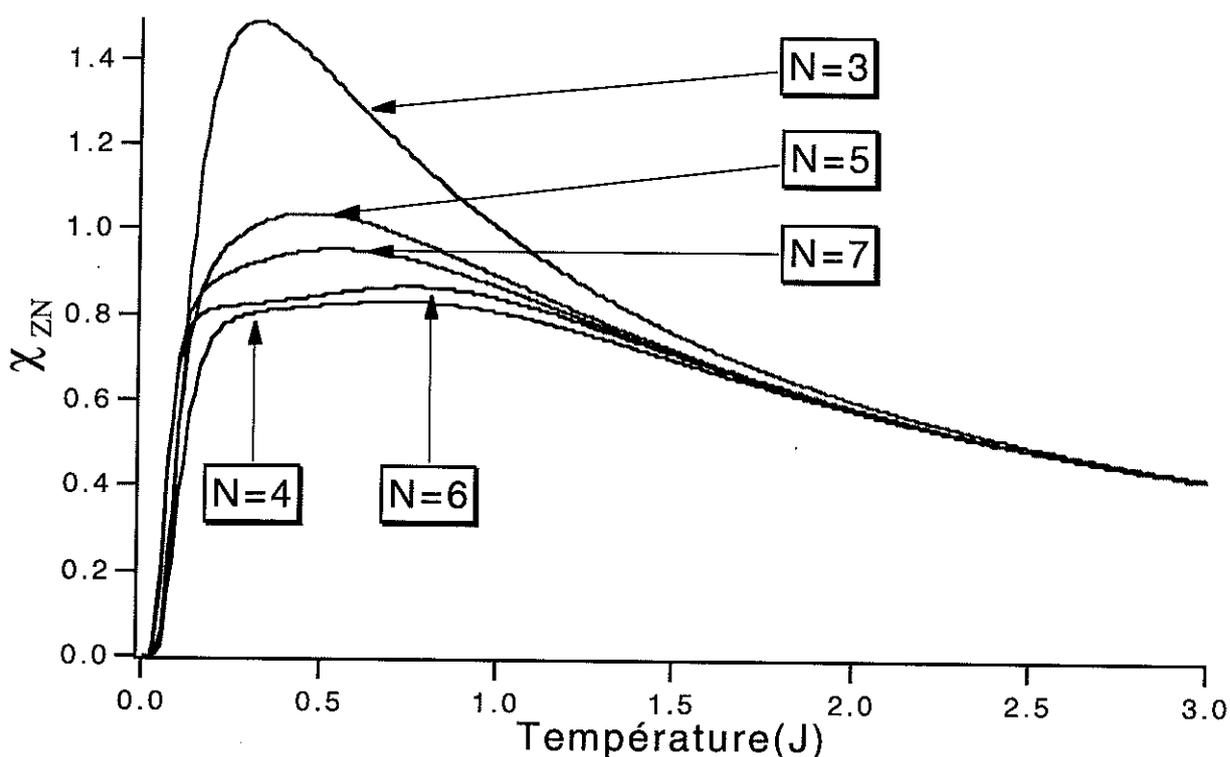


Fig. 3.2: Susceptibilité normalisée pour différentes longueurs de chaînes: cas XX

Avec l'accroissement en température, la susceptibilité passe par un maximum quelque soit la parité de la chaîne, plus bas en température cependant pour les chaînes de longueur N impaire que pour les chaînes de longueur N paire. Cette région de maximums correspond à une zone de fin de prédominance de l'échange sur la température. La position du maximum est localisée, en moyenne, plus bas en température pour le cas XX. Les chaînes de longueur N paire présentent toutefois une zone de croissance intermédiaire avant le plateau du maximum caractérisée par une croissance de la susceptibilité quasi linéaire en température.

Au delà du maximum, la susceptibilité normalisée tend vers un comportement classique paramagnétique. Elle est décroissante en $1/T$ et est indépendante des effets de parité de taille ainsi que des effets de taille.

3.1.2 Raideur de spin sous l'influence d'un déphasage aux bords de chaîne

Nous avons introduit au §2.2.2 la notion de déphasage aux bords de chaîne et l'avons appliqué au cas des spins $1/2$. Cette étude a notamment été comparée à l'approche théorique faite par Loss et Maslov [Los 95]. Dans le cas d'une chaîne antiferromagnétique de spins 1 soumise aux conditions de périodicités (2.3) et (2.8), Loss et Maslov prédisent qu'il existe une différence

majeure vis à vis des effets de parité de taille pour des systèmes mésoscopiques dans le comportement de la raideur de spin entre spins 1/2 et spins 1. Si, comme nous l'avons de même observé pour les systèmes nanoscopiques, des effets de parité de taille sont présents dans le cas des spins 1/2, ces effets doivent disparaître dans le cas des spins 1. La procédure et le formalisme utilisés au §2.2.2 étant généralisables, nous pouvons les appliquer sans restriction aux spins 1.

Nous avons représenté figure 3.3 la raideur de spin normalisée, en fonction de la température et pour différentes tailles N , pour des chaînes de spins 1 soumises aux conditions de périodicités (2.3) et (2.8). La principale caractéristique de celle-ci est la persistance des effets de parité de taille et de taille dans nos petites chaînes, contrairement aux prédictions de l'analyse théorique. Ces effets sont relativement analogues aux comportements de la raideur obtenus dans le cas des spins 1/2. La gamme de température pour laquelle ces effets de parité sont observés est cependant beaucoup plus large ici. L'amplitude de la raideur est, en valeur absolue, du même ordre de grandeur entre chaînes de longueur N paire et impaire, ce qui n'était pas le cas pour les spins 1/2. Les plateaux à basse température, traduisant l'existence du gap dû aux effets de taille finie, reflètent également la parité. Les excitations de natures différentes entre chaînes de longueur N paire et impaire s'accompagnent d'un écart d'énergie avec le fondamental tenant compte nécessairement de la parité. A plus haute température, au delà de $T=4J$, le comportement de la raideur devient classique, c'est à dire tendant vers une valeur nulle et sans effets particuliers ni de parité, ni de taille.

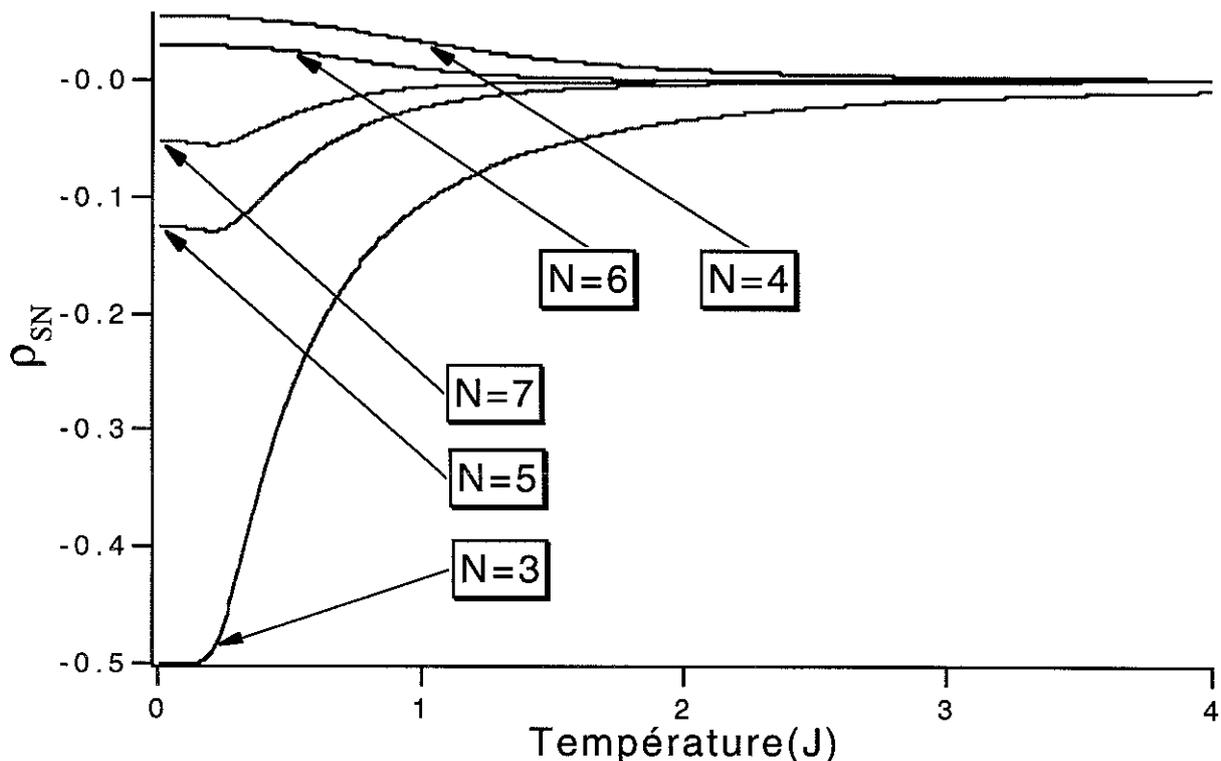


Fig. 3.3: Raideur normalisée pour un déphasage aux bords de chaîne

Pour N pair, la raideur est positive, traduisant une stabilité des états fondamentaux à basse température vis à vis des torsions. Au niveau des plateaux, les valeurs de la raideur passent de $\rho_{SN} \approx 4.05 \cdot 10^{-2}$ pour $N=4$ et $\rho_{SN} \approx -3.36 \cdot 10^{-2}$ pour $N=6$. Pour N pair en condition périodique, l'état est singulet et sans frustration. Il est conforme aux états VBS abordés au (§1.2.4).

Pour N impair, la raideur est négative, traduisant une instabilité des états fondamentaux vis à vis des torsions. La frustration due à la condition de périodicité devrait créer un défaut de spin 0 dans la chaîne. Comme nos chaînes sont trop petites (la taille maximum de nos chaînes étant comparable à la longueur de corrélation de ce modèle), aucun défaut de spin zéro n'est généré. Il y a création d'un soliton dans le fondamental, donnant ainsi une raideur négative. La présence de défauts de spin 0 dans une chaîne plus grande permettrait de générer une raideur probablement positive, ce qui serait en accord avec les prédictions de Loss et al. Au niveau des plateaux, la raideur de spin évolue de $\rho_{SN} \approx -0.5$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx -5.1 \cdot 10^{-2}$ pour $N=7$. on peut cependant remarquer que, juste après les plateaux, les courbes présentent un puits de raideur avant de remonter et de retrouver le comportement classique attendu à haute température.

3.1.3 Raideur de spin sous l'influence de champs magnétiques aux bords de chaîne

Nous avons introduit et appliqué au paragraphe §2.2.3 dans le cas des spins $1/2$ la notion de torsion créée au sein d'une chaîne par l'application de champs magnétiques orthogonaux aux extrémités (d'indices 1 et N) d'une chaîne de spins $1/2$. Nous pouvons de même créer une telle torsion pour une chaîne de spins 1. Le calcul de la raideur de spin normalisée se base alors sur le paramètre angulaire θ défini par (2.10). L'hamiltonien à diagonaliser tient compte d'un terme Zeeman additionnel défini par (2.9).

Dans le cas le plus simple, correspondant à l'hamiltonien XXX à N spins soumis à de tels champs magnétiques en bords de chaîne, nous avons représenté figure 3.4 la raideur de spin normalisée en fonction de la température pour différentes tailles N de chaînes. Dans la mesure où les effets de parité émergent dans la zone des basses températures, nous nous sommes polarisés sur la région de comportement quantique. On observe sur la figure une nette distinction de comportement en fonction de la parité de taille avec, à température fixée, une raideur toujours plus forte pour N impair que pour N pair. Les plateaux associés aux tailles finies présentent également des effets de parité avec une largeur plus grande pour N pair que pour N impair. Ce comportement traduit l'existence d'effets de parité dans le spectre d'énergie. Pour N impair, la raideur normalisée est d'autant plus faible que N est élevé. Au niveau des plateaux, les valeurs passent de $\rho_{SN} \approx 2.75$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx 1.11$ pour $N=7$. Pour N pair, la raideur normalisée à

basse température est d'autant plus forte que N est élevé. La variation de raideur est cependant plus faible pour N pair que pour N impair. Cette variation va de $\rho_{SN} \approx 0.8$ pour $N=4$ à $\rho_{SN} \approx 0.88$ pour $N=6$. A la limite thermodynamique, ces deux tendances opposées doivent converger vers une raideur normalisée finie présentant une allure intermédiaire ne permettant pas de distinguer d'effets de parité. En s'écartant de la zone des basses températures, la distinction nette entre chaînes de longueur N paire et impaire persiste jusqu'à environ $T=1J$ au delà de laquelle, le comportement de la raideur normalisée est de type classique, sans effets de parité ni de taille notoires et tendant vers une valeur nulle à plus haute température. En comparant la figure 3.4 au cas identique de la figure 2.7 des spins $1/2$, le comportement de la raideur pour des longueurs de chaînes équivalentes est analogue pour les chaînes de spins $1/2$ et 1 , avec toutefois une raideur plus forte pour les spins 1 que pour les spins $1/2$.

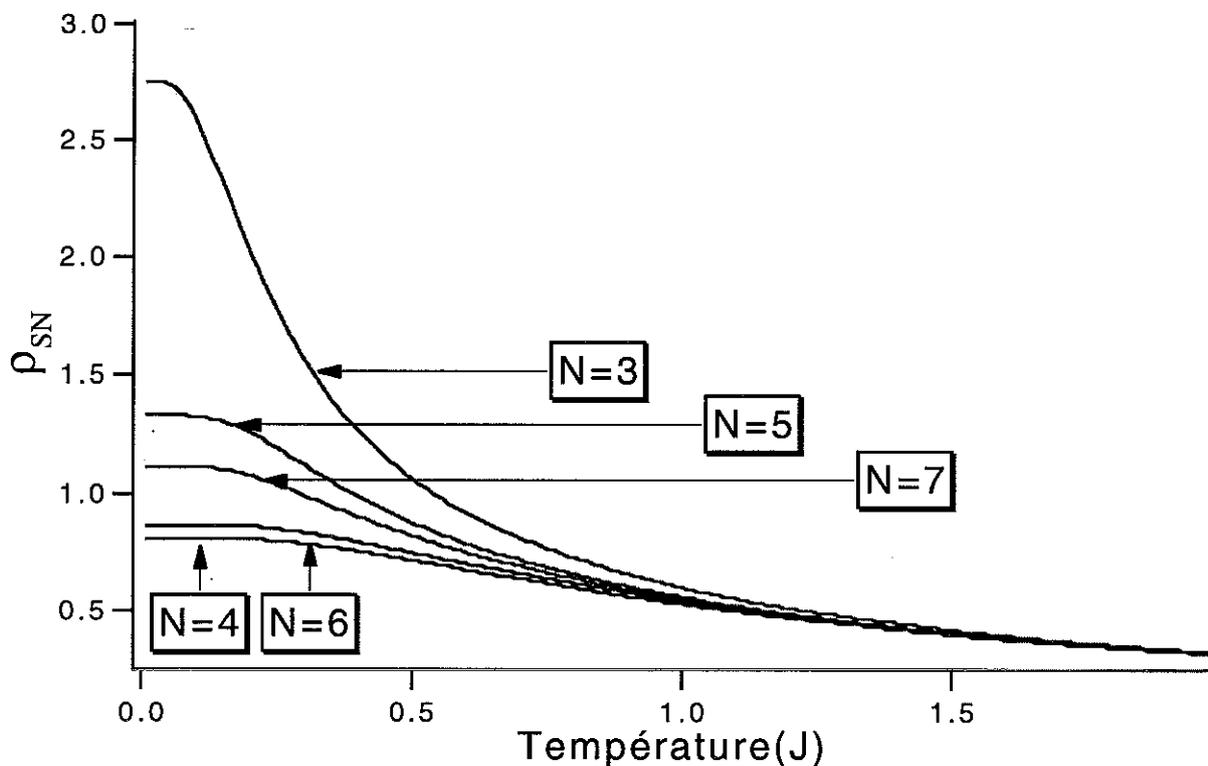


Fig. 3.4: Raideur normalisée pour une torsion créée par des champs magnétiques orthogonaux

Nous avons introduit au §1.1.3.b l'expression de l'hamiltonien bilinéaire-biquadratique en fonction du paramètre β défini par (1.5), ainsi que le diagramme représentatif de phase associé (Fig. 1.13). Ce hamiltonien ayant été particulièrement étudié et les phases y étant relativement bien connues, il représente un exemple d'hamiltonien d'analyse du comportement et de compréhension d'effets de parité potentiels par l'intermédiaire de la raideur normalisée.

Nos chaînes étant de petites tailles, de l'ordre de la longueur de corrélation pour une chaîne XXX, cet hamiltonien bilinéaire-biquadratique possède en l'occurrence des régions de longueurs de corrélation beaucoup plus faibles [Ken 90]. Comme la longueur de corrélation dans

ce hamiltonien est en général plus faible et, au vu des précédents résultats, nous n'avons considéré dans cet hamiltonien qu'un nombre de spins limité au maximum à $N=6$. Cette limitation volontaire permet ainsi, sous les hypothèses précédentes, de dégager les tendances observées dans un beaucoup plus grand nombre de phases (temps de calcul moins longs). L'hamiltonien bilinéaire-biquadratique possède des phases avec des états fondamentaux très dépendants des effets de parité dans le cas des chaînes ouvertes pour une large zone du paramètre β (cf. Fig. 1.13).

En se limitant à la zone de Haldane de la figure 1.13, de nombreux comportements originaux (se manifestant essentiellement sur les états fondamentaux) peuvent émerger. Dans cette zone, trois principales régions se distinguent, correspondant aux cas $-1 < \beta \leq 1/3$, $1/3 < \beta < 0.5$ et $0.5 \leq \beta < 1$ (cf. §1.1.3.b). Dans la mesure où la deuxième région est relativement ésothérique, nous avons choisi de caractériser, dans la suite de ce paragraphe, la raideur de spin dans les deux régions plus caractéristiques de la phase de Haldane, à savoir $-1 < \beta \leq 1/3$ et $0.5 \leq \beta < 1$, le cas $\beta=0$ venant de faire l'objet d'une étude particulière. Ces deux régions présentent dans le cas des chaînes finies ouvertes, des effets de parité pour la première (état fondamental singulet pour N pair, triplet pour N impair) et une périodicité particulière avec le nombre 3 (mod 3) (état fondamental singulet pour N multiple de 3, triplet autrement). Nous précisons cependant la raideur dans les deux cas limites de la zone de Haldane, à savoir $\beta=1$ et $\beta=-1$.

Les chaînes considérées étant périodiques, la plupart des effets de taille finie que nous venons d'énoncer concernant les chaînes ouvertes ne devraient plus se manifester, notamment dans la raideur. L'étude qui va suivre peut être considérée comme une étude introductive et comparative aux cas des chaînes ouvertes que nous aborderons au §3.2.1.

Avant de reproduire les résultats obtenus, redéfinissons les hamiltoniens utilisés pour les diagonalisations exactes. Tenant compte des champs magnétiques aux extrémités et des conditions de périodicités, l'hamiltonien représentatif d'une chaîne définie par (1.5) de longueur N se réécrit sous la forme

$$H_1 = H_{\text{bilinéaire+biquadratique}} + H_{\text{Zeeman}} \quad (3.1)$$

avec pour $H_{\text{bilinéaire+biquadratique}}$ et H_{Zeeman} les expressions suivantes

$$H_{\text{bilinéaire+biquadratique}} = \sum_{i=1}^N H_{i,i+1} = \sum_{i=1}^N (\tilde{S}_i \tilde{S}_{i+1}) + \beta (\tilde{S}_i \tilde{S}_{i+1})^2 \quad (3.2)$$

$$H_{\text{Zeeman}} = g \mu_b (S_1^z B^z + S_N^x B^x) \quad (3.3)$$

dont la condition de périodicité est $H_{N,N+1} = H_{N,1}$. Le cas de l'hamiltonien XXX soumis à ces extrémités à des champs orthogonaux étudiés précédemment correspond ici à l'hamiltonien (3.1) pour la valeur $\beta=0$.

Parmi les points que nous avons choisi d'étudier, certains ont fait l'objet de résolution exacte pour les systèmes sans torsions. Ainsi, le point particulier $\beta=-1$ a été résolu par l'intermédiaire de l'Ansatz de Bethe [Bab 82] (cf. §1.2.1), donnant à la limite thermodynamique un état fondamental singulet et un spectre d'excitation sans gap. Le comportement de la raideur de spin normalisée pour cette valeur de paramètre est représenté figure 3.5. Tout comme pour les études précédentes, nous avons choisi une zone de température suffisamment large pour observer à la fois la zone de comportement quantique (présentant des effets de taille et/ou de parité) et une partie de la zone classique.

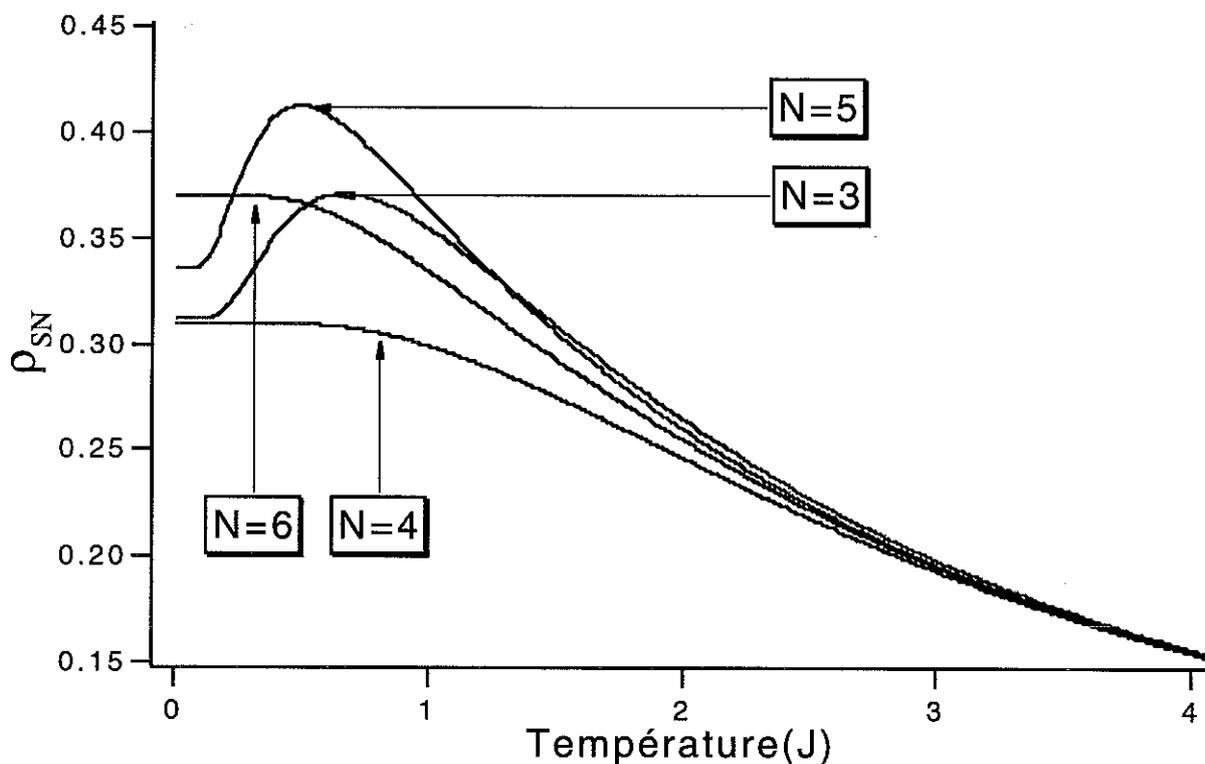


Fig. 3.5: Raideur normalisée pour hamiltonien XXX avec terme biquadratique $\beta=-1$

On constate que la raideur normalisée est positive quelque soit la valeur de N , et relativement forte dans la zone des basses températures. Elle présente une forte dépendance avec la parité de taille et des comportements radicalement opposés. Ces comportements sont, de plus, observables à des températures élevées, de l'ordre de $T=3J$, soit trois fois plus fortes que pour le cas $\beta=0$ vu précédemment. A haute température, la raideur décroît avec une loi de Curie en $1/T$ classique, devenant indépendante de N et tendant régulièrement vers zéro pour T croissante.

