

Tour d'horizon de la théorie des système magnétiques bidimensionnels frustrés

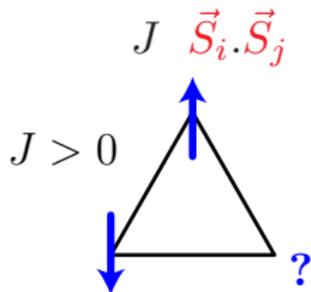
Matthieu Mambrini

Laboratoire de Physique Théorique
CNRS & UPS - Toulouse, France

GDR MICO JANVIER 2013
ROSCOFF

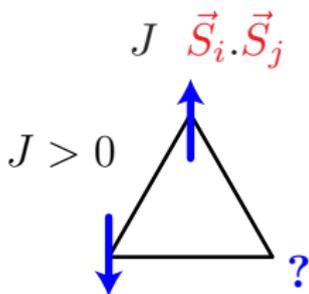


Frustration(s)

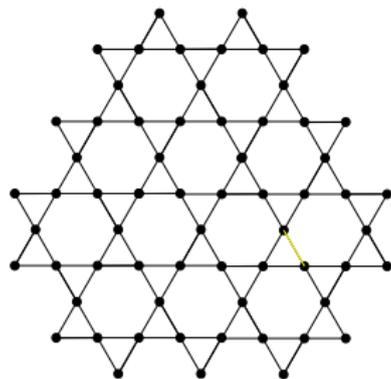


Contrainte globale \Leftrightarrow Satisfaction simultanée d'un ensemble de contraintes locales

Frustration(s)

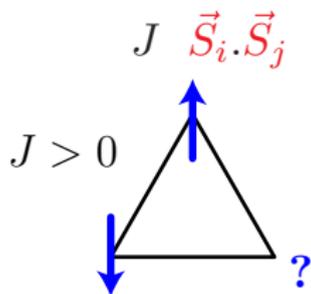


Contrainte locale :
1 dimère par triangle

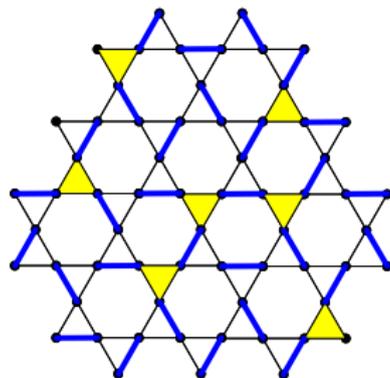


Contrainte globale \Leftrightarrow Satisfaction simultanée d'un ensemble de contraintes locales

Frustration(s)

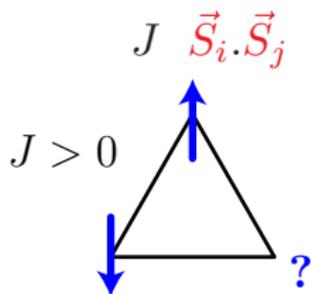


Contrainte locale :
1 dimère par triangle

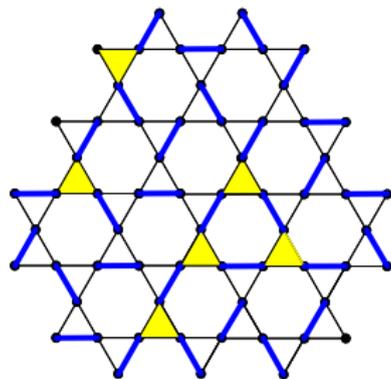


Contrainte globale \Leftrightarrow Satisfaction simultanée d'un ensemble de contraintes locales

Frustration(s)



Contrainte locale :
1 dimère par triangle



Contrainte globale \Leftrightarrow Satisfaction simultanée d'un ensemble de contraintes locales

Frustration+fluctuations quantiques

$$|\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$$

i j

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$$

$$-\frac{1}{4} |\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$$

$$\frac{1}{2} |\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$$

Fluctuations quantiques
dans les systèmes frustrés

{ désordre à T=0

Frustration+fluctuations quantiques

$$|\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$$

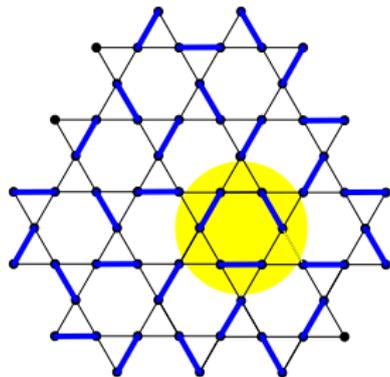
i j

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$$

$$-\frac{1}{4} |\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$$

$$\frac{1}{2} |\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$$

$$\text{hexagon} \equiv |\uparrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\uparrow| + |\downarrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\downarrow|$$



Fluctuations quantiques
dans les systèmes frustrés

{ désordre à T=0

Frustration+fluctuations quantiques

$$|\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$$

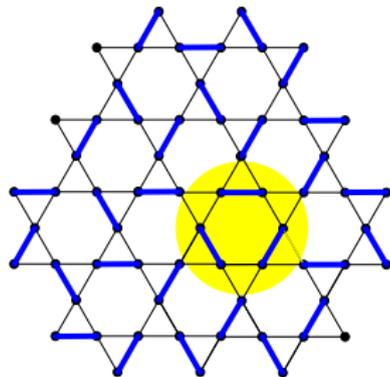
i j

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$$

$$-\frac{1}{4} |\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$$

$$\frac{1}{2} |\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$$

$$\text{hexagon} \equiv |\uparrow\downarrow\rangle\langle\uparrow\downarrow| + |\downarrow\uparrow\rangle\langle\downarrow\uparrow|$$



Fluctuations quantiques
dans les systèmes frustrés

{ désordre à T=0

Frustration+fluctuations quantiques

$$|\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$$

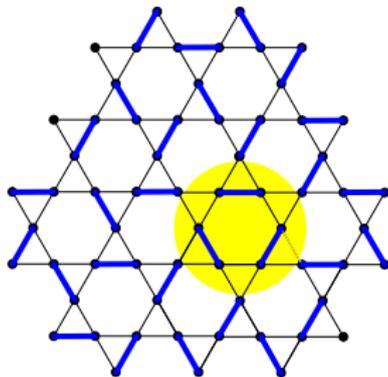
i j

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$$

$$-\frac{1}{4} |\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$$

$$\frac{1}{2} |\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$$

$$\text{hexagon} \equiv |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$$



Fluctuations quantiques
dans les systèmes frustrés

{ désordre à T=0
effets non-locaux

Panorama (partiel...)

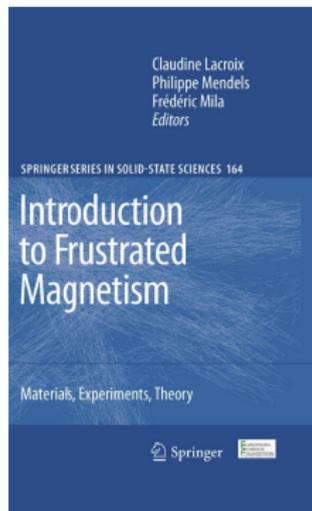
- Modèles type Heisenberg
 - Interaction multispins
 - Modèles de plus haute symétrie
 - Modèles spins orbitaux
 - Modèles sous champ
 - Modèles de dimères
 - Interaction longue portée
 - Spin ice
- (...)
- ▶ Modèles 2d Heisenberg spin $\frac{1}{2}$

Théorie

- Quels états ? Quelles excitations ?
- Signatures / caractérisation / propriétés
- Problèmes théoriques / expérimentaux

Développements récents autour de kagome

- Diagonalisations exactes
 - Fonction d'onde (méthodes variationnelles)
 - Hamiltonien (modèles effectifs)
- Variationnal projected BCS states
DMRG (Density-Matrix Renormalization Group)
MPS (Matrix Product States), PEPS, MERA
- CORE (Contractor renormalization)
GQDM (Generalized Quantum Dimer Models)



2011

Quels états à T=0 ?

Classification selon les symétries brisées ou non

$$\mathcal{H} = J \sum_{(i,j)} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

$$[\vec{S}_{\text{tot}}, \mathcal{H}] = \vec{0} \quad \vec{S}_{\text{tot}} = \left(\sum_i \vec{S}_i \right)$$

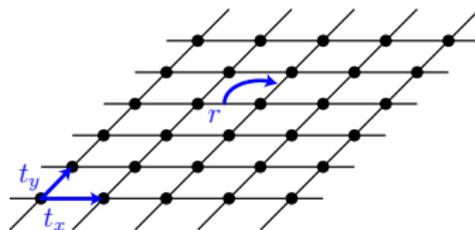
SU(2)

Continues

$$[\mathcal{S}, \mathcal{H}] = 0$$

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\mathcal{S}|\psi\rangle = s|\psi\rangle$$



Translations, rotation...

Discrètes

Quels états à T=0 ?