Dans la région quantique et pour N pair, la raideur part des plateaux puis décroît de façon régulière pour atteindre la zone classique. La valeur de la raideur est d'autant plus grande que N est grand. Les points au niveau des plateaux croissent ainsi de $\rho_{SN} \approx 0.31$ pour $N=4$ à $\rho_{SN} \approx 0.37$ pour $N=6$. Dans cette même région mais pour N impair, la raideur part d'une petite zone de plateaux, beaucoup plus faible que pour les cas pairs, croît abruptement jusqu'à une valeur maximale pour une température que nous appellerons T_{max} . Passé ce maximum, elle décroît de façon régulière pour rejoindre la zone classique. Les points maximums correspondent à $\rho_{SN} \approx 0.37$ avec $T_{max} = 0.66J$ pour $N=3$ et $\rho_{SN} \approx 0.41$ avec $T_{max} = 0.49J$ pour $N=5$. Ces maximums sont d'autant plus forts et la température associée d'autant plus faible que N est élevé.

Afin d'étudier dans la zone de Haldane un point situé entre le cas $\beta=0$ (modèle XXX) et le cas $\beta=1/3$ (modèle AKLT), nous avons considéré le cas $\beta=0.25$. Contrairement aux deux études de raideur qui précèdent, aucune solution exacte résolue à la limite thermodynamique n'existe pour l'hamiltonien bilinéaire-biquadratique (3.2) ayant cette valeur. Cependant, comme nous l'avons rappelé au §1.2.4, la solution du fondamental est un état proche de l'état VBS, en l'occurrence ici pour une chaîne périodique un état fondamental singulet indépendant de la parité de N . La figure 3.6 montre le comportement de la raideur pour une zone restreinte de la température.

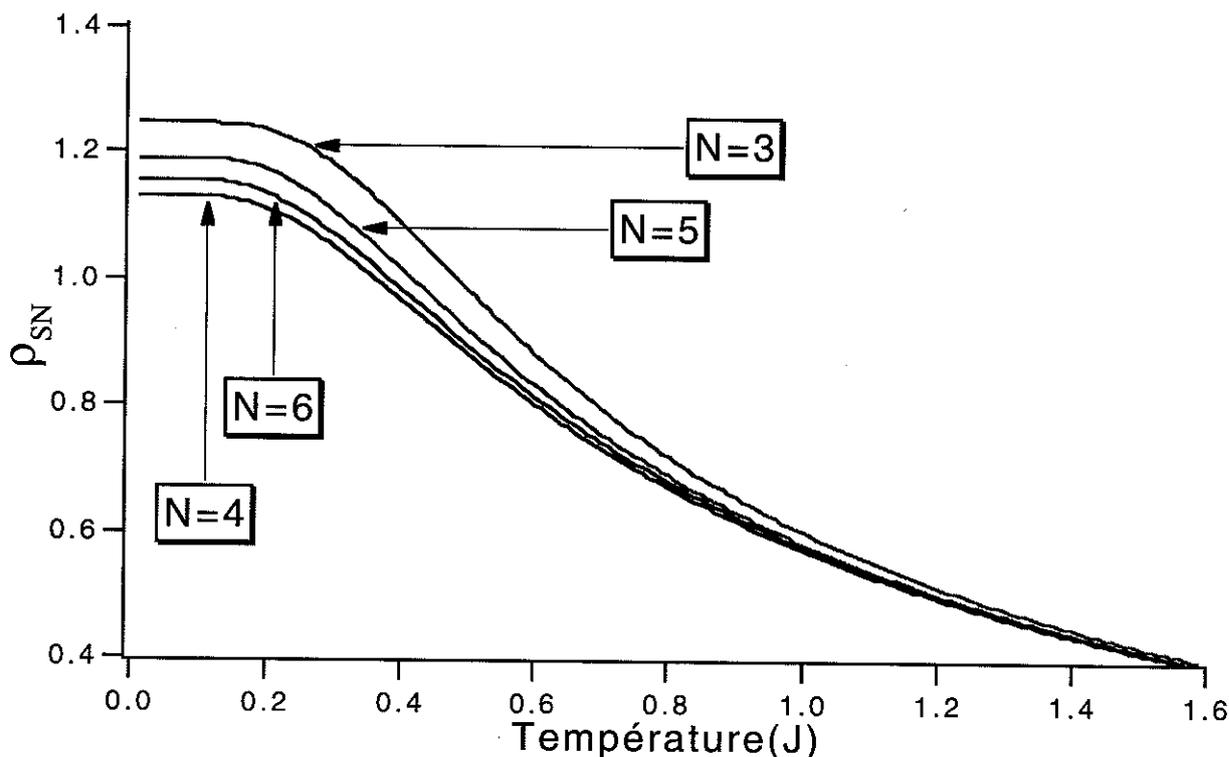


Fig. 3.6: Raideur normalisée pour hamiltonien XXX avec terme biquadratique $\beta=0.25$

Comme le montre la figure 3.6, la raideur de spin y est positive (de l'ordre de l'unité à basse température) et présente des effets de parité dans la partie qualifiée de quantique, bien que ceux-ci soient moins spectaculaires que sur la figure 3.5. Ces effets de parité persistent jusqu'à une température de l'ordre du J . Quelque soit la valeur de N , la raideur en fonction de la température part d'un plateau dans la région basse température pour décroître de façon régulière jusqu'au comportement plus classique d'une raideur indépendante de la parité de N puis nulle à plus haute température.

Dans la région quantique et pour N pair, la raideur normalisée à T fixée est d'autant plus forte que N est élevé. Au niveau des plateaux, les valeurs sont $\rho_{SN} \approx 1.13$ pour $N=4$ et $\rho_{SN} \approx 1.16$ pour $N=6$. Pour N impair et pour les mêmes températures, la raideur est d'autant plus faible que N est élevé. Elle est donc opposée à l'évolution du cas pair. Cette opposition permet de penser que pour des valeurs de N plus grandes, les effets de parité sont susceptibles de converger à basse température vers une limite finie et unique. Les points les plus bas en température correspondent ainsi à $\rho_{SN} \approx 1.25$ pour $N=3$ et $\rho_{SN} \approx 1.19$ pour $N=5$.

Nous avons rencontré au chapitre 1 les états VBS dans la phase de Haldane qui sont la solution exacte du modèle AKLT, valeur $\beta=1/3$ de l'hamiltonien (3.2). Dans le cas périodique, l'état fondamental est, comme nous l'avons précisé pour $\beta=0.25$, indépendant de la parité de N . Sous la contrainte d'une torsion, les résultats de la raideur normalisée sont représentés figure 3.7.

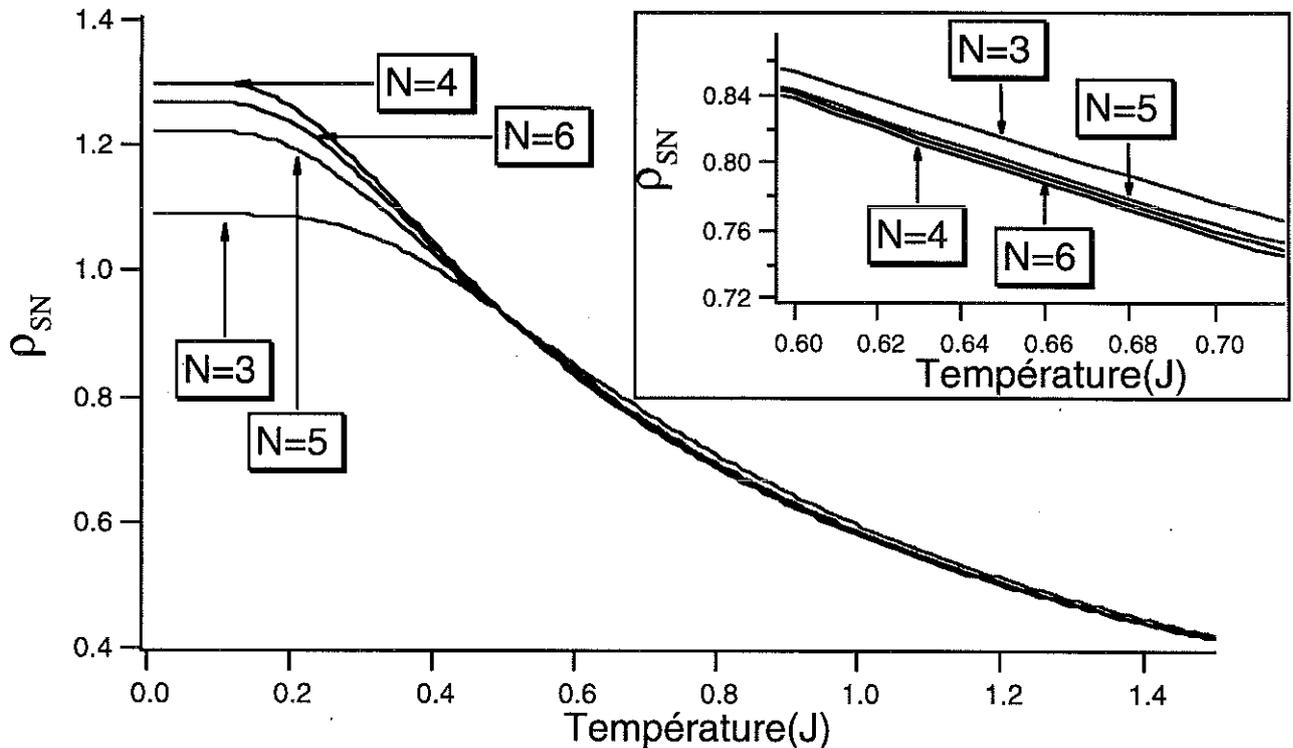


Fig. 3.7: Raideur normalisée pour hamiltonien XXX avec terme biquadratique $\beta=1/3$

Si la raideur est positive quelque soit N , on constate dans le cas présent l'émergence d'effets de parité aux basses températures avec notamment une séparation nette entre N pairs et impairs. Au delà d'une zone de plateaux, les régimes de décroissance en température se distinguent avec la parité, la décroissance de la raideur étant plus forte pour N pair que pour N impair. Les courbes de parités différentes se rejoignent à une température de l'ordre de $T=0.5J$. L'insert de la figure 3.7 représente ainsi la distinction de raideur avec la parité au dessus de cette température. Si à basse température la raideur est plus forte pour N pair par rapport à N impair, cette tendance s'inverse au delà du point de jonction. En conservant cette dernière hiérarchie, celle-ci tend ostensiblement vers le comportement classique avec une raideur normalisée nulle et indépendante de N et de la parité à plus haute température.

Dans la région quantique et pour N pair, la raideur normalisée positive est d'autant plus faible que N est élevé. Les valeurs de celle-ci pour les plateaux sont ainsi de $\rho_{SN} \approx 1.3$ et 1.27 pour $N=4$ et 6 . Pour N impair, la raideur normalisée positive est d'autant plus forte que N est élevé. Les valeurs de la raideur pour les plateaux sont ainsi de $\rho_{SN} \approx 1.09$ et 1.22 pour $N=3$ et 5 .

En progressant dans la zone de Haldane et pour des valeurs supérieures à $\beta=1/3$ du modèle AKLT, nous arrivons naturellement à la deuxième zone originale, $0.5 \leq \beta \leq 1$, dominée dans le cas des chaînes ouvertes par un effet de taille liée à la modulation 3 du nombre de spins présents. Nous avons choisi de caractériser dans la suite de ce paragraphe la raideur aux points $\beta=0.5$, $\beta=0.75$ et $\beta=1$.

La figure 3.8 montre le comportement de la raideur normalisée pour le cas spécifique $\beta=0.5$. La raideur y est positive et d'amplitude comparable aux cas précédents. Bien que des tendances d'effets de parité semblent subsister, ils sont cependant moins marqués que dans tous les cas d'hamiltoniens biquadratiques abordés.

A basse température, les valeurs pour N pair ou impair ne sont plus distinctes et seuls les effets de taille persistent. On remarque que le comportement de la raideur est dominé par l'effet de périodicité 3 de N avec les cas $N=3$ et $N=6$. Ainsi, la largeur des plateaux observés est plus forte pour $N=3$ et 6 que pour $N=4$ et 5 . La tendance, observée pour $\beta=1/3$ à basse température fixée, de la décroissance pour N pair ou de la croissance pour N impair de la raideur normalisée avec l'augmentation de N persiste. Le cas $N=6$ semble ainsi se rapprocher du cas $N=3$.

L'influence de la parité de N sur le comportement de la raideur redevient effective à partir d'une température de l'ordre de $0.23J$. Au dessus d'une température de $1J$, les comportements convergent vers le cas classique sans effets de parité, de périodicité 3 ni de taille, la raideur normalisée décroissant d'une façon régulière vers la raideur classique nulle. Dans la région quantique, les valeurs de la raideur pour les plateaux sont de $\rho_{SN} \approx 1.92$ et 1.33 pour $N=4$ et 6 ainsi que $\rho_{SN} \approx 0.88$ et 1.43 pour $N=3$ et 5 .

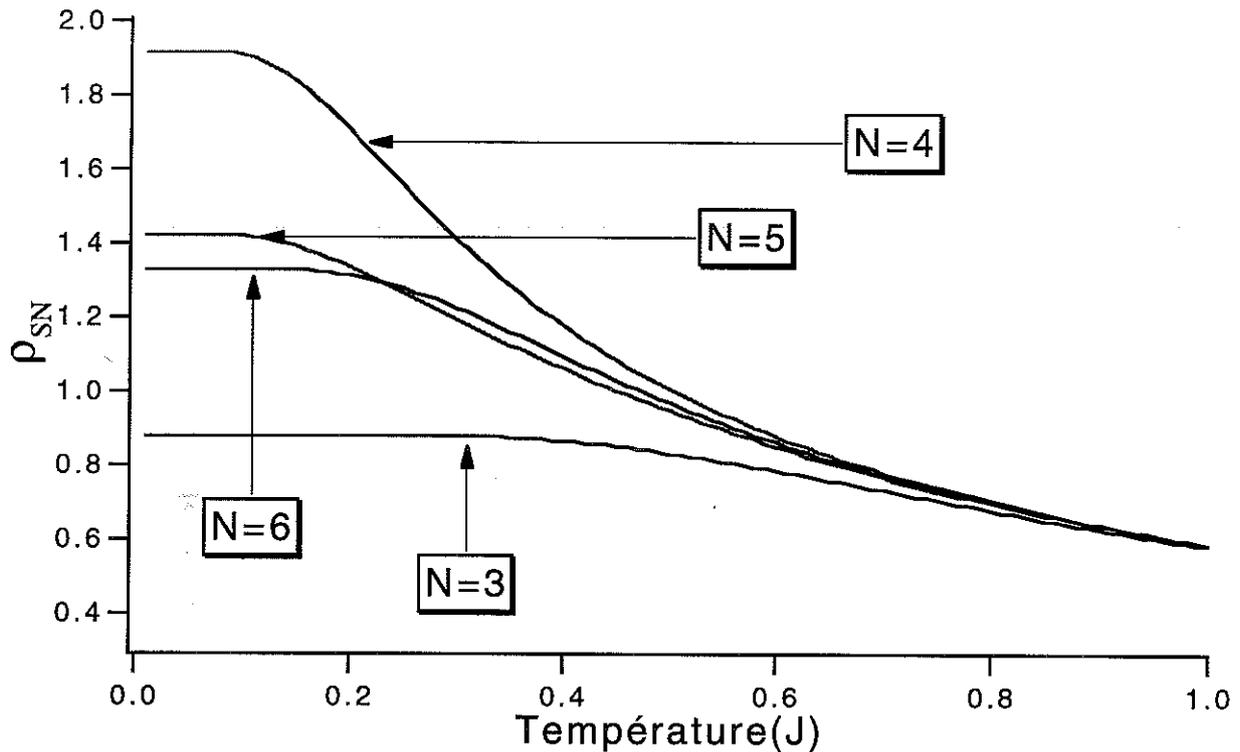


Fig. 3.8: Raideur normalisée pour hamiltonien XXX avec terme biquadratique $\beta=0.5$

Afin de mieux caractériser le domaine $0.5 \leq \beta < 1$, en dehors du point limite interne, nous nous sommes également intéressés au cas $\beta=0.75$. Comme pour les points de cette zone, il n'existe pas à la limite thermodynamique de solutions exactes connues mais, dans le cas des chaînes ouvertes finies sans contraintes, l'état fondamental est singulet si N est un multiple de 3 et un triplet autrement. Pour une chaîne périodique soumise à la torsion, la raideur normalisée pour $\beta=0.75$, et pour différentes valeurs de N , est représentée figure 3.9 dans une zone de température restreinte à $1J$.

Contrairement au cas précédent, on ne peut distinguer de véritables effets de parité dans la zone de température considérée. Bien que la chaîne soit fermée, la condition de modulation et de périodicité 3 permet nettement de distinguer les courbes $N=3$ et $N=6$ des autres. Les cas extérieurs à cette périodicité 3 présentent une décroissance régulière avec la température, très abrupte pour $N=4$. On notera que la raideur est toujours plus forte pour ces courbes que pour celles avec N multiple de 3. Quelque soit la valeur de N , les courbes de raideur convergent toutes vers la même courbe classique, indépendante des effets de taille et convergente vers zéro au delà de $T=1J$.

Comme le montre l'insert de la figure 3.9, la variation de raideur pour les cas $N=3$ et 6 passe lentement, après une zone de plateau, par un maximum avant de décroître de façon plus abrupte vers le comportement classique. La position de ce maximum diminue mais l'amplitude

de la raideur augmente quand N croît, de l'ordre $\rho_{SN} \approx 1.11$ pour $T=0.25J$ dans le cas $N=6$ et $\rho_{SN} \approx 0.7$ pour $T=0.45J$ dans le cas $N=3$.

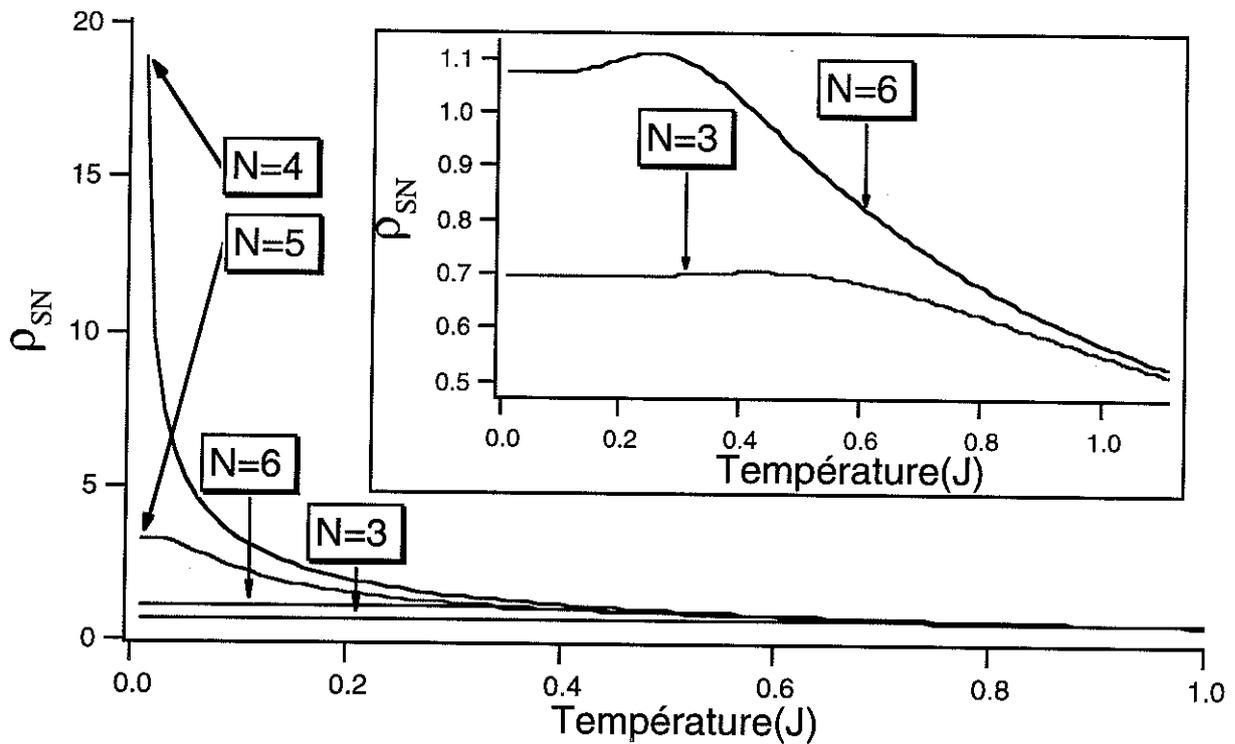


Fig. 3.9: Raideur normalisée pour hamiltonien XXX avec terme biquadratique $\beta=0.75$

Le point $\beta=1$ auquel nous consacrons la fin de ce paragraphe correspond à la deuxième solution exacte située en bordure supérieure du domaine $0.5 \leq \beta < 1$ de la zone de Haldane de la figure 1.13. L'hamiltonien correspondant à ce point a été résolu exactement à la limite thermodynamique par l'Ansatz de Bethe [Lai 74]. Le comportement en température de la raideur normalisée pour des chaînes périodiques de tailles variables pour $\beta=1$ est représenté figure 3.10 dans la région des basses températures.

Comme tous les points de cette région de paramètre β , la raideur à basse température présente une allure distincte entre chaînes de longueur N multiple de 3 et les autres, comportement analogue aux chaînes ouvertes. Aucun effet de parité ne se manifeste dans la zone de température considérée. Les chaînes extérieures à la périodicité 3 présentent une décroissance régulière mais très abrupte avec la température. On peut remarquer que, pour ces dernières, les courbes partent toutes à basse température d'un point identique avant de se scinder pour atteindre des régimes de décroissance comparables. On note que la raideur est toujours plus forte pour ces courbes que pour celles avec N multiple de 3. A plus haute température, quelque soit la valeur de N , les valeurs de la raideur convergent toutes vers la même courbe classique, indépendante des effets de taille et convergente vers zéro au delà de $T=1.4J$.

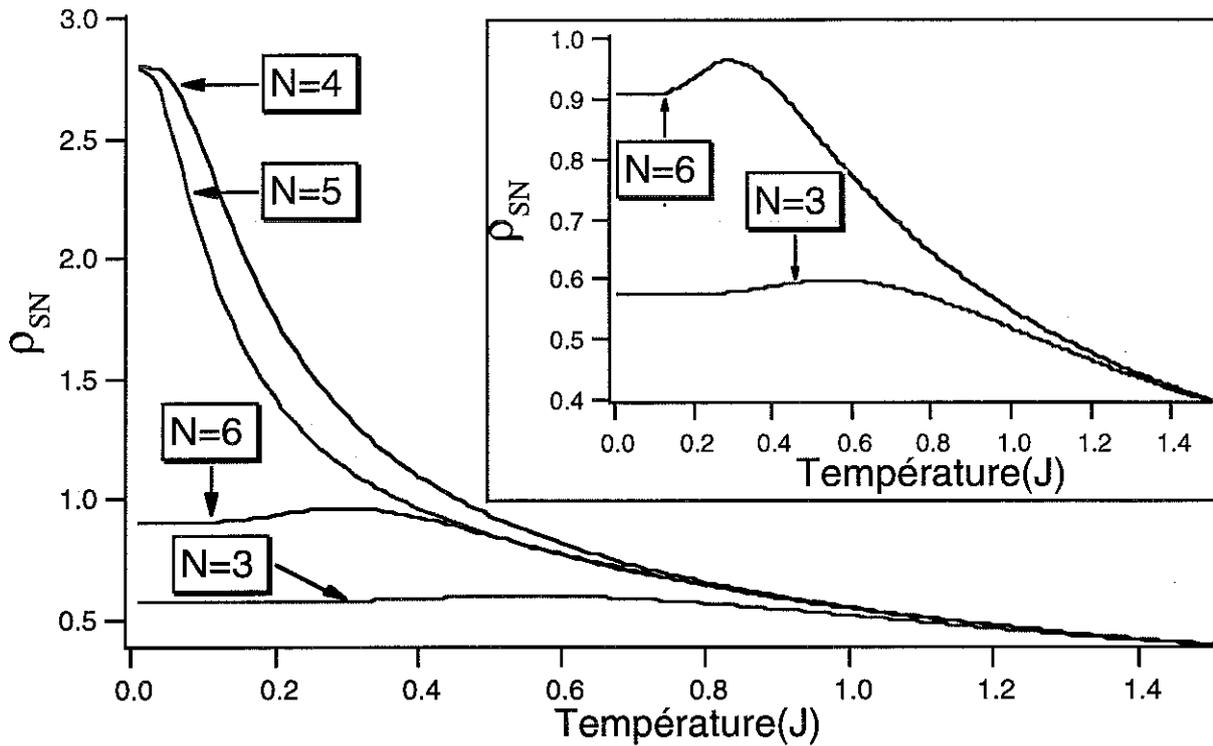


Fig. 3.10: Raideur normalisée pour hamiltonien XXX avec terme biquadratique $\beta=1$

L'insert de la figure 3.10 montre l'allure spécifique des chaînes de longueur N de périodicité 3. La raideur croît tout d'abord, après un plateau, jusqu'à un maximum puis décroît de façon abrupte vers le comportement classique. La position de ces maximums, de l'ordre de $T=0.3J$ pour $N=6$ et $T=0.55J$ pour $N=3$, est plus haute en température ici que dans le cas $\beta=0.75$. L'amplitude relative du maximum, $\rho_{SN} \approx 0.97$ pour $N=6$ et $\rho_{SN} \approx 0.6$ pour $N=3$, est à l'opposé, plus faible ici que dans le cas précédent. On peut noter que, comme le point de la zone de Haldane opposé $\beta=-1$ présentait un maximum de raideur et des effets de parité pour un point proche de la phase dimère, la modulation 3 et le maximum pour $N=3$ et 6 se trouve près d'une phase supposée trimère. Ce comportement particulier semble être annonciateur d'un changement de phase avec un maximum pour ces pics.

3.2 Chaînes à conditions de bords ouvertes

Nous suivrons dans ce paragraphe une démarche similaire au §3.1 en considérant dans la suite de ce chapitre des chaînes ouvertes. Nous nous attacherons à spécifier les effets de parité de taille dans la susceptibilité longitudinale et dans la raideur de spin normalisée. Les chaînes ouvertes présentant de forts effets de parité, elles constituent, en principe, des systèmes modèles d'observation de tels effets.

3.2.1 Effets de parité dans la susceptibilité longitudinale

Nous avons considéré au (§3.1.1) l'influence de la parité de taille sur la susceptibilité dans le cas des chaînes périodiques de spins 1. Nous allons ici considérer ce même cas pour des conditions de bords ouvertes, en conservant les formes hamiltoniennes étudiées.

De façon analogue au traitement de la susceptibilité longitudinale pour le cas périodique, nous entamons cette étude par le cas d'une chaîne ouverte décrite par un hamiltonien XXX constituée de N spins 1. Nous avons représenté figure 3.11 la susceptibilité normalisée en fonction de la température pour différentes longueurs N de chaînes. La phase de Haldane caractérisant la limite thermodynamique de ce hamiltonien possède, dans le cas de chaînes ouvertes, un spectre du fondamental lié à la parité (cf. §1.1.3.b).

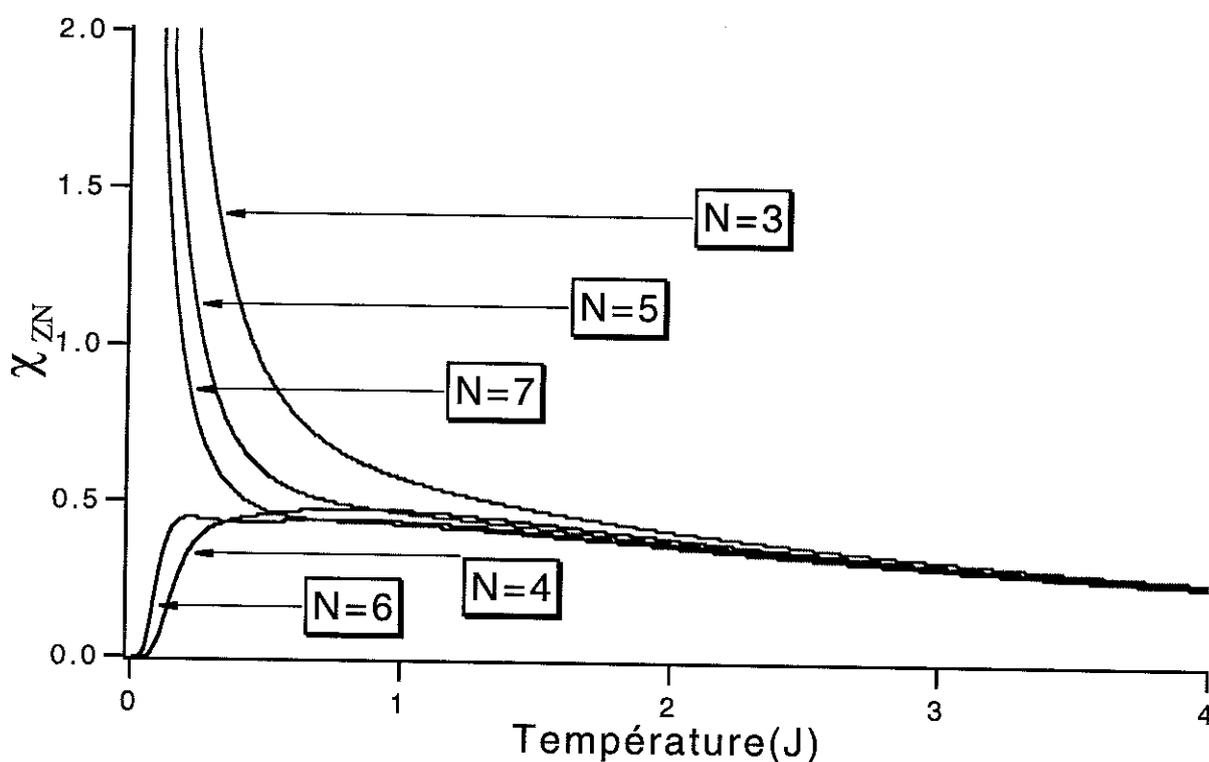


Fig. 3.11: Susceptibilité normalisée pour différentes longueurs de chaînes: cas XXX

Dans la zone quantique, comme pour le cas des conditions périodiques (cf. Fig. 3.1), les effets de parité sont très forts. Ils sont d'autant plus accentués ici car la nature magnétique des états fondamentaux est intrinsèquement liée à la parité. Ainsi, à très basse température, on constate sur la figure que dans les cas pairs, la susceptibilité converge vers une susceptibilité nulle alors que dans les cas impairs, celle-ci est finie et distincte. Ces comportements de la susceptibilité sont prévisibles dans le cadre de la solution VBS définie au §I.2.4. Cette approche prédit que dans les chaînes ouvertes, l'état fondamental est un singulet magnétique pour N pair et

un triplet magnétique pour N impair. Ces influences se manifestent ainsi dans la susceptibilité à basse température où le caractère singulet (associé à l'existence d'un gap dû aux effets de taille finie) génère une susceptibilité nulle alors que le triplet donne une susceptibilité finie.

À plus haute température, la susceptibilité passe par un maximum situé sur une large zone, moins accentué dans ce cas que dans les chaînes périodiques, puis rejoint une zone classique de comportement paramagnétique où la susceptibilité normalisée est indépendante de N et des effets de parité de N , décroissante en $1/T$.

Nous avons de même considéré le comportement de la susceptibilité normalisée pour une chaîne de spins 1 de type XX pour des conditions de bords ouvertes. Le passage du modèle XXX au modèle XX s'accompagne ici d'un changement de phase. On passe de la phase de Haldane à la phase XY (cf. Fig. 1.11). L'allure correspondante de la susceptibilité normalisée est représentée figure 3.12. Dans le cas de conditions de bords périodiques, ce changement de phase ne s'accompagne pas du changement de la nature magnétique des états fondamentaux. Dans le cas présent, le passage du modèle XXX au modèle XX s'accompagne d'un changement net de la nature des états fondamentaux.

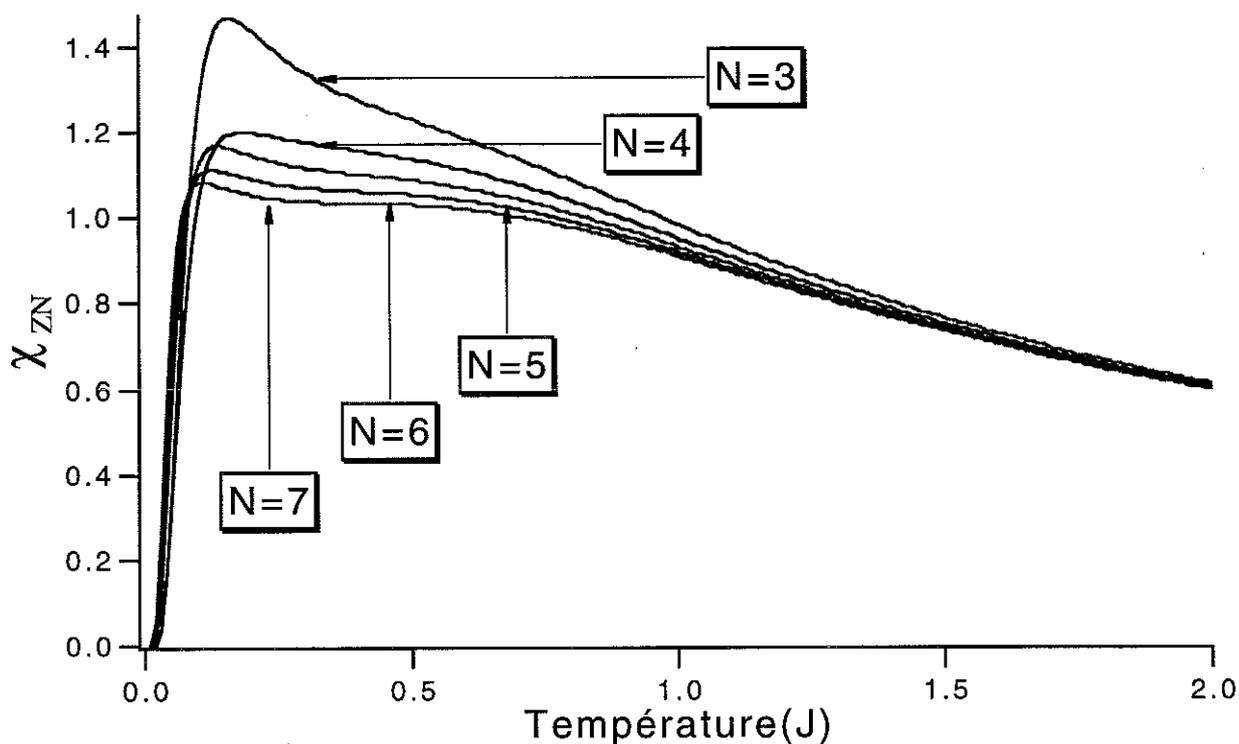


Fig. 3.12: Susceptibilité normalisée pour différentes longueurs de chaînes: cas XX

Les effets de parité constatés à température nulle figure 3.11 ne sont plus présents figure 3.12. Cette distinction entre le Hamiltonien XXX et XX est due à l'existence du changement de phase. L'état fondamental dans le cas de l'hamiltonien XX de spins 1 avec conditions de bords

ouvertes est un singulet magnétique, même pour les petites chaînes, indépendamment de la parité de N . Si les effets de taille persistent sur la susceptibilité normalisée, la figure 3.12 montre très nettement que les effets de parité constatés jusqu'à présent dans la zone quantique ont quasiment disparu. La susceptibilité présente ainsi une alternance régulière avec la parité de taille.

L'accroissement en température permet le peuplement progressif de tous les niveaux d'énergie respectifs avec un maximum de la susceptibilité quand la température est suffisante pour atteindre tous les niveaux. Le régime de susceptibilité normalisée change alors pour atteindre progressivement un comportement paramagnétique indépendant de la taille et inversement proportionnel à la température. On peut constater cependant qu'il existe entre le maximum d'amplitude et le comportement paramagnétique des grandes températures une zone intermédiaire de décroissance où des effets de taille persistent.

3.2.2 Raideur de spin sous l'influence de champs magnétiques aux bords de chaîne

L'hamiltonien XXX d'une chaîne ouverte de taille finie de spins 1 est sensible à l'influence de la parité du nombre de spins considérés. Dans la mesure où le §3.1.3 considérait les chaînes fermées soumises à une torsion générée par des champs magnétiques orthogonaux, nous suivrons la même démarche ici en considérant des chaînes ouvertes cette fois-ci. Une comparaison directe des effets de parité avec les résultats obtenus au §3.1.3 sera effectuée, sans entrer toutefois complètement dans les détails qui donnerait un aspect redondant à l'analyse.

Par simplicité, nous considérerons tout d'abord une chaîne ouverte décrite par l'hamiltonien XXX à N spins défini par (2.11) et soumise à la torsion générée par le terme supplémentaire Zeeman décrit par (2.9). Le paramètre angulaire θ nécessaire aux calculs de raideur étant défini encore une fois par (2.10). Les courbes de la figure 3.13 montrent la raideur de spin normalisée en fonction de la température pour des tailles N de chaînes variables.

Indépendamment de la parité de taille, les courbes suivent la même allure générale. En partant de la zone de plateau, la raideur décroît lorsque la température augmente, rendant de moins en moins nette la distinction entre chaînes de tailles différentes. Au-dessus de $T=0.8J$, le comportement de la raideur normalisée est de type classique, sans effets de taille notoires et décroissant vers une valeur nulle. On ne constate pas d'effets de parité. Plus les chaînes sont grandes et plus la raideur normalisée est forte. Elle passe ainsi de $\rho_{SN} \approx 1.62$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx 3.84$ pour $N=7$.

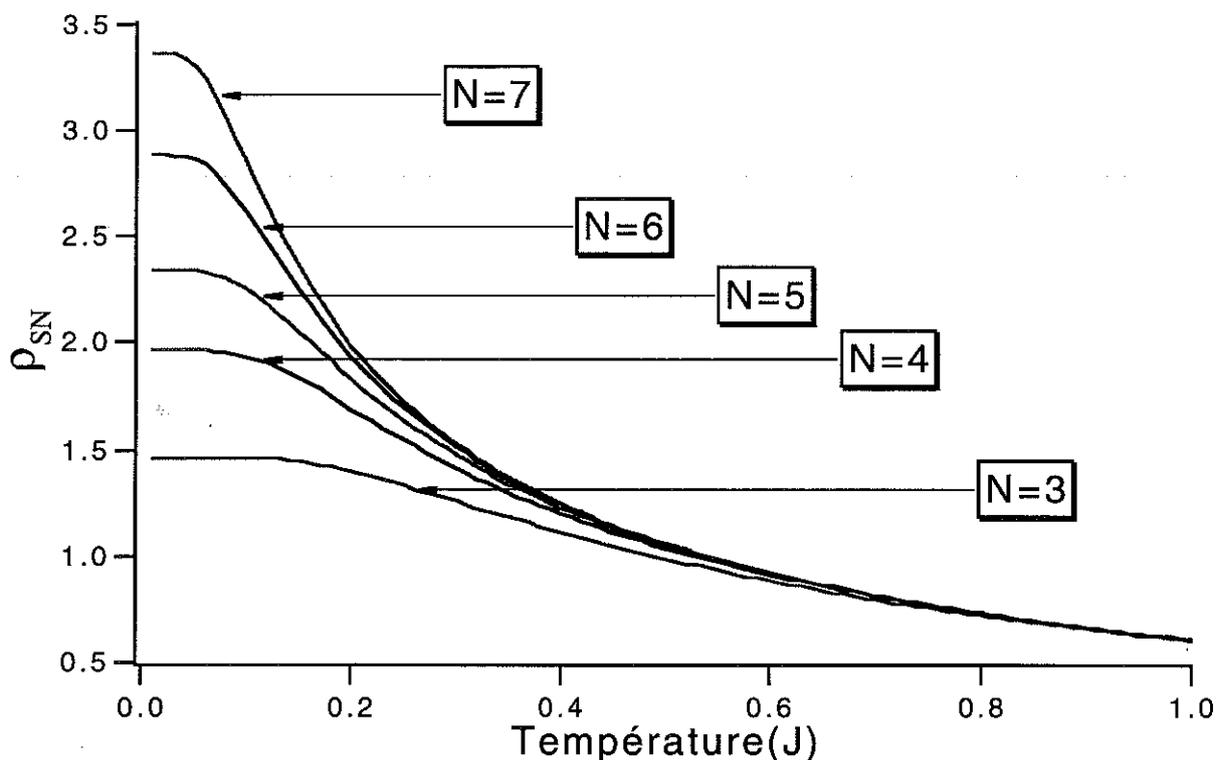


Fig. 3.13: Raideur normalisée pour une torsion créée par des champs magnétiques orthogonaux

Nous avons défini au paragraphe précédent l'hamiltonien bilinéaire-biquadratique soumis à la contrainte de torsion. La condition de périodicité étant rompue, l'hamiltonien à considérer pour les diagonalisations est encore défini par l'expression (3.1) en prenant cette fois-ci pour le terme bilinéaire-biquadratique l'expression suivante

$$H_{\text{bilinéaire+biquadratique}} = \sum_{i=1}^{N-1} H_{i,i+1} = \sum_{i=1}^{N-1} (\vec{S}_i \vec{S}_{i+1}) + \beta (\vec{S}_i \vec{S}_{i+1})^2 \quad (3.4)$$

Comme nous l'avons précisé au §3.1.3 pour l'hamiltonien (3.1), nous nous restreindrons aux seules régions $-1 < \beta \leq 1/3$ et $0.5 \leq \beta < 1$ de la phase de Haldane (cf. Fig.1.13 du §1.1.3.b) en focalisant notre attention sur les points particuliers $\beta = -1, 1$ (limites extérieures de la zone de Haldane) et $\beta = 0.25, 1/3$ et 0.75 (compris dans la zone de Haldane), le cas $\beta = 0$ étant défini par le cas précédent. Les hamiltoniens de chaînes (sans partie Zeeman ici) possèdent des effets originaux de taille, à savoir des effets de parité pour la région $-1 < \beta \leq 1/3$ (état fondamental singulet pour N pair, triplet pour N impair) et des effets de périodicité 3 (état fondamental singulet pour N multiple de 3, triplet autrement) dans la région $0.5 \leq \beta < 1$.

Par analogie avec le cas périodique, considérons le comportement de la raideur normalisée pour le cas à la limite $\beta = -1$. La figure 3.14 représente le comportement en température de la raideur normalisée dans ce cas limite pour des chaînes de tailles variables.

Comme pour le cas identique périodique, on distingue dans la région quantique une séparation très nette des comportements de la raideur en fonction de la parité. La raideur normalisée est positive, toujours plus forte, à température fixée, pour N impair que pour N pair. Contrairement au cas périodique, la décroissance est ici identique pour toutes les valeurs de N . Partant de plateaux, les raideurs décroissent régulièrement en température jusqu'au comportement classique (dans le cas périodique, les cas impairs présentent d'abord une remontée en température). Les plateaux suivent l'évolution traditionnelle en $1/N$ associée au gap de taille finie. Ils sont plus larges pour les chaînes de longueur N paire que pour celles de longueur N impaire. Les points représentatifs des plateaux sont respectivement $\rho_{SN} \approx 0.53$ et 0.55 pour $N=3$ et 5 ainsi que $\rho_{SN} \approx 0.43$ et 0.47 pour $N=4$ et 6 . Ces comportements sont analogues au cas périodique. Au delà de $T=1.7J$, la raideur rejoint un comportement classique indépendant de N et des effets de parité, tendant vers une raideur nulle à haute température.

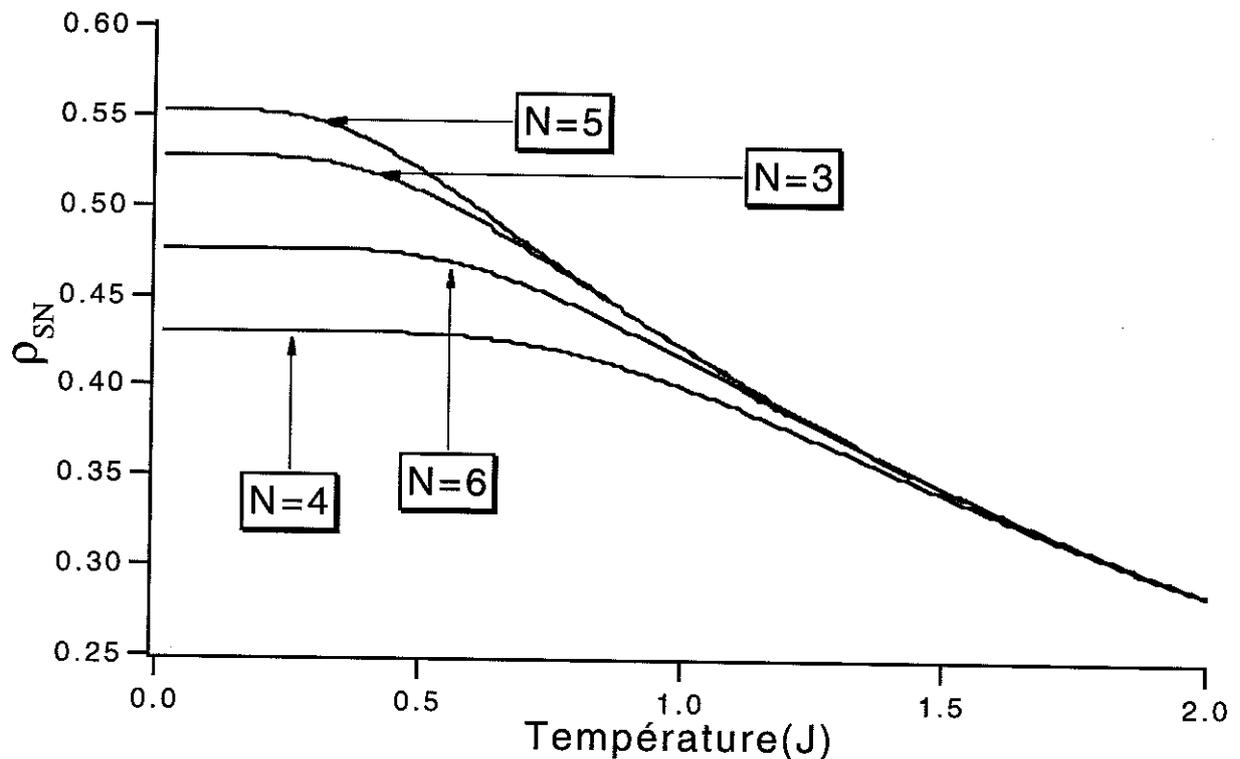


Fig. 3.14: Raideur normalisée pour hamiltonien XXX avec terme biquadratique $\beta=-1$

Afin de caractériser un point dans la région $-1 < \beta \leq 1/3$ de la zone de Haldane autre que $\beta=0$ et sans solution exacte, la figure 3.15 montre l'allure de la raideur normalisée pour le point $\beta=0.25$. Dans ce cas précis, l'analyse en états VBS, et notamment l'existence des spins de bouts de chaîne, permet de définir pour l'hamiltonien sans torsion que l'état fondamental est singulet pour N pair et triplet pour N impair.

Contrairement au cas précédent et au cas $\beta=0.25$ périodique, il n'y a pas d'effets particuliers de parité de taille. Ce comportement est cependant identique au point $\beta=0$ de la même

région et semble être une caractéristique du comportement de la raideur normalisée dans toute la zone spécifique de Haldane $-1 < \beta \leq 1/3$.