Classification selon les symétries brisées ou non

$$\mathcal{H} = J \sum_{(i,j)} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

$$[\vec{S}_{\text{tot}}, \mathcal{H}] = \vec{0} \quad \vec{S}_{\text{tot}} = \left(\sum_i \vec{S}_i \right)$$

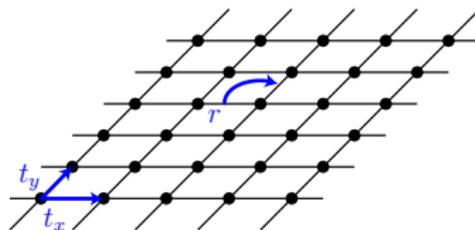
SU(2)

Continues

$$[\mathcal{S}, \mathcal{H}] = 0$$

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\mathcal{S}|\psi\rangle = s|\psi\rangle$$



Translations, rotation...

Discrètes

Brisure spontanée de symétrie ?

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad ?$$

$$\mathcal{S}|\psi\rangle \neq s|\psi\rangle$$

$$\mathcal{H}|\psi_1\rangle = E|\psi_1\rangle$$

$$\mathcal{H}|\psi_2\rangle = E|\psi_2\rangle$$

$$\mathcal{S}|\psi_1\rangle = s_1|\psi_1\rangle$$

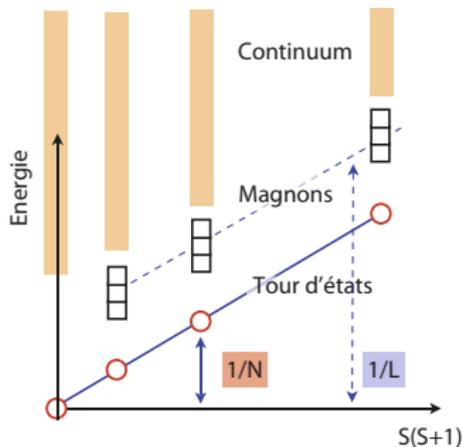
$$\mathcal{S}|\psi_2\rangle = s_2|\psi_2\rangle$$

$$\mathcal{H}(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle) = E(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle)$$

$$\mathcal{S}(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle) = \alpha s_1|\psi_1\rangle + \beta s_2|\psi_2\rangle$$

► Présence dans le spectre d'états dégénérés mais de symétries différentes

L'ordre antiferromagnétique



Symétrie SU(2) et symétrie de translation brisées

- Etats de spins totaux différents dégénérés à la limite thermodynamique $|\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$

- Ondes de spin $S^z = S - a^\dagger a$ petit

$$[a, a^\dagger] = 1$$

$$S^+ = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a^\dagger a}{2S}} a \approx \sqrt{2S} a$$

$$S^- = \sqrt{2S} a^\dagger \sqrt{1 - \frac{a^\dagger a}{2S}} \approx \sqrt{2S} a^\dagger$$

$$\mathcal{H} = E_0 + \sum_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}}^\dagger c_{-\vec{k}}$$

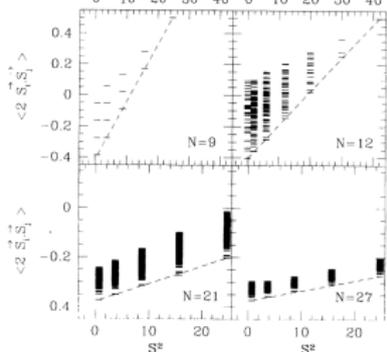
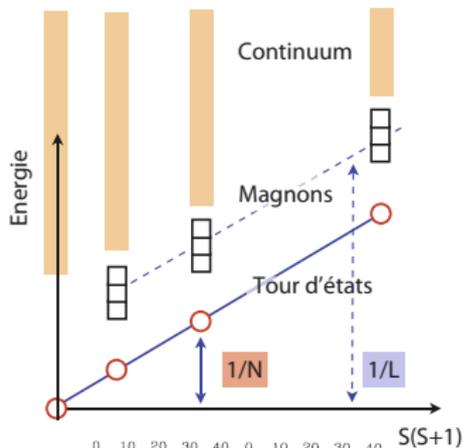
$$\varepsilon(\vec{k}) \approx \|\vec{k}\| \text{ pour } \vec{k} \approx \vec{0}$$

$$\varepsilon(\vec{k}) \approx \|\vec{k} - \vec{\pi}\| \text{ pour } \vec{k} \approx \vec{\pi}$$

Modes de Goldstone

L'ordre antiferromagnétique

Symétrie SU(2) et symétrie de translation brisées



- Etats de spins totaux différents dégénérés à la limite thermodynamique $|\dots \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \dots \rangle$

- Ondes de spin $S^z = S - a^\dagger a$ petit

$$[a, a^\dagger] = 1$$

$$S^+ = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a^\dagger a}{2S}} a \approx \sqrt{2S} a$$