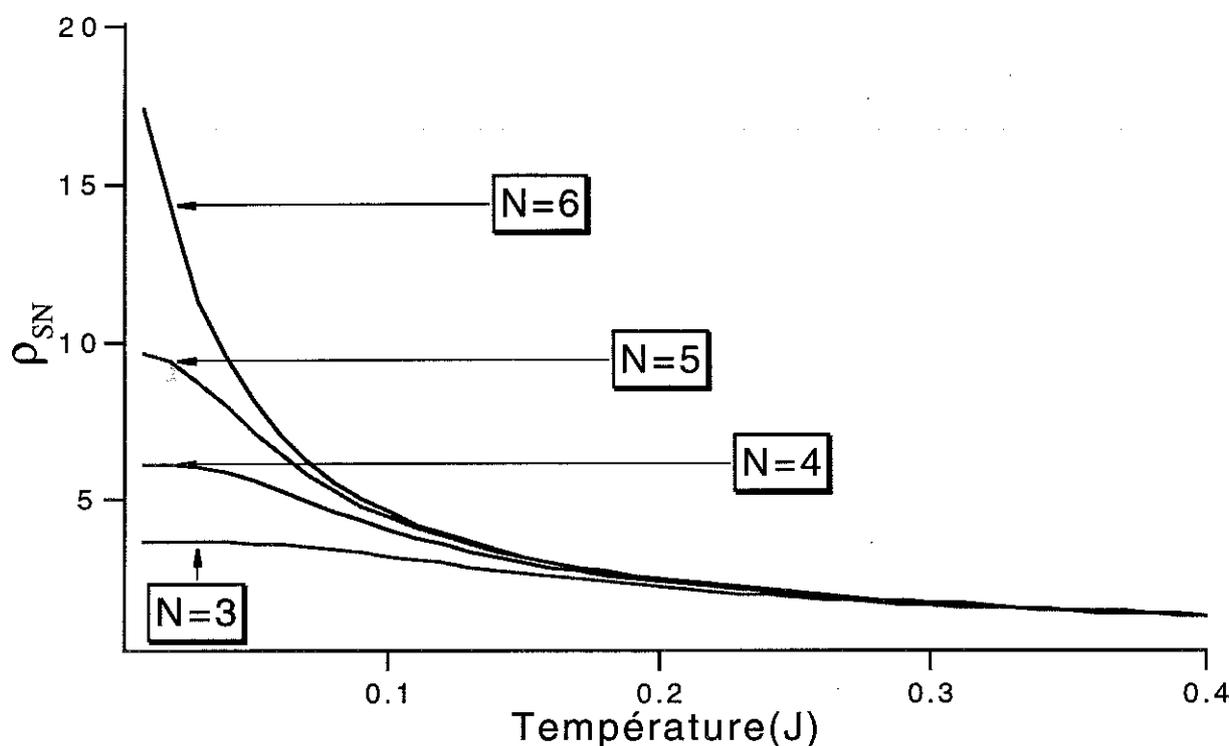


Fig. 3.15: Raideur normalisée pour hamiltonien XXX avec terme biquadratique $\beta=0.25$

La raideur normalisée à basse température est d'autant plus forte que N est élevé, présentant une alternance normale des chaînes de parité différentes. Une faible zone de plateaux existe pour les petites chaînes. La largeur de ceux-ci étant inversement proportionnelle à N, ils sont inexistantes dans le cas N=6. A titre indicatif, nos points les plus bas en température passent de $\rho_{SN} \approx 3.66$ pour N=3 à $\rho_{SN} \approx 16.4$ pour N=6. La décroissance de la raideur normalisée est régulière avec la température, très abrupte pour N=5 et N=6 est fortement abrupte, et converge rapidement vers le comportement classique. Au delà de $T=0.3J$, les effets de taille sont inexistantes, la raideur classique tendant plus lentement vers zéro

Le cas spécifique $\beta=1/3$, correspondant au modèle AKLT en absence des termes Zeeman (cf. §1.2.4), possède des spins effectifs de bouts de chaîne qui génèrent les effets de parité caractéristiques de la zone de Haldane $-1 < \beta \leq 1/3$. Nous avons représenté à la figure 3.16 les courbes de la raideur normalisée pour $\beta=1/3$ pour des chaînes soumises aux champs magnétiques orthogonaux appliqués aux extrémités. Contrairement au même cas périodique, il n'existe pas ici d'effets de parité.

La raideur est positive et relativement identique au cas $\beta=0.25$, d'autant plus forte que N est élevé. Cette croissance de la raideur avec N sans alternance confirme l'hypothèse que ce comportement est caractéristique de la région $-1 < \beta \leq 1/3$ dans les chaînes ouvertes.

Comparativement au cas périodique, la raideur est ici très forte, allant jusqu'à un facteur 40 pour $N=6$. Seul le cas $N=3$ possède un faible plateau à basse température, les autres chaînes présentant une décroissance de la raideur très abrupte sans plateau. Les points les plus bas de la zone quantique évoluent de $\rho_{SN} \approx 7.64$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx 57.58$ pour $N=6$, les points $N=5$ et 6 sont quant à eux quasiment confondus. La température de début de comportement classique est très faible de l'ordre $T \approx 0.1J$. Le passage de $\beta=0$ à $\beta=1/3$ s'accompagne ainsi d'une décroissance de cette température caractéristique pour cette région de la zone de Haldane.

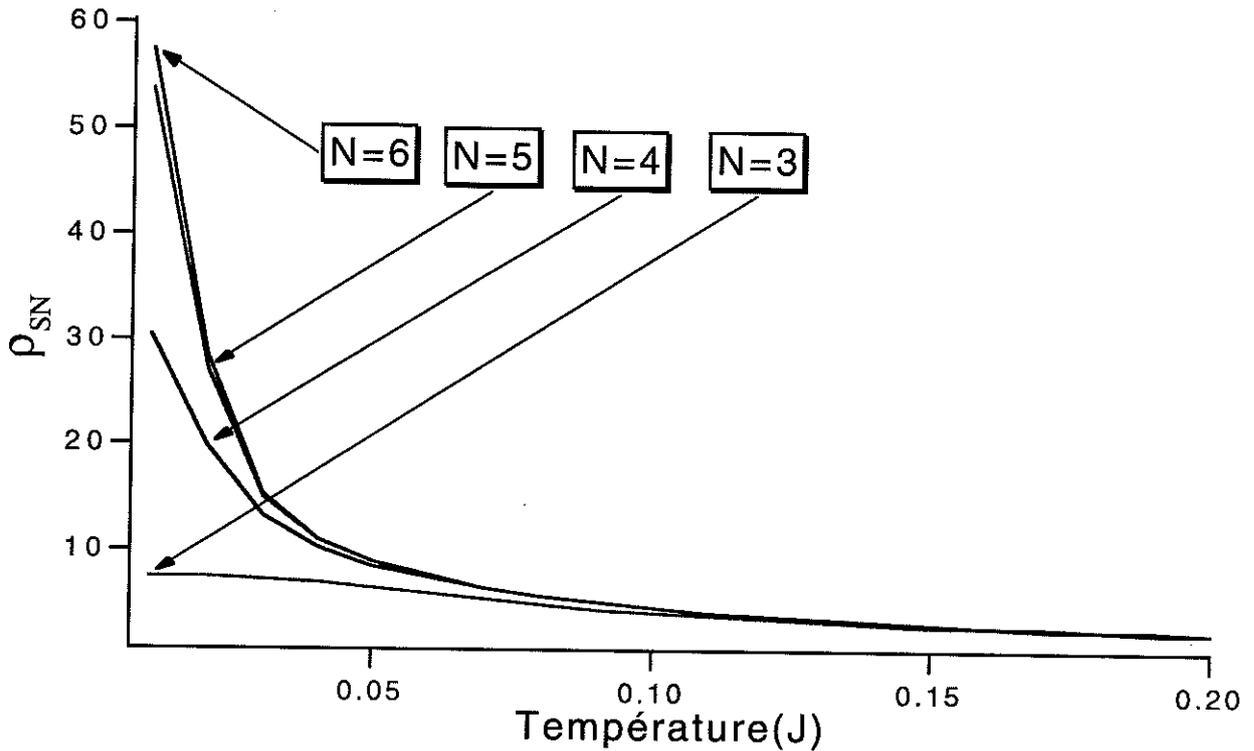


Fig. 3.16: Raideur normalisée pour hamiltonien XXX avec terme biquadratique $\beta=1/3$

La deuxième région spécifique dans la phase de Haldane $0.5 \leq \beta < 1$ présente également des comportements originaux pour les chaînes ouvertes sans contraintes. Afin de caractériser cette phase en termes de raideur normalisée et d'effets de parité, la figure 3.17 présente les courbes en température de la raideur normalisée pour $\beta=0.5$.

Il est difficile dans le cas présent de distinguer un effet de parité ou de périodicité particulier. La raideur y est positive, avec à l'instar des cas $\beta=0.25$ et $\beta=1/3$, une raideur plus forte pour $N=6$ que pour les autres valeurs de N . Les plateaux observés pour les petites chaînes suivent cependant un comportement particulier. L'insert de la figure 3.17 caractérise plus précisément la raideur pour les cas $N=3, 4$ et 5 pour une gamme restreinte de température. L'allure des courbes reste cependant difficile à analyser en termes de parité ou de périodicité. Au delà de $0.15J$, le comportement redevient classique avec une raideur normalisée indépendante de N , décroissante lentement et régulièrement vers une valeur nulle à plus haute température.

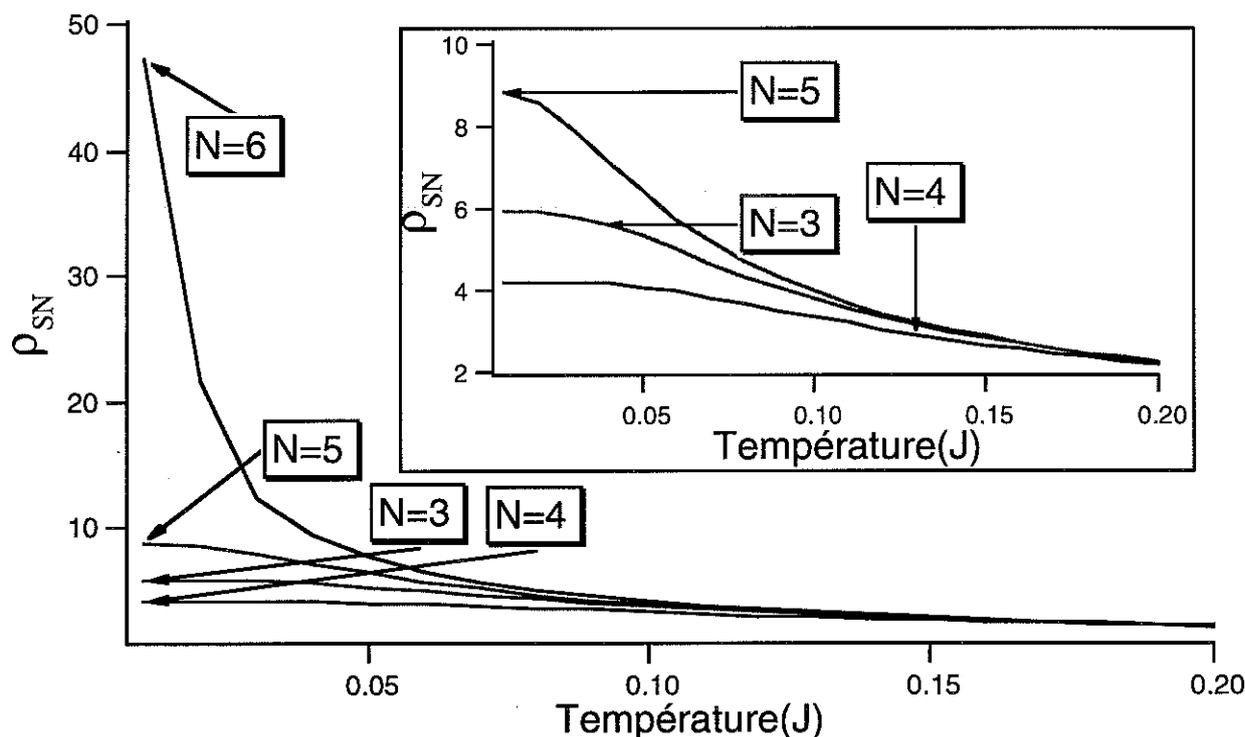


Fig. 3.17: Raideur normalisée pour hamiltonien XXX avec terme biquadratique $\beta=0.5$

Afin de caractériser un point interne à la zone $0.5 \leq \beta < 1$, et à titre de comparaison avec le cas périodique, la figure 3.18 représente l'évolution en température de la raideur normalisée pour le cas spécifique $\beta=0.75$. Contrairement au cas précédent mais conformément au cas périodique, la raideur présente ici un effet de périodicité particulier vis à vis de la multiplicité 3. Ce comportement est cependant moins marqué ici que dans le cas périodique.

L'insert de la figure reprend ces courbes pour les plus faibles valeurs de raideur. Les courbes à basse température possèdent de légers plateaux, dont l'évolution en largeur avec N distingue les cas $N=3$ et 6 du cas $N=5$. Les valeurs au niveau des plateaux correspondent à $\rho_{SN} \approx 1.58$ pour $N=4$ et $\rho_{SN} \approx 1.83$ et 2.45 pour $N=3$ et 6. La décroissance en température suit une forme régulière sans remontée particulière, similaire pour les cas $N=3$ et 6 mais se distinguant du cas $N=4$. Ces comportements confirment bien l'effet de périodicité de taille. Le régime de décroissance de $N=4$ est plus faible que celle de $N=3$ et 6. Partant d'une valeur limite plus basse, la courbe de raideur pour $N=4$ croise celles de $N=3$ et 6. Le cas $N=5$ est quant à lui particulier avec une raideur très forte de l'ordre de $\rho_{SN} \approx 18.54$ pour le point le plus bas en température et décroît rapidement. La température de début de comportement classique est supérieure à $T=0.6J$, correspondant ainsi à une température supérieure au cas $\beta=0.75$ précédent.

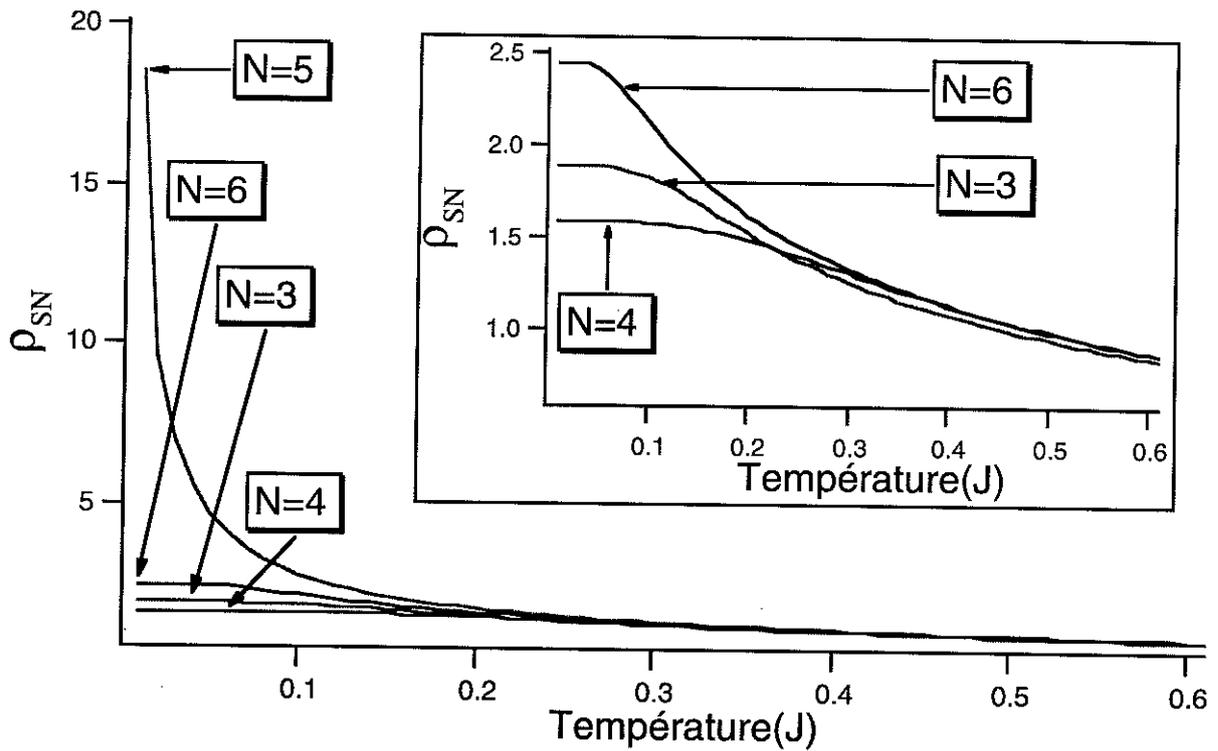


Fig. 3.18: Raideur normalisée pour hamiltonien XXX avec terme biquadratique $\beta=0.75$

Le dernier point considéré au §3.1.3 concerne le cas $\beta=1$ qui possède une solution exacte à la limite thermodynamique. Sous les conditions de torsions imposées, la raideur normalisée en température est représentée figure 3.19 pour des chaînes de tailles variables.

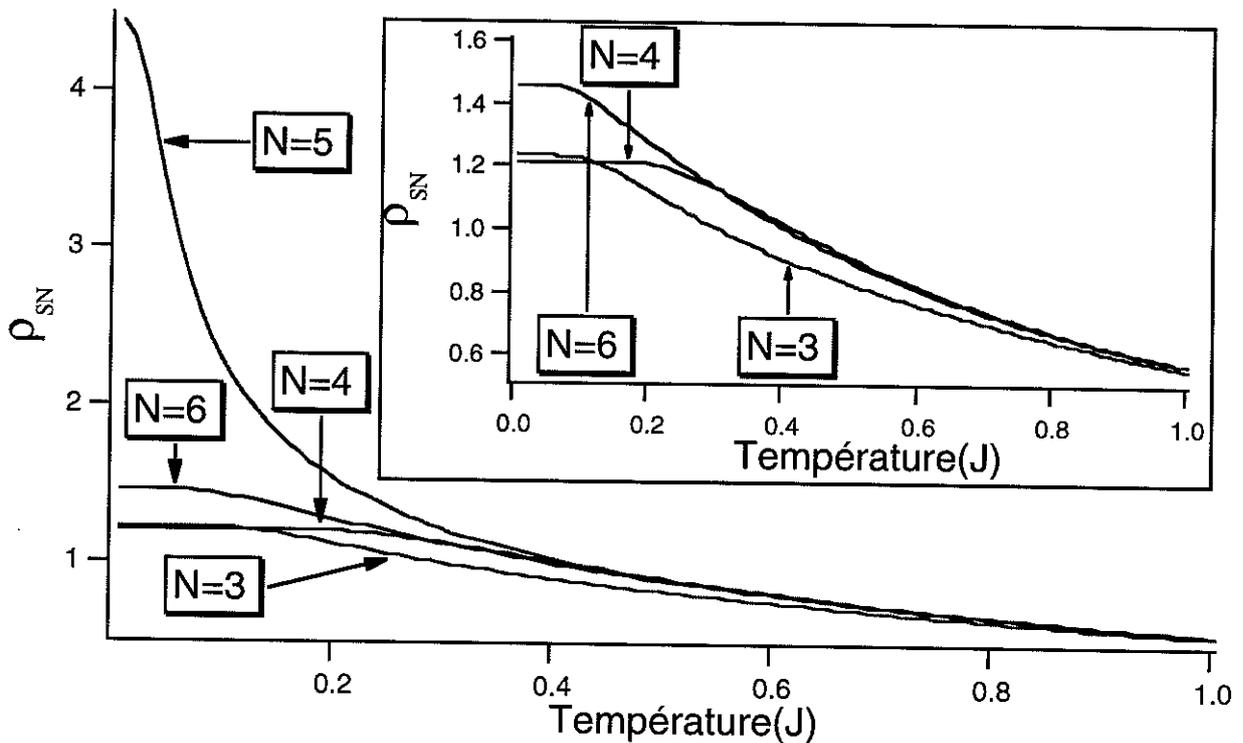


Fig. 3.19: Raideur normalisée pour hamiltonien XXX avec terme biquadratique $\beta=1$

De façon analogue à la chaîne périodique, des effets de périodicité avec la multiplicité 3 sont observés, beaucoup moins marqués cependant ici que pour le cas périodique.

L'insert de la figure 3.19 reprend ces résultats dans une zone plus restreinte qui confirme cette tendance avec la multiplicité. Pour $N=3$ et 6, la raideur part d'un plateau à basse température puis décroît de façon régulière pour atteindre la zone classique. Comme pour $\beta=0.75$, le cas $N=4$ quant à lui part d'un plateau plus large mais plus bas, et décroît plus lentement en température. Les courbes se croisent puis se rejoignent progressivement vers le comportement classique indépendant de tout effet de taille et de parité. Le cas $N=5$ possédant une raideur très forte par rapport aux autres décroît de façon abrupte. Les valeurs limites à basse température correspondent à $\rho_{SN} \approx 1.21$ pour $N=4$ ainsi que $\rho_{SN} \approx 1.23$ et 1.46 pour $N=3$ et 6. La température de début de régime classique correspond à $T \approx 1J$, valeur plus faible ici que pour le cas périodique.

3.2.3 Chaîne semi-contrainte

Nous avons défini au §2.3.3 une torsion créée par une chaîne semi-contrainte dans le cas des spins 1/2. Ce type de contrainte étant indépendante de la valeur intrinsèque du spin, nous allons l'appliquer dans la suite de ce chapitre au cas des spins 1. Conformément à la démarche établie précédemment, partant d'un hamiltonien XXX décrivant une chaîne de spins, nous avons défini la condition de semi-contrainte comme revenant à bloquer un spin en bout de chaîne, laissant l'autre extrémité libre de contrainte. Par convention et en conservant la notation utilisée au §2.3.2, nous avons considéré le spin bloqué de site $N+1$ comme ayant la valeur définie par $|S\rangle = |1\rangle$. Le paramètre angulaire nécessaire au calcul de la raideur de spin s'obtient en appliquant une rotation d'angle θ sur ce dernier spin bloqué. Dans la suite de ce paragraphe, le paramètre N représentant le nombre de spins non contraints sera assimilé à la longueur de chaîne, la dimension réelle de celle-ci étant $N+1$.

Conservant l'expression (2.19) pour le terme de couplage semi-contraint entre le spin N et le spin $N+1$, les nombres C_{N+1}^z , C_{N+1}^+ et C_{N+1}^- prennent dans le cas des spins 1 et à l'aide des expressions (2.18), les formes suivantes

$$\begin{aligned} C_{N+1}^z &= \text{Cos}(\theta) \\ C_{N+1}^+ &= \text{Sin}(\theta) \\ C_{N+1}^- &= \text{Sin}(\theta) \end{aligned} \tag{3.5}$$

Dans le cas XXX, l'hamiltonien a diagonaliser pour les calculs de raideur normalisée tient compte du terme à N spins (2.11) additionné du terme particulier de contrainte (2.19) entre

le spin N et le spin $N+1$, les nombres C_{N+1}^z , C_{N+1}^+ et C_{N+1}^- prenant les expressions définies par les termes (3.5).

La raideur de spin normalisée obtenue pour cet hamiltonien semi-contraint isotrope est représentée figure 3.20. Quelque soit la valeur de N , la raideur obtenue est nulle, comportement identique au cas des spins $1/2$. Ce blocage ne créant qu'une petite perturbation locale dans l'hamiltonien de chaîne finie ouverte, du fait de la faible valeur de l'angle choisi (de l'ordre de 10^{-3} radians), aucune torsion globale suffisamment forte n'est générée. Le bruit numérique rend dans ce cas inexploitable les données fournies.

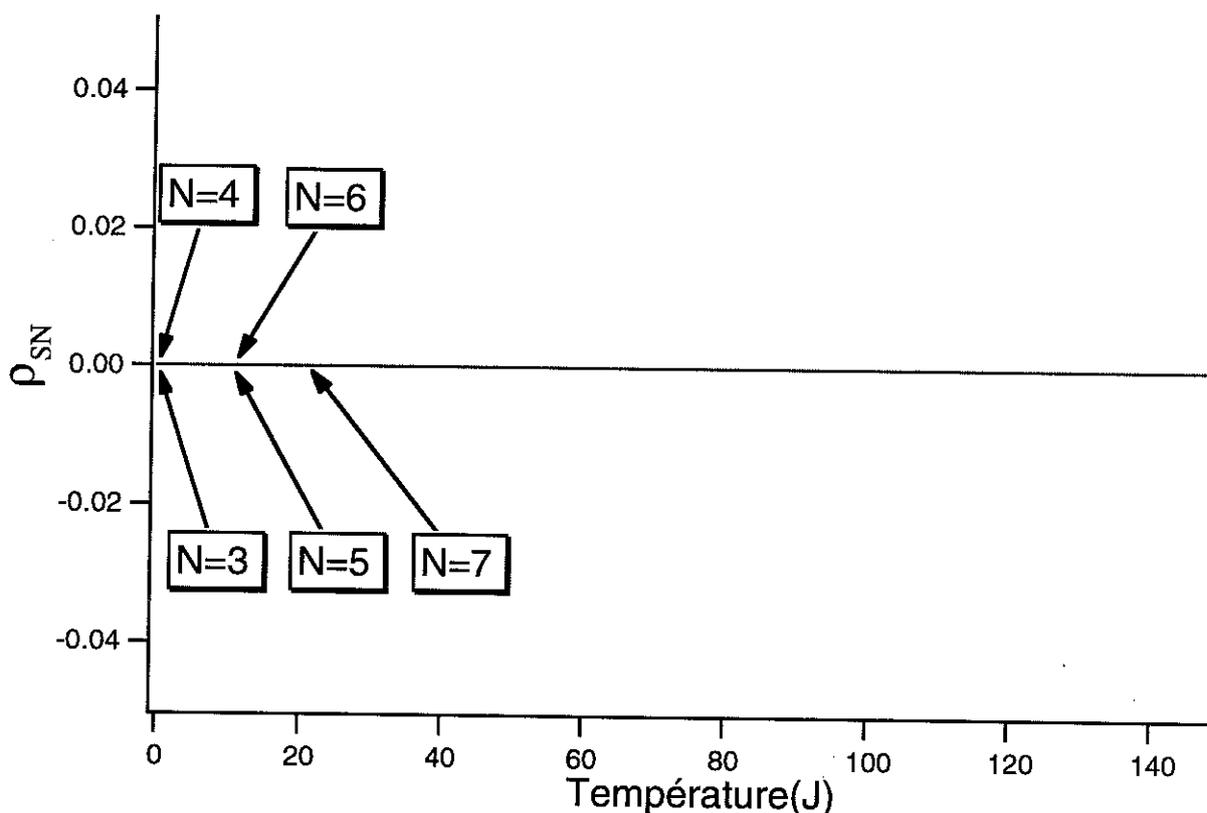


Fig. 3.20: Raideur normalisée pour une chaîne XXX semi-contrainte

Afin de suivre une procédure identique aux spins $1/2$, nous avons introduit une anisotropie d'échange. Dans le cas des spins 1 , le diagramme de basse énergie de l'hamiltonien XXZ est cependant plus riche que celui des spins $1/2$ (cf. §1.1.3.b et fig. 1.11) avec 3 régions bien distinctes correspondant aux phases XY, de Haldane et Antiferromagnétique. Nous caractériserons dans ces trois régions la raideur de spin normalisée en nous attachant à relever, quand ils existent, les effets de parité de taille.

Au titre d'une étude comparative avec les spins $1/2$, nous nous sommes limités dans un premier temps à des cas voisins du point $J_x/J_z=1$ correspondant au modèle XXX. Dans toute cette zone de Haldane associée à l'anisotropie d'échange, il existe un effet de parité particulier dû

à la taille finie issu des états VBS. Les niveaux d'énergie du fondamental et du premier excité peuvent être associés à un état singulet (triplet) et triplet (singulet) pour une chaîne paire (impaire) (cf. §1.1.3.b et §1.2.4). Cependant, sous la contrainte, ces comportements sont modifiés.

Ainsi, la figure 3.21 présente les courbes de raideur normalisée en fonction de la température pour différentes tailles de chaînes pour $J_x/J_z=0.99$. Ce point correspond sur la figure 1.11 au point $\lambda=J_z=1.01$, légèrement à droite du point Heisenberg. La raideur normalisée est positive mais faible, ne possédant pas apparemment d'effets de parité contrairement au cas des spins 1/2.

Les courbes suivent une décroissance régulière en température mais cette décroissance montre un rapprochement progressif entre chaînes de parité distinctes. Il est difficile pour ce type de comportement de conclure à un éventuel effet de parité. L'amplitude de la raideur est d'autant plus forte que N est élevé, respectant ainsi l'alternance des parités. A titre indicatif, les valeurs au niveau des plateaux à basse température passent de $\rho_{SN} \approx 7.4 \cdot 10^{-3}$ pour N=3 à $\rho_{SN} \approx 9.2 \cdot 10^{-3}$ pour N=7. Au delà de $T=0.8J$, le comportement devient classique, indépendant de la parité de N et converge vers une valeur nulle.

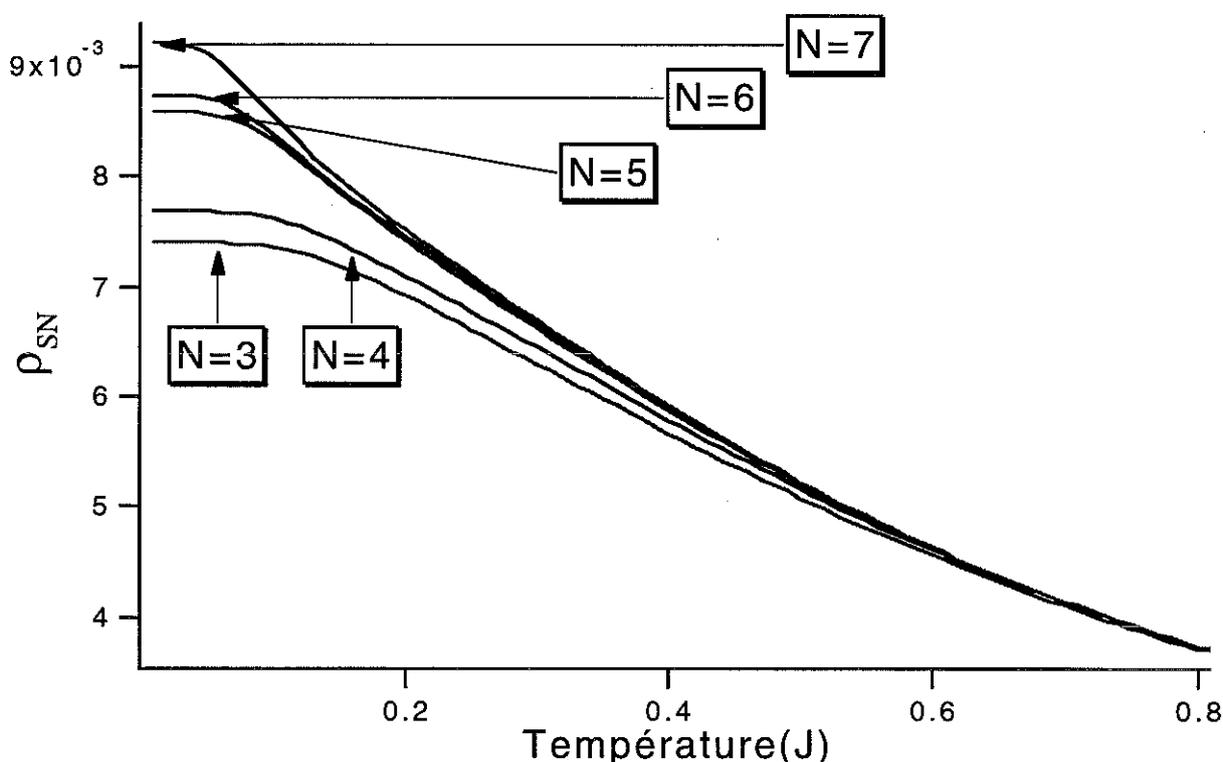


Fig. 3.21: Raideur normalisée pour une chaîne XXZ semi-contrainte avec $J_x/J_z=0.99$

La figure 3.22 reprend le comportement étudié précédemment pour le cas spécifique $J_x/J_z=0.9$, soit le point $\lambda=1.1$. De façon analogue aux spins 1/2, l'augmentation d'anisotropie

s'accompagne également d'une croissance de la raideur. Dans le cas présent, l'augmentation d'un facteur 10 de l'anisotropie n'engendre cependant qu'une raideur moins de 10 fois plus forte. Comme pour $J_X/J_Z=0.99$, aucun effet de parité ne se distingue. Les courbes pour les plus longues chaînes se regroupent. Ce regroupement semble annonciateur d'un comportement à la limite thermodynamique sans effets de parité. Les plateaux à basse température possèdent une raideur allant de $\rho_{SN} \approx 6.59 \cdot 10^{-2}$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx 7.56 \cdot 10^{-2}$ pour $N=7$. La décroissance en température est régulière et le comportement classique devient effectif à une température également de l'ordre de $0.8J$

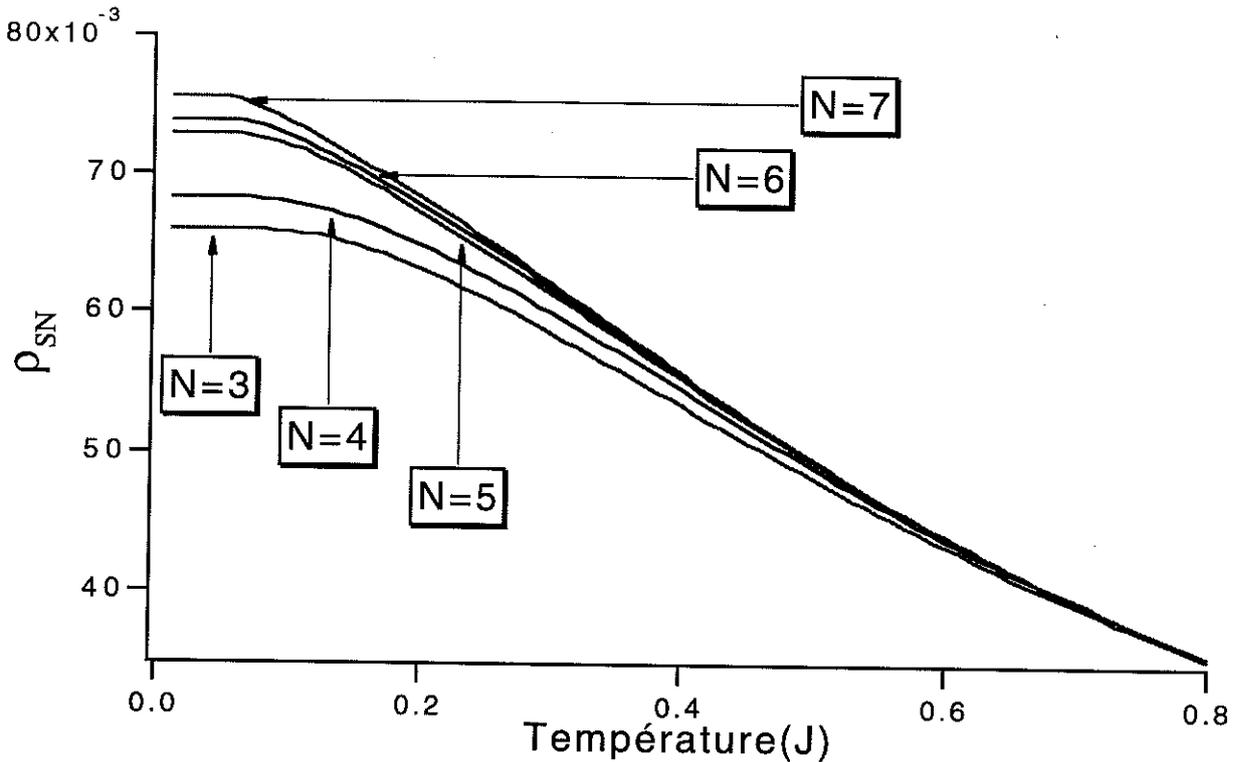


Fig. 3.22: Raideur normalisée pour une chaîne XXZ semi-contrainte avec $J_X/J_Z=0.9$

En considérant des points du paramètre λ situés à gauche du point Heisenberg de la région de Haldane de la figure 1.11, on passe pour les spins $1/2$ dans la phase XY. Ici, pour les spins 1, ce point reste dans la zone de Haldane. Les courbes de raideur normalisée en fonction de la température pour des chaînes de tailles variables sont représentées figure 3.23 pour $J_X/J_Z=1.01$ (soit $\lambda=0.99$). La raideur y est négative et sans effets de parité. La valeur négative de la raideur (traduisant une instabilité du système vis à vis des torsions imposées) est une caractéristique également observée pour les spins $1/2$. Ces derniers présentaient cependant des courbes se distinguant par les effets de parité et dont les amplitudes y étaient moins fortes.

A l'exception de la valeur négative, l'amplitude suit la même évolution que dans le cas $J_X/J_Z=0.99$. Il n'y a pas d'effets de parité. La raideur pour la région des plateaux croît de $\rho_{SN} \approx -7.59 \cdot 10^{-2}$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx -9.66 \cdot 10^{-2}$ pour $N=7$. Du fait de la valeur négative, la

raideur croît en température (décroît en valeur absolue). A partir des plateaux de la région quantique, la croissance en température est régulière et rejoint la région classique pour une température de l'ordre de 0.8J, indépendante de tout effet de parité de taille, tendant vers une valeur nulle à plus haute température.

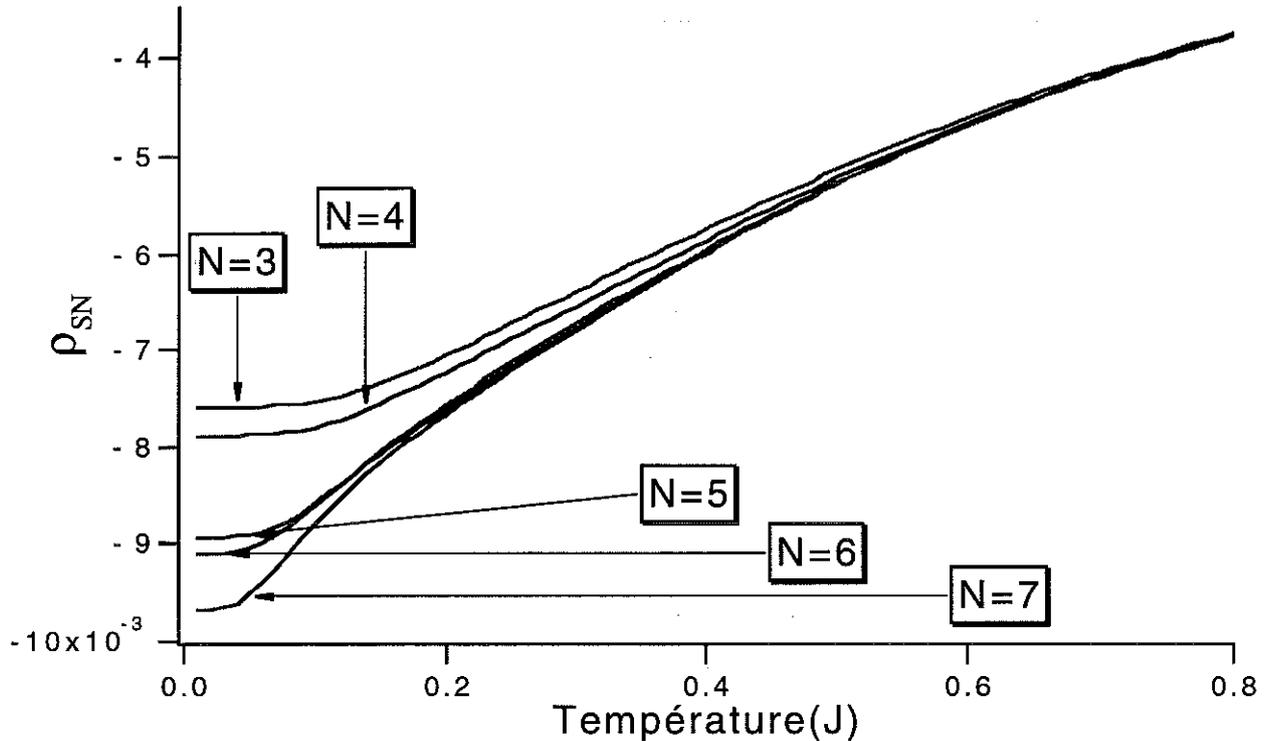


Fig. 3.23: Raideur normalisée pour une chaîne XXZ semi-contrainte avec $J_x/J_z=1.01$

Un échange de plus en plus anisotrope dans cette partie du spectre doit également se caractériser par une augmentation (en valeur absolue) de la raideur normalisée. La figure 3.24 montre la raideur de spin pour une anisotropie telle que $J_x/J_z=1.1$ (soit $\lambda=0.9$) dans une zone de température restreinte à la région quantique.

Conformément à l'analyse précédente concernant l'influence de l'anisotropie, l'amplitude en valeur absolue augmente d'un facteur proche de 10, pour une augmentation de l'anisotropie d'un facteur 10.

L'évolution en température et en fonction de la taille est analogue au cas $J_x/J_z=1.01$. A basse température, il n'existe pas d'effets de parité. Les amplitudes associées aux plateaux décroissent de $\rho_{SN} \approx -8.54 \cdot 10^{-2}$ pour N=3 à $\rho_{SN} \approx -12.4 \cdot 10^{-2}$ pour N=7. Les courbes convergent régulièrement jusqu'à la zone de comportement classique située aux environs de 0.8J. Au delà de cette température, aucune distinction de taille n'est perceptible et la raideur normalisée tend vers la valeur nulle.

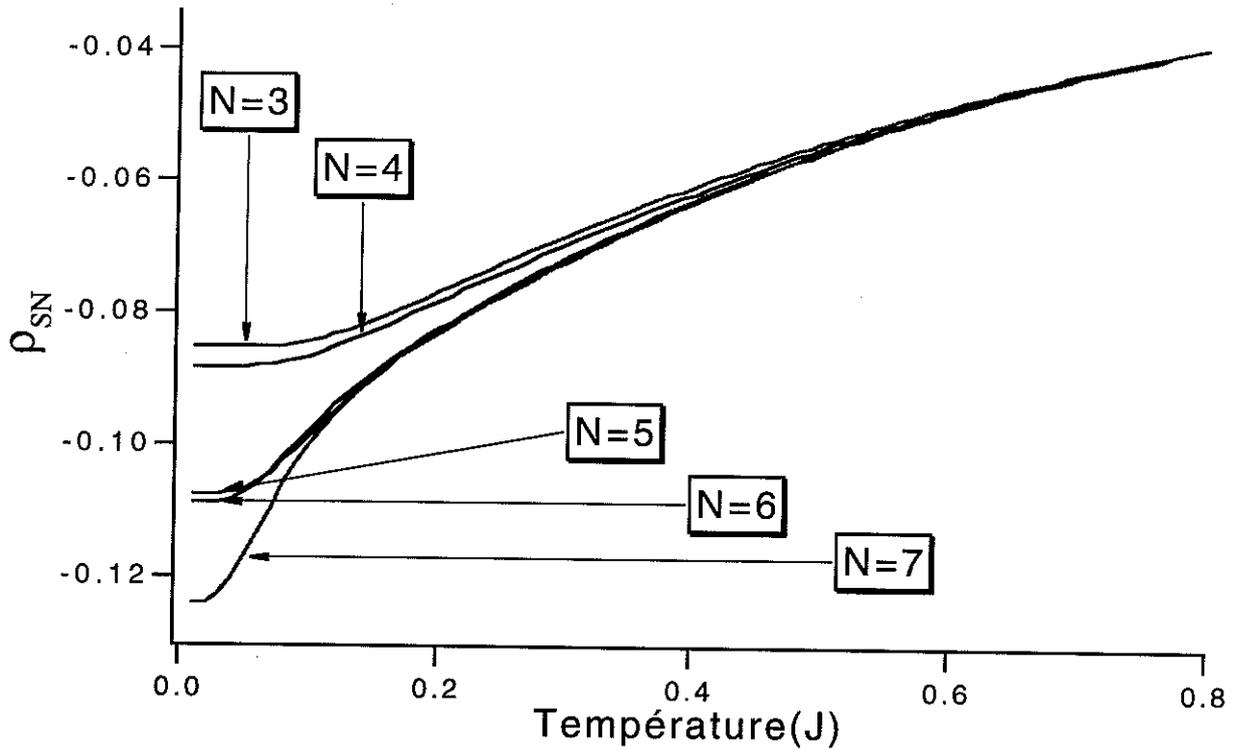


Fig. 3.24: Raideur normalisée pour une chaîne XXZ semi-contrainte avec $J_X/J_Z=1.1$

Nous consacrerons la suite de ce paragraphe à l'étude de points situés dans la phase XY et dans la phase Antiferro. Le premier point considéré concerne le cas $J_Z=0$ ($\lambda=0$ figure 1.11), correspondant au rapport $J_X/J_Z=\infty$. C'est le point représentatif de la phase XY. La figure 3.25 représente les courbes en température de la raideur normalisée pour le cas XY semi-contraint.

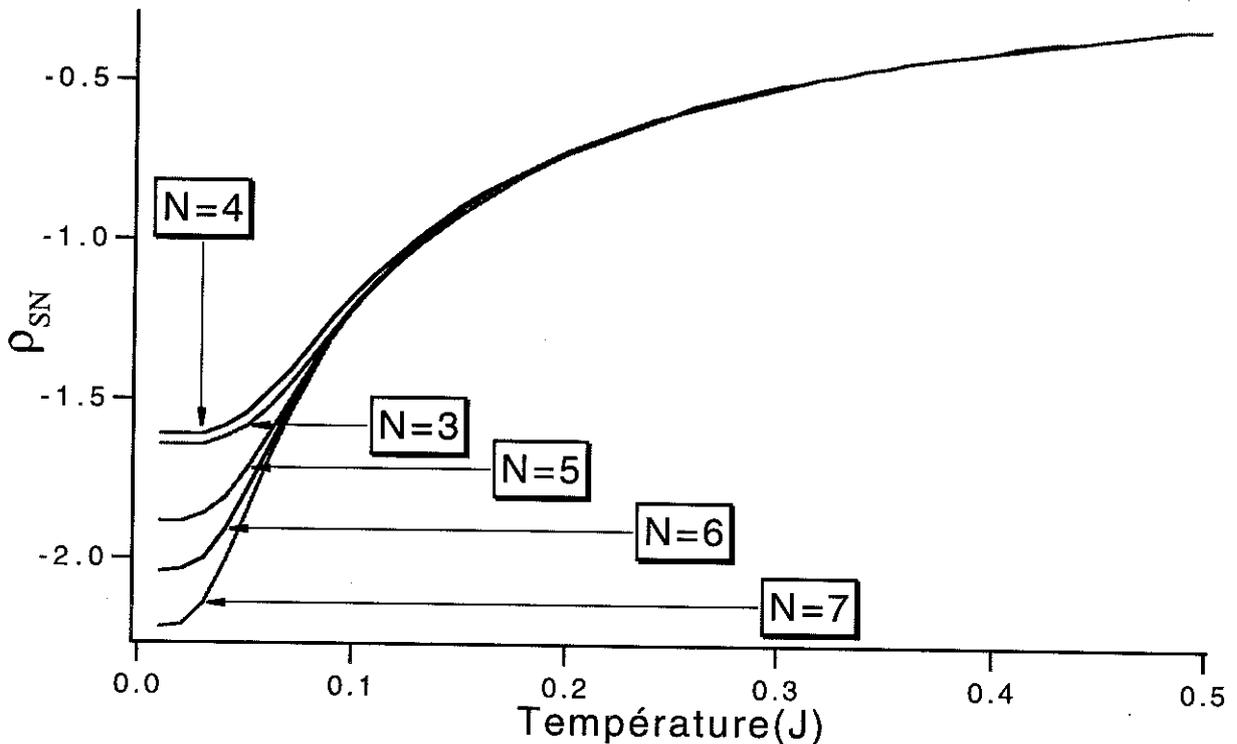


Fig. 3.25: Raideur normalisée pour une chaîne XXZ semi-contrainte avec $J_X/J_Z=\infty$

La raideur y est négative et sans effets de parité. Elle présente les mêmes caractéristiques que le cas précédent, laissant supposer que, malgré le changement de phase, l'influence de l'anisotropie est équivalente au cas $\lambda=J_z=0.9$.

La valeur absolue de la raideur suit une croissance continue avec l'augmentation de N . On ne distingue aucun effet de parité. On peut distinguer cependant une anomalie de comportement pour $N=4$ avec $\rho_{SN} \approx -1.61$. L'ordre de grandeur de la raideur est relativement forte. A partir des plateaux, la croissance en température est régulière jusqu'à la température de comportement classique située entre $0.2J$ et $0.3J$.

Le dernier point semi-contraint concerne le cas spécifique de la phase Antiferro défini pour $\lambda=J_z=1.3$ soit $J_x/J_z=(1.3)^{-1}$. Cette phase est caractérisée par un état fondamental doublet et un gap dans le spectre d'excitation à la limite thermodynamique. La figure 3.26 illustre le comportement de la raideur pour ce cas. La raideur normalisée y est positive, d'ordre de grandeur inférieure à l'unité et sans effets de parité.