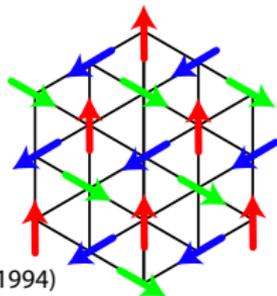
$$S^- = \sqrt{2S} a^\dagger \sqrt{1 - \frac{a^\dagger a}{2S}} \approx \sqrt{2S} a^\dagger$$

$$\mathcal{H} = E_0 + \sum_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}}^\dagger c_{-\vec{k}}$$

$$\varepsilon(\vec{k}) \approx \|\vec{k}\| \text{ pour } \vec{k} \approx \vec{0}$$

$$\varepsilon(\vec{k}) \approx \|\vec{k} - \vec{\pi}\| \text{ pour } \vec{k} \approx \vec{\pi}$$

Modes de Goldstone



Huse & Elser, Phys. Rev. Lett. (1988)

Jolicœur & Le Guillou, Phys. Rev. B (1989)

Bernu, Lhuillier & Pierre, Phys. Rev. Lett. (1992)

Bernu, Lecheminant, Lhuillier & Pierre, Phys. Rev. B 50 (1994)

Nématiques de spins

Ordre antiferromagnétique à longue portée $\begin{matrix} \leftarrow ? \\ \rightleftarrows \end{matrix}$ SU(2) brisée

Nématiques de spins

Ordre antiferromagnétique à longue portée



SU(2) brisée

Non ! Les corrélations de spin ne se limitent pas à $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$

$S_1^\alpha S_2^\beta$
tenseur

$$Q_{12}^{\alpha\beta} = S_1^\alpha S_2^\beta + S_1^\beta S_2^\alpha - \frac{2}{3}(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)\delta_{\alpha\beta}$$

partie symétrique

$$\mathbf{P}_{12} = \mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2$$

partie antisymétrique

Nématiques de spins

Ordre antiferromagnétique à longue portée



SU(2) brisée

Non ! Les corrélations de spin ne se limitent pas à $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$

$S_1^\alpha S_2^\beta$
tenseur

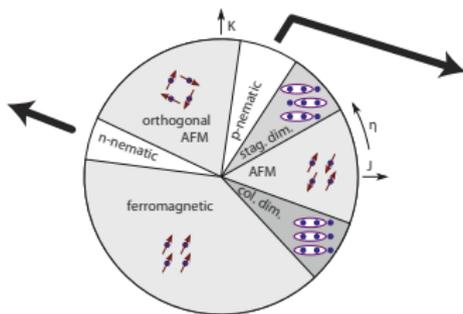
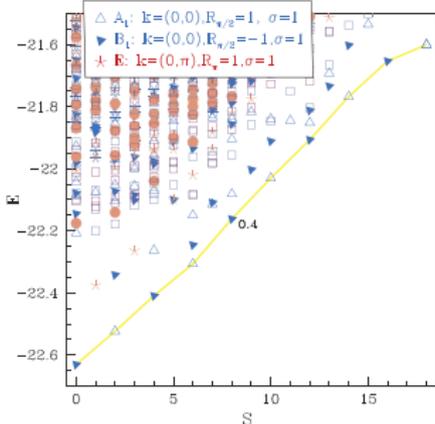
$$Q_{12}^{\alpha\beta} = S_1^\alpha S_2^\beta + S_1^\beta S_2^\alpha - \frac{2}{3}(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)\delta_{\alpha\beta}$$

partie symétrique

$$\mathbf{P}_{12} = \mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2$$

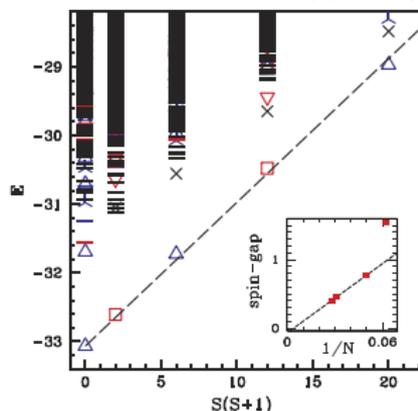
partie antisymétrique

$N=32 \quad \theta/\pi \approx 0.31 \quad (K/J=1.5)$



Réseau carré, échange multiple

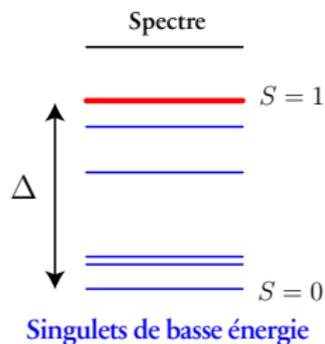
$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + K \sum_{[i,j,k,l]} (P_{i\dots l} + P_{i\dots l}^{-1})$$