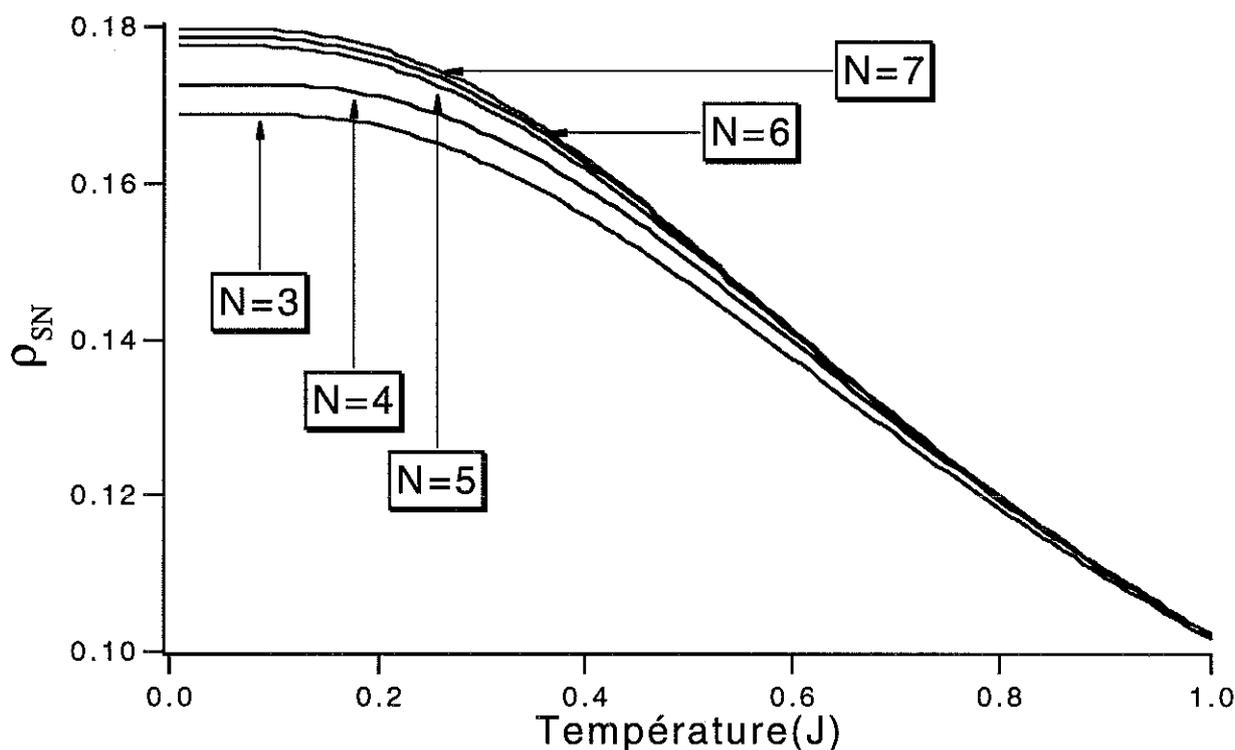


Fig. 3.26: Raideur normalisée pour une chaîne XXZ semi-contrainte avec $J_x/J_z=1/(1.3)$

Les courbes de raideur présentent des comportements similaires en température qui se distinguent avec N . Les chaînes les plus grandes sont quasiment confondues. Les courbes sont d'autant plus raides que N est élevé alors que les plateaux observés y sont d'autant moins larges. La croissance de l'amplitude au niveau des plateaux fait passer la raideur normalisée de $\rho_{SN} \approx 0.168$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx 0.179$ pour $N=7$. Passé le plateau, la raideur décroît régulièrement, de façon quasi linéaire (dans une large gamme de température), pour converger

vers la zone classique. La température de début de comportement classique est relativement haute, de l'ordre de 1J.

3.2.4 Chaîne contrainte

Nous avons défini ce que nous avons appelé condition de contrainte sur une chaîne au §2.3.4. Cette définition étant générale, elle s'applique de même au cas des spins 1. Nous définirons la taille de la chaîne par le nombre N de spins libres (sans contraintes) en donnant aux extrémités les indices de sites 0 et $N+1$. De façon analogue aux spins $1/2$, du fait des contraintes, l'espace de Hilbert passe d'une dimension 3^{N+2} à 3^N .

Par convention, nous considérerons le premier spin figé dans la position haute des spins 1, de ket $|S\rangle = |1\rangle$ ayant pour valeur propre selon S_z la valeur $m_z=1$. Si l'hamiltonien sans contrainte est l'hamiltonien XXX défini par (2.11), le terme de couplage supplémentaire sur le premier spin défini par (2.22) se réécrit en tenant compte de la valeur intrinsèque $C_0^z=1$ du spin figé sous la forme suivante

$$H_{0,1} = C_0^z S_1^z = S_1^z \quad (3.6)$$

Nous avons de même défini au §3.2.3 la condition de semi-contrainte dans le cas des spins 1. Le spin $N+1$ y est bloqué dans un ket défini et possède un degré de liberté de rotation. Appliquer une rotation d'angle θ sur ce dernier spin tout en maintenant le premier spin bloqué engendre une torsion dans la chaîne. Tout comme pour le cas semi-contraint, le dernier terme de couplage est défini à l'aide des expressions (2.19), (2.18) et (3.5).

Conformément à la procédure utilisée pour les spins $1/2$ (cf. §2.3.4), considérons dans un premier temps la raideur normalisée pour une chaîne définie à partir d'un hamiltonien XXX contraint. La figure 3.27 représente la raideur calculée en fonction de la température pour différentes valeurs de N . Elle est ici positive et ne présente pas d'effets particuliers de parité. La contrainte imposée ne permet pas de distinguer les effets de parité associés à l'hamiltonien XXX non contraint. Quelque soit N , l'état fondamental généré est singulet.

La zone de restriction en température pour l'observation d'effets de taille est ici très large, de l'ordre de 3J. Comme pour les spins $1/2$, à température fixée, la raideur est d'autant plus faible que N est élevé. Du fait de la contrainte et de la faible taille de nos chaînes, aucun défaut de spin zéro n'est généré ici. L'évolution de la raideur avec N suit donc la tendance associée à une phase de quasi-ordre à la limite thermodynamique, comme pour les spins $1/2$. Les plateaux reflétant le gap dans le spectre dû aux effets de taille finie suivent la loi de décroissance en $1/N$. La raideur observée passe ainsi de $\rho_{SN} \approx 6.04 \cdot 10^{-2}$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx 2.58 \cdot 10^{-2}$ pour $N=7$.

Passés ces plateaux, la raideur normalisée décroît de façon régulière en température du fait du peuplement progressif des niveaux excités (le peuplement thermique entraînant une diminution des corrélations transverses). Elle rejoint une région de comportement classique, aux alentours de $2J$ pour les longues chaînes, présentant une raideur normalisée indépendante de la taille et tendant vers la valeur nulle.

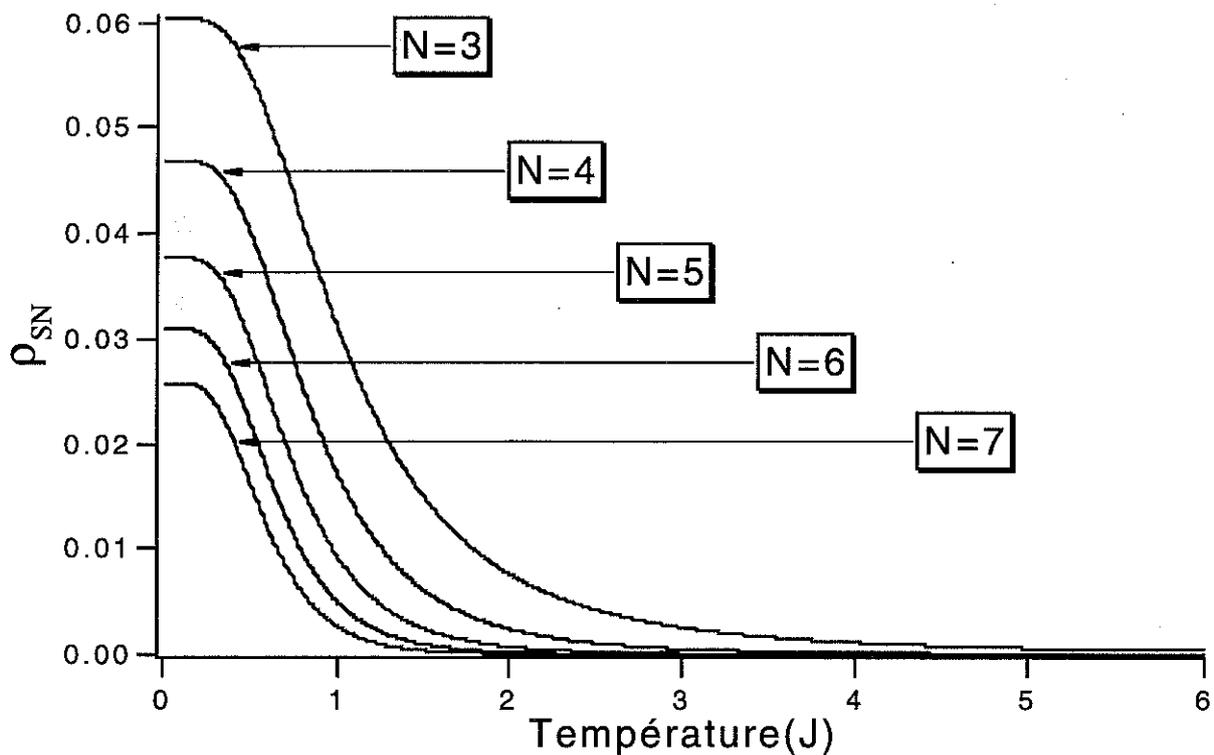


Fig. 3.27: Raideur normalisée pour une chaîne contrainte de type XXX

Par analogie avec le traitement des spins $1/2$, nous avons de même considéré le cas d'hamiltonien isotrope seconds voisins J_1 - J_2

Afin de simuler une faible variation d'échange, permettant également de vérifier la cohérence de nos résultats, nous avons tout d'abord considéré le cas $\alpha=0.01$. La figure 3.28 représente la raideur de spin normalisée pour cette valeur de α . La raideur est positive et sans effets de parité.

L'addition d'un faible terme de couplage conserve l'allure des courbes du cas XXX contraint en diminuant légèrement l'amplitude de celles-ci. Ce comportement est analogue au cas des spins $1/2$ pour la même valeur du paramètre α . La largeur des plateaux observés à basse température décroît en $1/N$. La valeur associée à ces derniers passe de $\rho_{SN} \approx 5.94 \cdot 10^{-2}$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx 2.48 \cdot 10^{-2}$ pour $N=7$. A partir des plateaux, les courbes décroissent en température et se confondent à partir de la température classique, de l'ordre de $2J$, la raideur ρ_{SN} devenant nulle. Contrairement aux spins $1/2$, il ne se distingue ici aucune tendance d'effets de parité de taille.

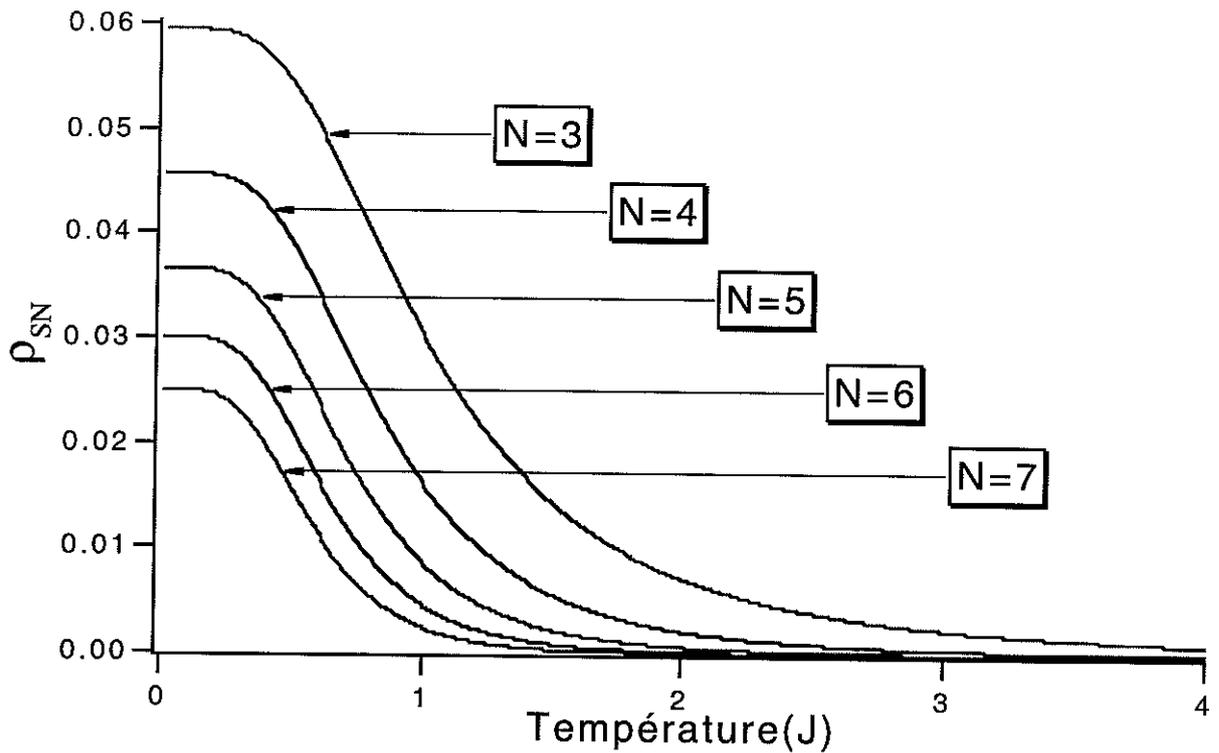


Fig. 3.28: Raideur normalisée pour une chaîne XXX contrainte seconds voisins où $J_2/J_1=0.01$

La progression du terme seconds voisins s'accompagne pour les spins 1/2 d'une diminution sensible de la raideur, quelque soit la valeur de N . Une étude comparative du cas $\alpha=0.1$ est présentée figure 3.29. Comme précédemment, la raideur normalisée est positive et sans effets de parité.

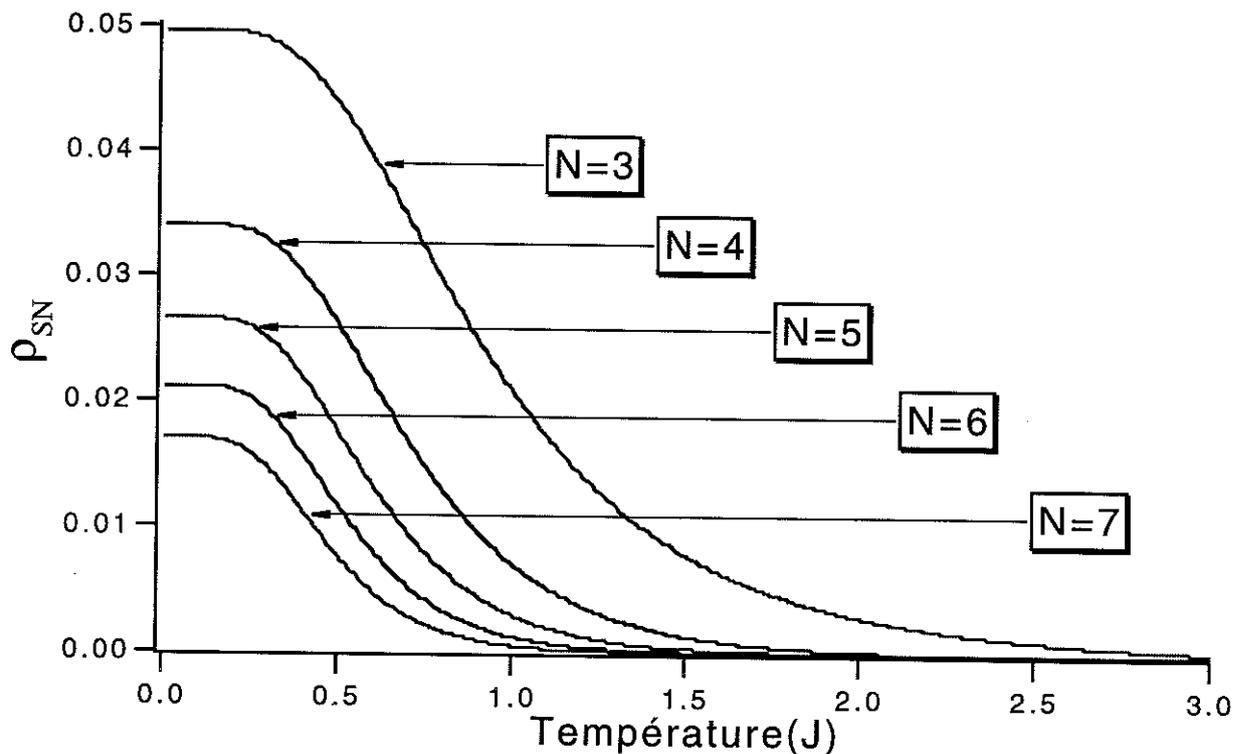


Fig. 3.29: Raideur normalisée pour une chaîne XXX contrainte seconds voisins où $J_2/J_1=0.1$

La croissance du terme seconds voisins s'accompagne d'une diminution de la raideur, respectant cependant l'allure générale des courbes. La largeur des plateaux décroît régulièrement proportionnellement à $1/N$ et varie peu avec le terme J_2 . La raideur passe ainsi ici de $\rho_{SN} \approx 4.96 \cdot 10^{-2}$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx 1.7 \cdot 10^{-2}$ pour $N=7$. Au delà de la région de plateaux, les courbes décroissent régulièrement jusqu'à la zone classique où elles se confondent et deviennent nulles. La température de début du comportement classique est de l'ordre de $1.5J$, plus faible que pour les températures classiques précédentes. Contrairement aux spins $1/2$, il n'existe aucune signature d'effets de parité.

Nous avons considéré au §2.3.4 le terme spécifique $\alpha_c=0.25$, séparant pour les spins $1/2$ la phase XY de la phase dimère de l'hamiltonien sans contrainte. La figure 3.30 montre le comportement de la raideur normalisée pour ce même hamiltonien contraint pour les spins 1. Contrairement aux spins $1/2$, la raideur ne présente pas ici d'effets de parité.

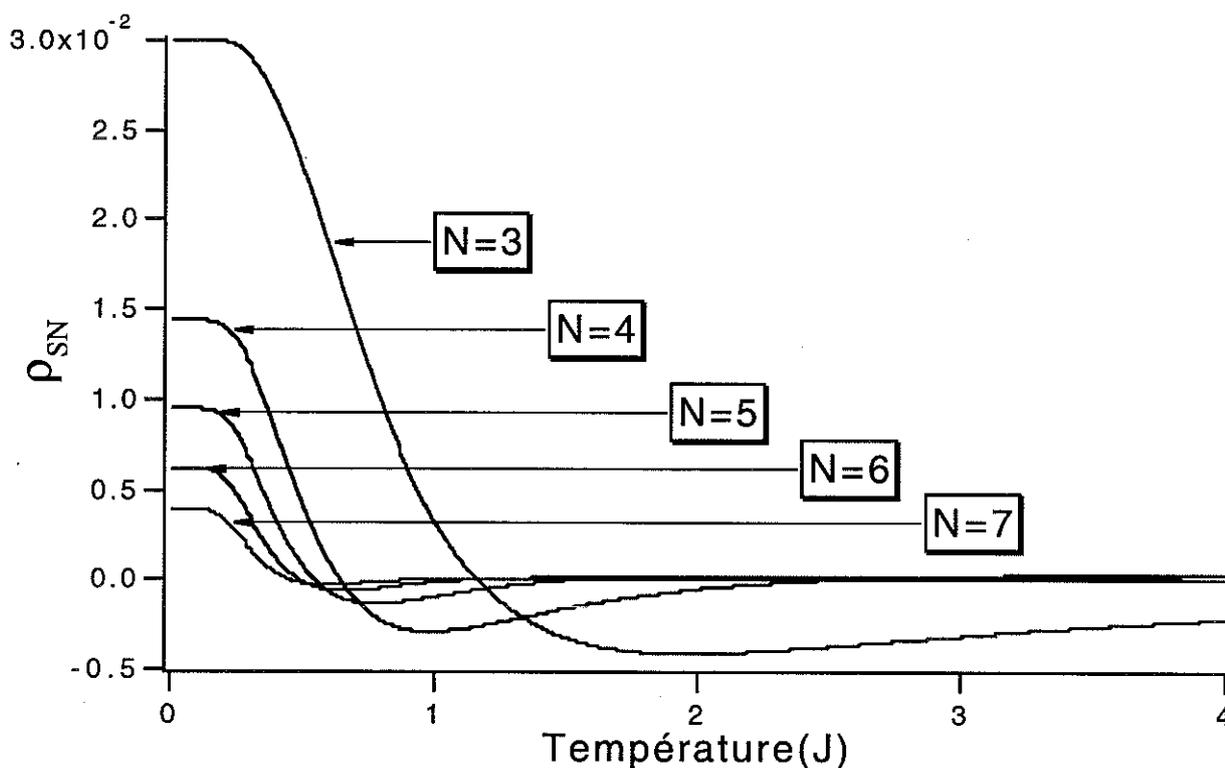


Fig. 3.30: Raideur normalisée pour une chaîne XXX contrainte second voisin où $J_2/J_1=0.25$

A basse température, les plateaux suivent une alternance régulière avec N , de largeur décroissante en $1/N$. La raideur dans cette région est positive, passant de $\rho_{SN} \approx 3 \cdot 10^{-2}$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx 3.9 \cdot 10^{-3}$ pour $N=7$. A partir des plateaux, les courbes décroissent en amplitude pour rejoindre un régime de valeurs négatives. Cette évolution est identique au cas des spins $1/2$. A partir de la région négative, la hiérarchie de taille n'est plus respectée et les courbes se croisent. Elles tendent progressivement vers la région de comportement classique.

Au delà du point spécifique $\alpha_c=0.25$, les spins $1/2$ pour le cas $\alpha=0.3$ sans contrainte sont dans une phase dimère. Sous contrainte, la raideur présente, à basse température, des effets de parité. La figure 3.31 montre la raideur pour les spins 1 pour ce même cas. Contrairement aux spins $1/2$, la raideur ici ne présente pas d'effets de parité à basse température et l'emergence de raideurs négatives persiste à plus haute température.

Les plateaux décroissent régulièrement en $1/N$ et la raideur est positive à basse température. Elle décroît de $\rho_{SN} \approx 2.23 \cdot 10^{-2}$ pour $N=3$ à $\rho_{SN} \approx 3 \cdot 10^{-4}$ pour $N=7$. Ce dernier cas est notamment très faible. A partir des plateaux, les courbes décroissent en amplitude jusque une région négative. On retrouve ainsi le comportement de la chaîne de spins $1/2$. Dans la région négative, les courbes se croisent et rejoignent la zone classique, indépendante de N et de raideur nulle.

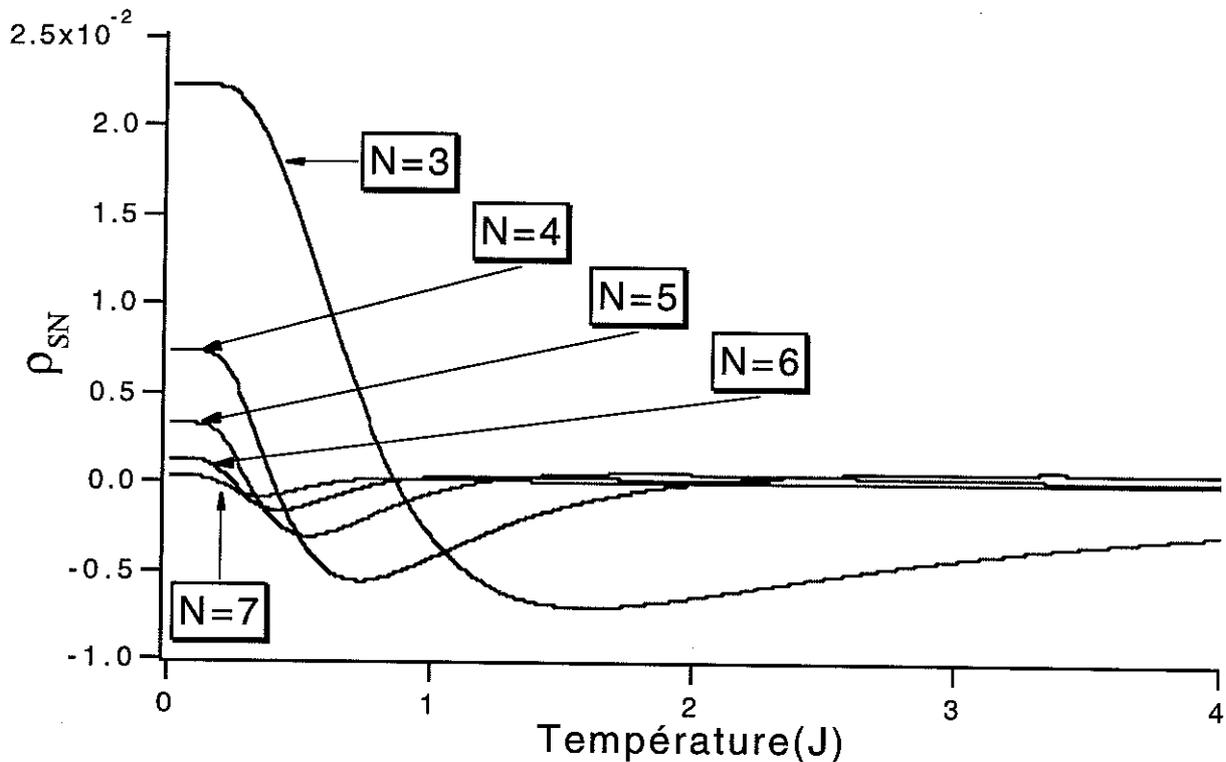


Fig. 3.31: Raideur normalisée pour une chaîne XXX contrainte second voisin où $J_2/J_1=0.3$

Nous avons considéré pour finir cette analyse le cas spécifique $\alpha=0.5$. Dans le cas des spins $1/2$, il existe des effets de parité notoires. Dans le cas des spins 1, les courbes de raideur normalisée sont représentées figure 3.32. On ne peut distinguer dans ce cas précis d'effets de parité de taille.

Le comportement de la raideur y est complexe et moins régulier que précédemment. Les distinctions de taille sont fortes jusqu'à des températures élevées. La raideur normalisée semble cependant suivre une règle relativement identique, à savoir passer par un maximum (minimum

dans certains cas) de raideur à basse température (positive ou négative) puis redescendre régulièrement jusqu'à la zone de comportement classique et de raideur nulle.

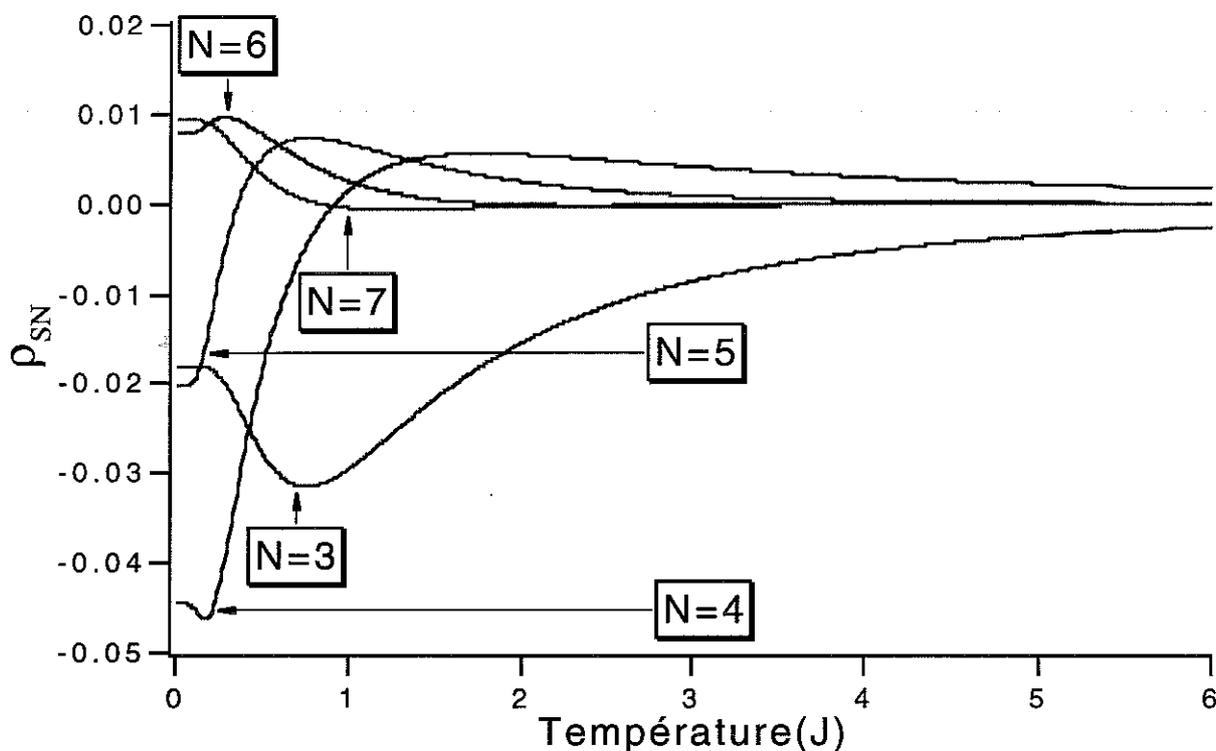


Fig. 3.32: Raideur normalisée pour une chaîne XXX contrainte second voisin où $J_2/J_1=0.5$

- Conclusion

Nous avons analysé la susceptibilité longitudinale et la raideur de spin pour des chaînes soumises à des conditions de bords périodiques et ouvertes pour les spins 1. De façon similaire aux études de spins 1/2, des comportements spécifiques vis à vis des effets de parité de taille ont également été montrés. Cependant, ces effets sont moins systématiques dans le cas des spins 1.

Dans le cas périodique, la susceptibilité longitudinale dans les hamiltoniens XXX et XX étudiés ne montre pas d'effets de parité très marqués aux basses températures dû à la nature magnétique équivalente (en l'occurrence singulet) des états fondamentaux vis à vis de la parité de taille. Ce comportement est analysé sur la base des états VBS qui confirme qualitativement cette tendance. Ces effets se manifestent à plus haute température quand les contributions des états excités deviennent importantes. La raideur de spin a , quant à elle, été précisée, comme dans le cas des spins 1/2, pour deux formes de torsions, chacune d'elles présentant de nets effets de parité ou de taille spécifiques. L'étude d'une torsion générée par un déphasage local, comparativement à l'étude faite par Loss et Maslov pour le cas des spins 1, distingue très nettement la raideur positive pour les chaînes paires et négative pour les chaînes impaires dans la

région de comportement quantique, ainsi que le comportement indépendant de la taille et de la parité de taille dans la région classique. Ce comportement dans la région quantique n'est pas conforme, contrairement aux spins $1/2$, aux prédictions théoriques sur les systèmes mesoscopiques. Ce désaccord de comportement est interprété par la petite taille de nos chaînes ne permettant pas d'introduire de défaut de spin 0 qui rendrait à la raideur son caractère positif et, probablement, ne permettrait plus de différencier les chaînes de longueur N paire et impaire. Les études de raideur générée par des champs orthogonaux appliqués en bords de chaîne ont été étendues à deux régions caractéristiques de l'hamiltonien bilinéaires-biquadratiques correspondant à $-1 < \beta \leq 1/3$ et $0.5 \leq \beta < 1$ ainsi qu'aux cas limites $\beta = -1, 1$. La raideur de spin normalisée dans la zone des basses températures présente dans la région étendue $-1 \leq \beta \leq 1/3$ majoritairement de forts effets de parité et dans la région étendue $0.5 \leq \beta \leq 1$ de forts effets de périodicité 3 pour les chaînes de longueurs multiples de 3. Ces distinctions de comportement sont globalement conformes aux influences des effets de taille attendus pour les cas identiques sous conditions de chaînes ouvertes sans champs appliqués. Des effets de parité sont observés dans la première région et, de périodicité 3 avec la taille des chaînes, distinguant les chaînes de longueur multiple de 3 des autres, dans la deuxième. Les points $\beta = -1$ et $\beta = 1$ se distinguent cependant et présentent les effets de parité de taille et de périodicité de taille les plus marquantes. Ils sont annonceurs des phases dimère et trimère. A ce titre, dans la gamme faible de nos tailles, la phase trimère semble ainsi être confirmée. L'éloignement progressif du paramètre β de ces deux cas limites s'accompagne d'une atténuation des effets de parité et de périodicité de taille observés.

Dans le cas des chaînes ouvertes, la susceptibilité longitudinale pour les hamiltoniens XXX et XX étudiés montre de forts effets de parité pour le cas XXX, se distinguant ainsi du cas périodique, moins fortement cependant pour le cas XX. Cette distinction pour le cas XXX est qualitativement analysée en termes de spins de bouts de chaînes associés aux états VBS et confirme cette tendance. La distinction entre chaîne périodique et chaîne ouverte pour le cas XX aux basses températures y est cependant très peu sensible dans la mesure où les comportements de la susceptibilité du fondamental sont qualitativement équivalents et analysés comme états singulets pour les chaînes de longueur N paire et impaire. La raideur de spin est précisée, encore une fois, pour trois formes distinctes de torsions. La raideur générée par des champs orthogonaux appliqués en bords de chaîne ne présente plus cependant systématiquement des effets de parité, et se distingue nettement du cas équivalent en chaîne périodique. Si des effets de parité et des effets de périodicité avec le nombre 3 persistent, en étant cependant moins marqués, pour le point limite $\beta = -1$ et la région étendue $0.5 \leq \beta \leq 1$, aucun effet de parité n'est constaté dans la région $0 \leq \beta \leq 1/3$. Cette distinction de comportements est notoirement différente des spins $1/2$. Une torsion générée par une semi-contrainte a également permis d'analyser plus spécifiquement la raideur pour les différentes phases caractéristiques de l'hamiltonien XXZ de spins 1. Quelques soient les phases caractérisées par l'intermédiaire de la raideur de spin, à savoir les phases XY,

de Haldane et Antiferro, aucune ne présente d'effets de parité de taille. Ce comportement dénote également fortement du cas des spins $1/2$ pour les phases équivalentes. Une instabilité vis à vis des comportements voisins du point Heisenberg dans la phase de Haldane persiste cependant. La raideur se reflétant dans chacune de ces phases présente des caractéristiques différentes, confirmant l'intérêt à porter à l'analyse des différentes phases par la raideur de spin. L'influence de l'anisotropie se caractérisant par une raideur d'autant plus forte en valeur absolue que l'échange est anisotrope a de même été constatée. Enfin, une étude comparative aux spins $1/2$ pour des chaînes contraintes a été également effectuée. En suivant le diagramme de phase de l'hamiltonien sans contrainte de spins $1/2$ avec échange premiers et seconds voisins J_1 - J_2 pour une gamme étendue du paramètre $\alpha=J_1/J_2$ allant de la phase XY à la phase dimère pure, aucun effet de parité de taille n'a été montré dans la raideur de spin normalisée pour les spins 1, contrairement aux spins $1/2$. On passe cependant progressivement d'une raideur positive pour la phase XY des spins $1/2$, à une raideur ayant des régions négatives de plus en plus basses en température pour la phase dimère des spins $1/2$. Cette tendance montre que les effets de parité observés dans le passage de la phase XY à la phase dimère pour les spins $1/2$ peuvent être considérés comme caractéristiques des spins $1/2$ de la raideur dans ces phases alors que la génération de raideur négative est commune aux deux valeurs de spins.

Ainsi, si les effets de parité continuent à se manifester à la fois dans la susceptibilité et dans la raideur de spin, cette tendance est cependant moins marquée pour $S=1$. Cette différence s'observe notamment dans certaines phases caractéristiques des hamiltoniens par le comportement très distinct entre chaînes de spins $1/2$ et 1. De telles observations par l'intermédiaire de la susceptibilité ne sont cependant pas exclues mais la finesse des différences observées dans certains cas conserve à la raideur son intérêt d'outil d'analyse d'effets de parité.

Conclusion

Conclusion

Cette thèse avait pour objet une étude numérique par diagonalisation exacte des effets de parité de taille dans les chaînes antiferromagnétiques finies de spins $1/2$ et 1 . Ces effets ont été considérés pour différents modèles d'interactions entre spins sur des chaînes fermées et ouvertes. Ils ont été sondés via la variation thermique de la susceptibilité magnétique longitudinale et de la raideur de spin associée à différentes formes de torsion (conditions de bords à déphasage angulaire, champs magnétiques perpendiculaires en bords de chaînes et, dans le cas de chaînes ouvertes, contraintes fixant la direction de un ou des deux spins aux extrémités de la chaîne). Un premier chapitre consacré à quelques rappels concernant le magnétisme des chaînes de spins souligne les effets de parité de taille connus antérieurement à notre travail. Un deuxième chapitre expose les résultats que nous avons obtenus pour les chaînes de spins $1/2$ et un troisième chapitre ceux concernant les chaînes de spins 1 .

Avec les chaînes de spins $1/2$, de nombreux effets de parité sont observés, que ce soit dans la susceptibilité longitudinale pour les modèles de hamiltoniens XX ou XXX à conditions de bords ouvertes et périodiques ou, dans la raideur de spin. Les études plus spécifiques de la raideur de spin ont permis une analyse plus fine des effets observés. Pour une raideur de spin définie par une condition périodique avec déphasage angulaire en bords de chaîne, les comportements observés sont en accord avec la prédiction théorique de Loss et Maslov: la raideur de spin pour une chaîne de longueur N est positive pour N pair et négative pour N impair. Cette raideur de spin définie à partir de champs magnétiques orthogonaux en bords de chaîne n'est jamais négative mais possède des valeurs qui se regroupent selon la parité de N : elle est plus grande pour N impair que pour N pair dans le cas des chaînes fermées et inversement dans le cas de chaînes ouvertes. Ces regroupements se manifestent avec des interactions axialement anisotropes (modèle XXZ) ou étendues aux seconds voisins (modèle $J1$ - $J2$). Avec des chaînes ouvertes semi-contraintes et des interactions XXZ , une raideur de spin positive est obtenue dans la phase ANTIFERRO mais négative dans la phase XY . Avec des chaînes contraintes, il émerge des variations thermiques inhabituelles de la raideur de spin (avec en

particulier des changements de signe) autant dans le modèle des interactions XXZ que dans le modèle des interactions J1-J2.

Avec les chaînes de spins 1, des effets de parité existent mais sont moins systématiques. Ainsi la susceptibilité magnétique ne présente pas de différences fondamentales entre chaînes ouvertes et fermées dans le cas des interactions XX mais elle est finie à température nulle pour une chaîne ouverte de longueur N impaire dans le cas des interactions XXX. Contrairement aux prédictions de Loss et Maslov, la raideur de spin émanant de conditions de bords à déphasage angulaire est calculée négative pour une longueur de chaîne N impaire. Ce désaccord est attribué à la petitesse en taille des chaînes étudiées, qui ne permet pas de générer de défauts de spin zéro dans la chaîne. Avec la raideur de spin définie à partir de champs magnétiques orthogonaux en bords de chaîne sont mises en évidence, dans deux régions spécifiques du modèle des interactions bilinéaire-biquadratique, des effets de parité et de multiplicité triple de N pour les chaînes périodiques et seulement des effets de multiplicité triple de N pour les chaînes ouvertes. Ce comportement peut s'interpréter comme une signature sous-jacente des phases dimère et trimère générées pour ce modèle d'interactions à la limite thermodynamique. Les phases caractéristiques des hamiltoniens XXZ pour des chaînes ouvertes semi-contraintes et J1-J2 pour des chaînes ouvertes contraintes ne présentent pas d'effets de parité. Cependant la raideur de spin distingue les différentes phases de la limite thermodynamique.

Annexe

Annexe

Rappels sur les matrices de rotation

Nous allons dans ce paragraphe revoir quelques notions concernant les opérateurs de rotation des moments magnétiques par l'intermédiaire de leurs représentations matricielles. Afin de se référer à une représentation commune, nous utiliserons les angles d'Euler traditionnels [Mes 64] dont la représentation axiale est définie figure A.1.

Les angles α , β et γ se définissent de la façon suivante, respectant cet ordre de rotation:

i) $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ où α est l'angle de rotation autour de l'axe z projetant le système d'axes $(S)=(x,y,z)$ sur le système (x',y',z') avec $z=z'$.

ii) $0 \leq \beta \leq \pi$ où β est l'angle de rotation autour de l'axe y projetant le système d'axes $(S')=(x',y',z')$ sur le système $(S'')=(x'',y'',z'')$.

iii) $0 \leq \gamma \leq 2\pi$ où γ est l'angle de rotation autour de l'axe z'' projetant le système d'axes $(S'')=(x'',y'',z'')$ sur le système $(S''')=(x''',y''',z''')$ avec $z''=z'''$.

On peut noter que les angles polaires définis par les angles θ et Φ par rapport au système d'axes (S) sont identiques aux angles α et β .

A partir de ces définitions angulaires, l'opérateur de rotation générale que nous noterons $D(\alpha, \beta, \gamma)$ dans un système d'axes fixes pourra s'écrire sous la forme du produit d'opérateurs suivants

$$D(\alpha, \beta, \gamma) \equiv P_Z(\alpha) P_Y(\beta) P_Z(\gamma) \quad (A1)$$

où $P_U(\varphi)$ représente l'opérateur de rotation d'un angle quelconque φ autour d'un axe fixe U et s'exprime à l'aide des opérateurs de moment cinétique sous la forme suivante:

$$P_U(\varphi) = e\left(-i\varphi \frac{J_U}{\hbar}\right) \quad (A2)$$

$$P_U(\varphi) = e\left(-i\varphi \frac{J_U}{\hbar}\right) \quad (\text{A2})$$

avec J_U l'opérateur de moment cinétique selon l'axe U. Ainsi, (A1) se réécrit par

$$D(\alpha, \beta, \gamma) \equiv P_Z(\alpha) P_Y(\beta) P_Z(\gamma) = e\left(-i\alpha \frac{J_Z}{\hbar}\right) e\left(-i\beta \frac{J_Y}{\hbar}\right) e\left(-i\gamma \frac{J_Z}{\hbar}\right) \quad (\text{A3})$$

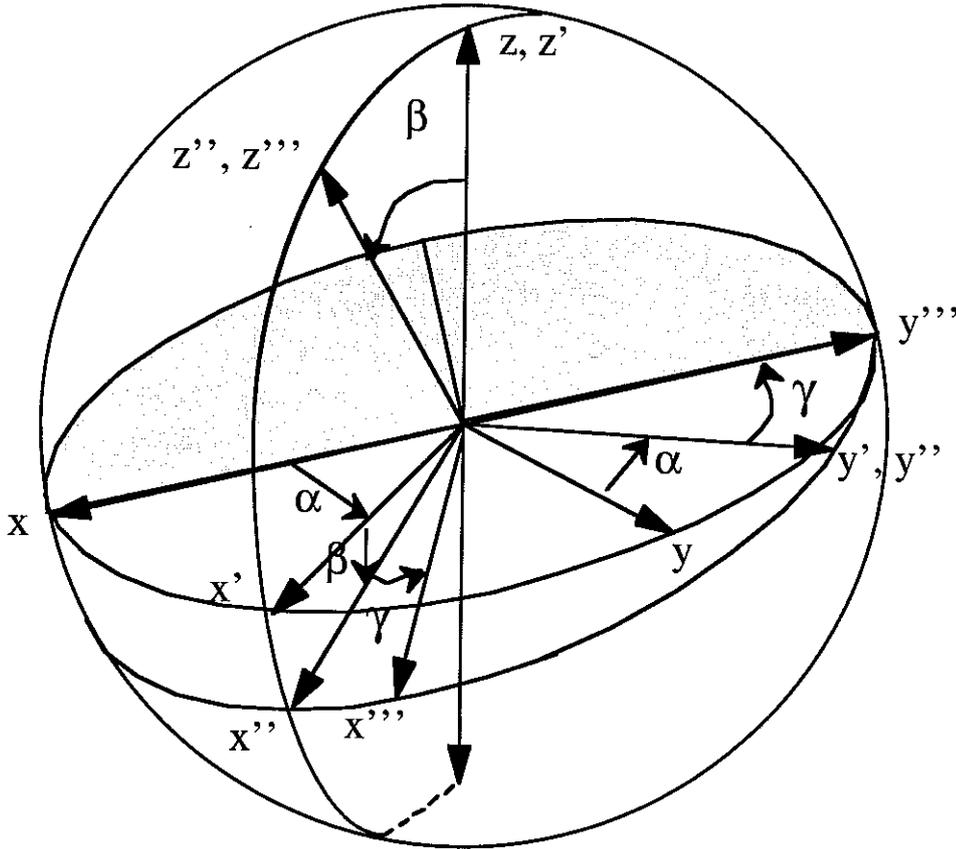


Fig. A.1: Schéma d'angle d'Euler

Définissons par $\{|S, m\rangle\}$ la base standard de représentation matricielle des spins, les éléments de matrice de l'opérateur de rotation dans la base standard s'exprimeront sous la forme

$$D_{m'm}^{(S)}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle S, m' | D(\alpha, \beta, \gamma) | S, m \rangle = e^{-im'\alpha} d_{m'm}^{(S)}(\beta) e^{-im\gamma} \quad (\text{A4})$$

avec

$$d_{m'm}^{(S)}(\beta) = \left[\frac{(S+m')!(S-m')!}{(S+m)!(S-m)!} \right]^{1/2} \sum_{\sigma} (-1)^{S-m'-\sigma} \frac{(S+m)!}{(S-m'-\sigma)!(m+m'+\sigma)!} \frac{(S-m)!}{\sigma!(S-m-\sigma)!} \\ * \left(\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \right)^{2\sigma+m+m'} \left(\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \right)^{2S-2\sigma-m-m'} \quad (\text{A5})$$

La valeur du paramètre σ représente ici la valeur maximum positive compatible avec une valeur des factorielles présents dans (A5) non négatifs. On aura donc les relations suivantes pour σ :

$$\begin{aligned} S - m' &\geq \sigma \\ S - m &\geq \sigma \\ m + m' &\leq \sigma \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

Les éléments de matrice $d_{m'm}^{(S)}(\beta)$ possèdent les propriétés de symétrie suivantes:

$$\begin{aligned} d_{m'm}^{(S)}(-\beta) &= d_{mm'}^{(S)}(\beta) \\ d_{m'm}^{(S)}(\beta) &= (-1)^{m'-m} d_{mm'}^{(S)}(\beta) \\ d_{m'm}^{(S)}(\beta) &= (-1)^{m'-m} d_{-m'-m}^{(S)}(\beta) \end{aligned} \quad (\text{A7})$$

A titre d'exemple, les éléments $d_{m'm}^{(S)}(\beta)$ pour les spins 1/2 et 1 prennent les expressions suivantes:

$$\begin{aligned} d_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})}(\beta) &= d_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})}(\beta) = \text{Cos}\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})}(\beta) &= -d_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})}(\beta) = \text{Sin}\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{aligned} \quad (\text{A8})$$

pour le cas des spins 1/2 et dans le cas des spins 1

$$\begin{aligned} d_{11}^{(1)}(\beta) &= d_{-1-1}^{(1)}(\beta) = \frac{1}{2}(1 + \text{Cos}(\beta)) \\ d_{10}^{(1)}(\beta) &= -d_{01}^{(1)}(\beta) = d_{0-1}^{(1)}(\beta) = -d_{-10}^{(1)}(\beta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{Sin}(\beta) \\ d_{1-1}^{(1)}(\beta) &= d_{-11}^{(1)}(\beta) = \frac{1}{2}(1 - \text{Cos}(\beta)) \\ d_{00}^{(1)}(\beta) &= \text{Cos}(\beta) \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

Références Bibliographiques

- [Ben 84] H. Benner, H. Seitz, J. Wiese and J.P. Boucher, *J. Magn. & Magn. Mater.* 45 (1984) 354
- [Bet 31] H.A. Bethe, *Z. Phys.* 71 (1931) 205
- [Blo 75] H.W.J. Blöte, *Physica* B79 (1975) 427
- [Blo 86] H.W.J. Blöte and H.W. Capel, *Physica* A139 (1986) 387
- [Bon 64] J.C. Bonner and M.E. Fisher, *Phys. Rev.* 135 (1964) A640
- [Bon 83] J.C. Bonner, S.A. Friedberg, H. Kobayashi, D.L. Meier and H.W.J. Blöte, *Phys. Rev.* B27 (1983) 248
- [Bot 83a] R. Botet and R. Jullien, *Phys. Rev.* B27 (1983) 613
- [Bot 83b] R. Botet, R. Jullien and M. Kolb, *Phys. Rev.* B28 (1983) 3914
- [Bou 82] J.P. Boucher, H. Benner, F. Devreux, L.P. Regnault, J. Rossat-Mignod, C. Dupas, J.P. Renard, J. Bouillot and W.G. Stirling, *Phys. Rev.* B48 (1982) 431
- [Bou 85] J.P. Boucher, F. Meizei, L.P. Regnault and J.P. Renard, *Phys. Rev. Lett.* 55 (1985) 1778
- [Bou 87] J.P. Boucher, G. Rius and Y. Henry, *Europhys. Lett.* 4 (1987) 1073
- [Bou 96] J.P. Boucher, *Images de la physique* 1996.
- [Bra 96] H-B Braun and D. Loss, *Phys. Rev.* B53 (1996) 3237
- [Bri 95a] T.M. Brill, J.P. Boucher, L.C. Brunel, J.P. Renard and M. Verdaguer, *Physica* B204 (1995) 303
- [Bri 95b] T.M. Brill, J.P. Boucher, L.C. Brunel, J.P. Renard and M. Verdaguer, *J. Magn. & Magn. Mater.* 140-144 (1995) 1655
- [Bru 92] L.C. Brunel, T.M. Brill, I.Zaliznyak, J.P. Boucher and J.P. Renard, *Phys. Rev. Lett.* 69 (1992) 1699
- [Bru 95] L.C. Brunel, A.L. Barra and G. Martinez, *Physica* B204 (1995) 298
- [Buy 86] W.J.L. Buyers, R.M. Morra, R.L. Armstrong, M.J. Hogan, P. Gerlach and K. Hirakawa, *Phys. Rev. Lett.* 56 (1986) 371
- [Caf 94] M. Caffarel, P. Azzaria, B. Delamotte and D. Mouhanna, *Europhys. Lett.* 26 (1994) 493
- [Chi 90] M. Chiba, Y. Ajiro, H. Kikuchi, T. Kubo and T. Morimoto, *J. Magn. & Magn. Mater.* 90-91 (1990) 221
- [Chi 91] M. Chiba, Y. Ajiro, H. Kikuchi, T. Kubo and T. Morimoto, *Phys. Rev.* B44 (1991) 2838
- [Chi 96] M. Chiba, Y. Ajiro, E. Satoh and T. Kubo, *Physica* B216 (1996) 345
- [Clo 62] J. Des Cloizeaux and J.J. Pearson, *Phys. Rev.* 128 (1962) 2131
- [Cow 95] R.A. Cowley, D.A. Tenant, S.E. Nagler and T. Perring, *J. Magn. & Magn. Mater.* 140-144 (1995) 1651
- [Dag 96] E. Dagotto and T.M. Rice, *Science* 271 (1996) 618

- [Dat 90] M. Date and K. Kindo, *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990) 1659
- [Deg 95] H. Deguchi, S. Takagi, M. Ito and K. Takeda, *J. Phys. Soc. Jpn.* 64 (1995) 22
- [Dei 93] J. Deisz, M. Jarell and D.L. Cox, *Phys. Rev.* B48 (1993) 10227
- [Den 89] M. Den Nijs and K. Rommelse, *Phys. Rev.* B40 (1989) 4709
- [Dev 87] F. Devreux and J.P. Boucher, *J. de Physique* 48 (1987) 1663
- [Duf 68] W. Duffy, Jr. and K.P. Barr, *Phys. Rev.* 165 (1968) 647
- [Ecc 96] R.S. Eccleston, M. Azuma and M. Takano, *Phys. Rev.* B53 (1996) R 14721
- [Egg 94] S. Eggert, I. Affleck and M. Takahashi, *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994) 332
- [Egg 96] S. Eggert, *Phys. Rev.* B53 (1996) 5116
- [Els 92] N. Elstner and H.J. Mikeska, *Z. Phys.* B89 (1992) 321
- [End 74] Y. Endoh, G. Shirane, R.J. Birgeneau, P.M. Richards and S.L. Holt, *Phys. Rev. Lett.* 32 (1974) 170
- [Fad 81] L.D. Faddeev and L.A. Takhtajan, *Phys. Lett.* 85A (1981) 375
- [Fad 84] L.D. Faddeev and L.A. Takhtajan, *J. Sov. Math* 24 (1984) 241
- [Fàt 93] G. Fàth and J. Sólyom, *J. Phys. : Condens. Matter* 5 (1993) 8983
- [Fei 95] A.E. Feiguin, C.J. Gazza, A.E. Trumper and H.A. Ceccatto, *Phys. Rev.* B52 (1995) 15043
- [Fuj 90] N. Fujiwara, T. Goto, T. Kohmoto and S. Maegawa, *J. Magn. & Magn. Mater.* 90-91 (1990) 229
- [Fuj 92] N. Fujiwara, T. Goto, S. Maegawa and T. Kohmoto, *Phys. Rev.* B45 (1992) 7837
- [Fuj 93] N. Fujiwara, T. Goto, S. Maegawa and T. Kohmoto, *Phys. Rev.* B47 (1993) 11860
- [Fuj 95] N. Fujiwara, J.R. Jeitler, C. Navas, M.M. Turnbull, T. Goto and N. Hosoi, *J. Magn. & Magn. Mater.* 140-144 (1995) 1663
- [Fuk 95] T. Fukui and N. Kawakami, "Adiabatic Ground-State Properties of Spin Chains with twisted Boundary Conditions", cond-mat/9606190
- [Gad 91] V. Gadet, M. Verdaguer, V. Briois, A. Gleizes, J.P. Renard, P. Beauvillain, C. Chappert, T. Goto, K. Le Dang and P. Veillet, *Phys. Rev.* B44 (1991) 705
- [Gad 91] V. Gadet, M. Verdaguer, V. Briois, A. Gleizes, J.P. Renard, P. Beauvillain, C. Chappert, T. Goto, K. Le Dang and P. Veillet, *Phys. Rev.* B44 (1991) 705
- [Gau 83] M. Gaudin, "La fonction d'onde de Bethe", ed. Masson, 1983
- [Gir 89] S.M. Girvin and D. Arovas, *Physica Scripta* T27 (1989) 156
- [Gla 91] S.H. Glarum, S. Geschwind, K.M. Lee, M.L. Kaplan and J. Michel, *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991) 1614
- [Gol 92a] O. Golinelli, Th. Jolicoeur and R. Lacaze, *Phys. Rev.* B46 (1992) 10854
- [Gol 92b] O. Golinelli, Th. Jolicoeur and R. Lacaze, *Phys. Rev.* B45 (1992) 9798
- [Gol 93a] O. Golinelli, Th. Jolicoeur and R. Lacaze, *J. Phys. : Condens. Matter* 5 (1993) 1399

- [Gol 93b] O. Golinelli, Th. Jolicoeur and R. Lacaze,
J. Phys. : Condens. Matter 5 (1993) 7847
- [Gol 94] O. Golinelli, Th. Jolicoeur and R. Lacaze, *Phys. Rev.* B50(1994)3037
- [Got 90] T. Goto, N. Fujiwara, T. Kohmoto and S. Maegawa,
J. Phys. Soc. Jpn. 59 (1990) 1135
- [Gri 64] R.B. Griffiths, *Phys. Rev.* 133 (1964) A769
- [Hag 90] M. Hagiwara, K. Katsumata, I. Affleck, B.I. Halperin and J.P. Renard,
Phys. Rev. Lett. 65 (1990) 3181
- [Hag 92] M. Hagiwara and K. Katsumata, *J. Phys. Soc. Jpn.* 61 (1992) 1481
- [Hal 82] F. D. M. Haldane, *Phys.* B25 (1982) 4925
- [Hal 83 a] F. D. M. Haldane, *Phys. Lett.* 93 A (1983) 464
- [Hal 83 b] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* 50 (1983) 1153
- [Har 95] M. Harigawa and K. Katsumata, *J. Magn. & Magn. Mater.* 140-144(1995)1665
- [Has 93] M. Hase and al., *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993) 3651
- [Hat 91] Y. Hatsugai and M. Kohmoto, *Phys. Rev.* B44 (1991) 11789
- [Hat 92] Y. Hatsugai, *J. Phys. Soc. Jpn.* 61 (1992) 3856
- [Hat 93] N. Hatano and M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* 62 (1993) 1346
- [Hei 78] I.U. Heilmann, Y. Endoh, R.J. Birgeneau and S.L. Holt,
Phys. Rev. B18 (1978) 3530
- [Hid 92] K. Hida, *Phys. Rev.* B45 (1992) 2207
- [Hir 94] K. Hirota, D.E. Cox, J.E. Lorenzo, G. Shirane, J.M. Tranquada, M. Hase,
K. Uchinokura, H. Kojima, Y. Shibuya and I. Tanaka,
Phys. Rev. Lett. 73 (1994) 736
- [Hir 95] K. Hirota, S.M. Shapiro, K. Katsumata and M. Hagiwara,
Physica B213&214 (1995) 173
- [Hut 72] M.T. Hutchings and G. Shirane, *Phys. Rev.* B5 (1972) 1999
- [Ito 93] S. Itoh, K. Kakurai, M. Arai and Y. Endoh,
J. Phys. : Condens. Matter 5 (1993) 6767
- [Ito 95] S. Itoh, K. Kakurai, Y. Endoh and H. Tanaka, *Physica* B213&214 (1995) 161
- [Joh 72] J.D. Johnson and B.M. McCoy, *Phys. Rev.* A6 (1972) 1613
- [Joh 80] J.D. Johnson and J.C. Bonner, *Phys. Rev. Lett.* 44 (1980) 616
- [Jon 96] M.S.L. Du Croo de Jongh and P.J.H. Denteneer, "Spin stiffness in the frustrated
Heisenberg antiferromagnet", cond-mat/9611009
- [Kab 93] M. Kaburagi, I. Harada and T. Tonegawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* 62 (1993) 1848
- [Kab 94] M. Kaburagi and T. Tonegawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* 63 (1994) 420
- [Kak 91] K. Kakurai, M. Steiner, R. Pynn and J.K. Kjems,
J. Phys. : Condens. Matter 3 (1991) 715
- [Kar 95] M. Karbach and K-H Mütter, *J. Phys. A: : Math. Gen.* 28 (1995) 4469

- [Kat 89] K. Katsumata, H. Hori, T. Takeuchi, M. Date, A. Yamagishi and J.P. Renard, *Phys. Rev. Lett.* 63 (1989) 86
- [Kat 90] K. Katsumata, H. Hori, T. Takeuchi, M. Date, A. Yamagishi and J.P. Renard, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* 101 (1990) 503
- [Ken 90] T. Kennedy, *J. Phys. : Condens. Matter* 2 (1990) 5737
- [Ken 92a] T. Kennedy and H. Tasaki, *Phys. Rev.* B45 (1992) 304
- [Ken 92b] T. Kennedy and H. Tasaki, *Commun. Math. Phys.* 147 (1992) 431
- [Ker 93] A. Keren et al., *Phys. Rev.* B48 (1993) 12926
- [Kik 94] H. Kikuchi, Y. Ajiro, N. Mori, H. Agura Katori, T. Goto and H. Nagasawa, *Physica* B201 (1994) 186
- [Kik 95] H. Kikuchi, H. Nagasawa, K. Mibu, T. Ono, N. Hosoiito and T. Shinjyo, *J. Phys. Soc. Jpn.* 64 (1995) 3429
- [Kin 90] K. Kindo, T. Yosida and M. Date, *J. Magn. & Magn. Mater.* 90-91 (1990) 227
- [Kin 92] K. Kindo, T. Takeuchi, T. Yosida and M. Date, *Physica* B177 (1992) 381
- [Kit 96] A. Kitazawa, K. Nomura and K. Okamoto, *Phys. Rev.* B76 (1996) 4038
- [Kna 88] S. Knabe, *J. Stat. Phys.* 52 (1988) 627
- [Kob 92] T.C. Kobayashi, Y. Tabuchi, K. Amaya, Y. Ajiro, T. Yosida and M. Date, *J. Phys. Soc. Jpn.* 61 (1992) 1772
- [Kob 95] T.C. Kobayashi, H. Honda, A. Koda and K. Amaya, *J. Phys. Soc. Jpn.* 64 (1995) 2609
- [Koh 92] M. Kohmoto and H. Tasaki, *Phys. Rev.* B46 (1992) 348
- [Khv 94] D.V. Khveshchenko, *Phys. Rev.* B50 (1994) 380
- [Kub 52] R. Kubo, *Phys. Rev.* 87 (1952) 568
- [Lan 66] R. V. Lange, *Phys. Rev.* 146 (1966) 301
- [Lai 74] J. K. Lai, *J. Mat. Phys.* 15 (1974) 1675
- [Lee 86] S. Lee, P. Colombet, G. Ouvrard and R. Brec, *Mat. Res. Bull.* 21 (1986) 917
- [Lia 90] S. Liang, *Phys. Rev. Lett.* 64 (1990) 1597
- [Lie 62] E. Lieb and D. Mattis, *J. Math. Phys.* 3 (1962) 749
- [Los 92] D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* 69 (1992) 343
- [Los 93] D. Loss, D.P. DiVincenzo, G. Grinstein, D.D. Awschalom and J.F. Smyth, *Physica* B189 (1993) 189
- [Los 95] D. Loss and L. Maslov, *Phys. Rev. Lett.* 74 (1995) 178
- [Lu 91] W. Lu, J. Tuchendler, M. von Ortenberg and J.P. Renard, *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991) 3716
- [Ma 92] S. Ma, C. Broholm, D.H. Reich, B.J. Sternlieb and R.W. Erwin, *Phys. Rev. Lett.* 69 (1992) 3571
- [Maj 69] C.K. Majumdar and D.K. Gosh, *J. Mat. Phys.* 10 (1969) 1388
- [Mat 95] M. Matsuda and K. Katsumata, *J. Magn. & Magn. Mater.* 140-144 (1995) 1671
- [Mat 96] M. Matsuda and K. Katsumata, *Phys. Rev.* B53 (1996) 12201

- [Mer 66] M. D. Mermin et H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* 17 (1966) 1133
- [Mes 64] A. Messiah, "Mécanique quantique", Tome II, Dunod (1964)
- [Mey 82] A. Meyer, A. Gleizes, J.J. Girerd, M. Verdaguer and O. Kahn, *Inorg. Chem.* 21 (1982) 1729
- [Mil 96] F. Mil, "Magnetic properties of NaV_2O_5 , a one-dimensional spin 1/2 antiferromagnet with finite chains", *cond-mat/9605024*
- [Mis 96] O.V. Misochko, S. Tajima, C. Urano, H. Eisaki and S. Uchida, *Phys. Rev.* B53 (1996) R14 733
- [Mit 92] P.P. Mitra, B.I. Halperin and I. Affleck, *Phys. Rev.* B45 (1992) 5299
- [Mit 94] P.P. Mitra and B.I. Halperin, *Phys. Rev. Lett.* 72 (1994) 912
- [Miy 93] S. Miyashita and S. Yamamoto, *Phys. Rev.* B48 (1993) 913
- [Mon 91] K.K. Mon, *Phys. Rev.* B44 (1991) 6809
- [Mor 87] A Moreo, *Phys. Rev.* B35 (1987) 8562
- [Mot 96] N. Motoyama, H. Eisaki and S. Uchida, *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 3212
- [Mut 89] H. Mutka, J.L. Soubeyroux, G. Bourleaux and P. Colombet, *Phys. Rev.* B39 (1989) 4820
- [Mut 93] H. Mutka, C. Payen and P. Molinié, *Europhys. Lett.* 21 (1993) 623
- [Nev 86] E. J. Neves et J. Perez, *Phys. Lett.* 114 A (1986) 331
- [Nom 89] K. Nomura, *Phys. Rev.* B40 (1989) 2421
- [Nig 86] M.P. Nightingale and H.W.J. Blöte, *Phys. Rev.* B33 (1986) 659
- [Nis 95] Y. Nishiyama, K. Totsuka, N. Hatano and M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* 64 (1995) 414
- [Oka 95] K. Okamoto and Y. Ueno, *J. Phys. Soc. Jpn.* 64 (1995) 86
- [Osh 92] M. Oshikawa, *J. Phys. : Condens. Matter* 4 (1992) 7469
- [Par 85] J.B. Parkinson and J.C. Bonner, *Phys. Rev.* B32 (1985) 4703
- [Pay 90] C. Payen, P. Molinie, P. Colombet and G. Fillion, *J. Magn. & Magn. Mater.* 84 (1990) 95
- [Reg 82] L.P. Regnault, J.P. Boucher, J. Rossat-Mignod, J.P. Renard, J. Bouillot and W.G. Stirling, *Sol. State Phys.* 15 (1982) 1261
- [Reg 95] L.P. Regnault and J.P. Renard, *Physica* B215 (1995) 71
- [Ren 87] J.P. Renard, M. Verdaguer, L.P. Regnault, W.A.C. Erkelens, J. Rossat-Mignod and W.G. Stirling, *Europhys. Lett.* 3 (1987) 945
- [Ren 88a] J.P. Renard, L.P. Regnault and M. Verdaguer, *J. de Phys.* C8 (1988) 1425
- [Ren 88b] J.P. Renard, M. Verdaguer, L.P. Regnault, W.A.C. Erkelens, J. Rossat-Mignod, J. Ribas, W.G. Stirling and C. Vettier, *J. Appl. Phys.* 63 (1988) 3538
- [Ren 90] J.P. Renard, V. Gadet, L.P. Regnault and M. Verdaguer, *J. Magn. & Magn. Mater.* 90-91 (1990) 213
- [Ric 93] T.M. Rice, S. Gopalan and M. Sigrist, *Europhys. Lett.* 23 (1993) 445

- [Rie 96] J. Riera and S. Koval, *Phys. Rev.* B53 (1996) 770
- [Sak 90] T. Sakai and M. Takahashi, *Phys. Rev.* B42 (1990) 1090
- [Sak 91] T. Sakai and M. Takahashi, *Phys. Rev.* B43 (1991) 13383
- [Sak 94] T. Sakai and M. Takahashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* 63 (1994) 755
- [Sch 96] U. Schollwöck, Th. Jolicoeur and T. Garel, *Phys. Rev.* B53 (1996) 3304
- [Sha 81] B.S. Shastry and B. Sutherland, *Phys. Rev. Lett.* 47 (1981) 964
- [Shi 93] H. Shioda and Y. Ueno, *J. Phys. Soc. Jpn.* 62 (1993) 970
- [Shi 95] H. Shiba, T. Sakai, B. Lüthi, W. Palme and M. Sieling,
J. Magn. & Magn. Mater. 140-144 (1995) 1590
- [Sie 96] G. Sierra, "On the Application of the Non Linear Sigma Model to Spin Chains and Spin Ladders", cond-mat/9610057
- [Sor 95] E.S. Sorensen and I. Affleck, *Phys. Rev.* B51 (1995) 16115
- [Ste 87] M. Steiner and al., *J. Appl. Phys.* 61 (1987) 3953
- [Taf 90] K.L. Taft and S.I. Lippard, *J. Am. Chem. Soc.* 112 (1990) 9629
- [Tak 88] M. Takahashi, *Phys. Rev.* B38 (1988) 5188
- [Tak 89] M. Takahashi, *Phys. Rev. Lett.* 62 (1989) 2313
- [Tak 92a] T. Takeuchi, M. Ono, H. Hori, T. Yosida, A. Yamagishi and M. Date,
J. Phys. Soc. Jpn. 61 (1992) 3255
- [Tak 92b] T. Takeuchi, H. Hori, T. Yosida, A. Yamagishi, K. Katsumata, J.P. Renard,
V. Gadet, M. Verdaguer and M. Date, *J. Phys. Soc. Jpn.* 61 (1992) 3262
- [Tak 95a] K. Takeda, M. Mito, M. Ito, T. Kawae, H. Deguchi, S. Takagi,
J. Magn. & Magn. Mater. 140-144 (1995) 1661
- [Tak 95b] T. Takeuchi, T. Yosida, K. Inoue, M. Yamashita, T. Kumada, K. Kindo,
S. Merah, M. Verdaguer and J.P. Renard,
J. Magn. & Magn. Mater. 140-144 (1995) 1633
- [Tak 96] M. Takigawa, N. Motoyama, H. Eisaki and S. Uchida,
Phys. Rev. Lett. 76 (1996) 4612
- [Tas 91] H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* 66 (1991) 798
- [Ten 93] D.A. Tenant, T.G. Perring and R.A. Cowley,
Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 4003
- [Tot 95] K. Totsuka and M. Suzuki, *J. Phys. : Condens. Matter* 7 (1995) 1639
- [Uen 89] Y. Ueno, G. Sun and I. Ono, *J. Phys. Soc. Jpn.* 58 (1989) 1162
- [Uen 89] Y. Ueno and Y. Ozeki, *J. Stat. Phys.* 64 (1991) 227
- [Whi 92] S.R. White, *Phys. Rev. Lett.* 69 (1992) 2863
- [Whi 93] S.R. White, *Phys. Rev.* B48 (1993) 10345
- [Yaj 96] M. Yajima and M. Takahashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* 65 (1996) 39
- [Yam 93] S. Yamamoto and S. Miyashita, *Phys. Rev.* B48 (1993) 9528
- [Yam 94] S. Yamamoto and S. Miyashita, *Phys. Rev.* B50 (1994) 6277
- [Yam 95a] S. Yamamoto and S. Miyashita, *Phys. Rev.* B51 (1995) 3649

- [Yam 95b] S. Yamamoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* 64 (1995) 4051
[Yam 96] S. Yamamoto, *Phys. Rev.* B53 (1996) 3364
[Zhe 96] A. Zheludev, J.R. Tranquada, T. Vogt and D.J. Buttrey,
Phys. Rev. B54 (1996) 7210

RÉSUMÉ

Une étude numérique des effets de parité de taille dans les chaînes antiferromagnétiques de spins $1/2$ et 1 est effectuée. Ces effets sont considérés pour différents modèles d'interactions sur des chaînes fermées et ouvertes, et sont sondés via la susceptibilité longitudinale et la raideur de spin associée à différentes formes de torsion (conditions de bords à déphasage angulaire, champs magnétiques orthogonaux en bords de chaînes et, dans le cas de chaînes ouvertes, contraintes fixant la direction de un ou des deux spins aux extrémités de la chaîne).

Dans le cas des chaînes de spins $1/2$, de nombreux effets de parité de taille sont observés. Ainsi pour une chaîne fermée de longueur N avec des interactions isotropes XXX , la raideur de spin émanant de conditions de bords à déphasage angulaire est positive pour N paire et négative pour N impaire, en accord avec les prédictions de Loss et Maslov. Cette raideur de spin définie à partir de champs magnétiques orthogonaux en bords de chaîne n'est jamais négative mais possède des valeurs qui se regroupent selon la parité de N : elle est plus grande pour N impaire que pour N paire dans le cas des chaînes fermées et inversement dans le cas de chaînes ouvertes. Avec des chaînes contraintes, il émerge des variations thermiques inhabituelles de la raideur de spin (avec changements de signe).

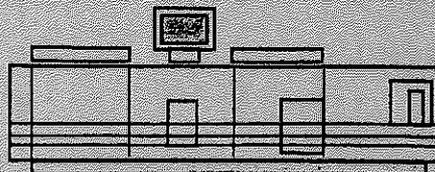
Dans le cas des chaînes de spins 1 , des effets de parité existent mais sont moins systématiques. Une raideur de spin émanant de conditions de bords à déphasage angulaire négative est obtenue pour N impaire, contrairement aux prédictions de Loss et Maslov. Ce désaccord est attribué à la petitesse en taille des chaînes étudiées, qui ne permet pas de générer de défauts de spin zéro. Avec la raideur de spin définie à partir de champs magnétiques orthogonaux en bords de chaîne sont mises en évidence, dans deux régions spécifiques du modèle des interactions bilinéaire-biquadratique, des effets de parité et de multiplicité triple de N pour les chaînes périodiques et seulement des effets de multiplicité triple de N pour les chaînes ouvertes.

MOTS CLES

- Physique mésoscopique
- Chaînes de spins
- Effets de parité de spin
- Effets de taille finie
- Raideur de spin
- Diagonalisations exactes



Grenoble, février 1997



Imprimé sur "Xerox 5090",
au Service Reprographie du CNRS de Grenoble.