Laüchli, Domenge, Lhuillier, Sindzingre & Troyer, Phys. Rev. Lett. (2005)

Shannon, Momoi, Sindzingre, Phys. Rev. Lett. (2005)

Cristaux de liens de valence



► Pas de mise en ordre magnétique

$$\langle S_i^\alpha S_j^\beta \rangle \sim e^{-|i-j|/\xi}$$

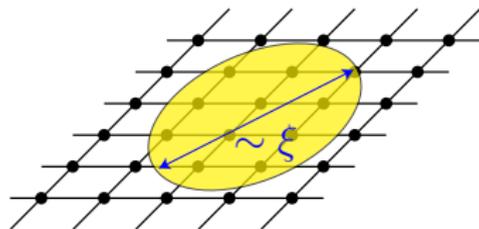
SU(2) restaurée

Fondamental $S = 0$

Gap de spin $\Delta \sim J$

Triplets massifs

Symétries discrètes ?

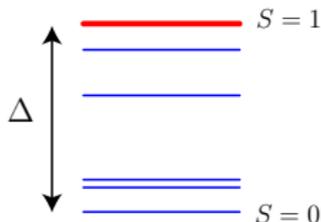


nombre quantique des premiers singlets
 corrélations à plus de deux points $\langle (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)(\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l) \rangle$

Albuquerque, Schwandt, Hetényi, Capponi,
 Mambrini, Läuchli, Pys. Rev. B (2011)

Cristaux de liens de valence

Spectre



Singulets de basse énergie

► Pas de mise en ordre magnétique

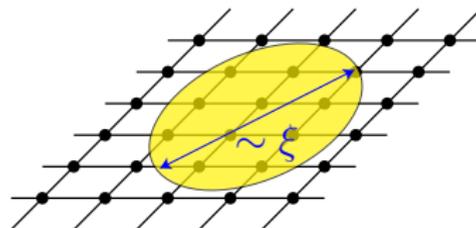
$$\langle S_i^\alpha S_j^\beta \rangle \sim e^{-|i-j|/\xi}$$

SU(2) restaurée

Fondamental $S = 0$

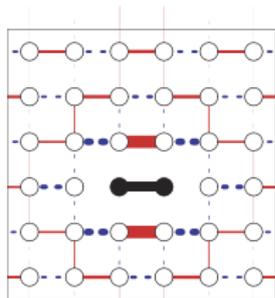
Gap de spin $\Delta \sim J$

Triplets massifs

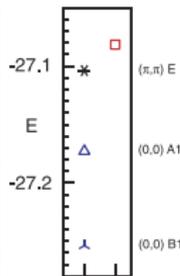


Symétries discrètes ?

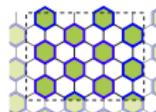
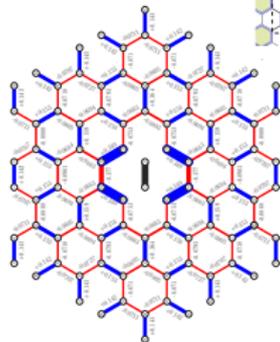
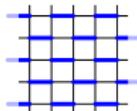
nombre quantique des premiers singulets
correlations à plus de deux points $\langle (S_i \cdot S_j)(S_k \cdot S_l) \rangle$



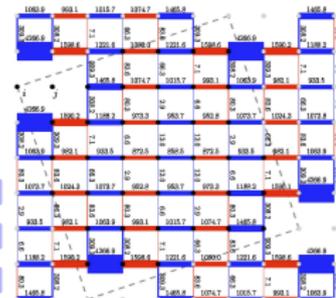
36 sites, $K/J=0.6$, $\theta=0.17\pi$



S 0 1



Albuquerque, Schwandt, Hetényi, Capponi, Mambrini, Läuchli, Pys. Rev. B (2011)



Mambrini, Läuchli, Poilblanc, Mila, Phys. Rev. B (2006)

Läuchli, Domenge, Lhuillier, Sindzingre & Troyer, Phys. Rev. Lett. (2005)

Et après ?...

- ▶ Hierarchie des fonctions de corrélation
- ▶ Restoration des symétries discrètes

Liquide : aucune brisure de symétrie

Et après ?...

- ▶ Hierarchie des fonctions de corrélation
- ▶ Restauration des symétries discrètes

Liquide : aucune brisure de symétrie

2 problèmes

~~Ordre de spin~~

~~Ordre nématique~~

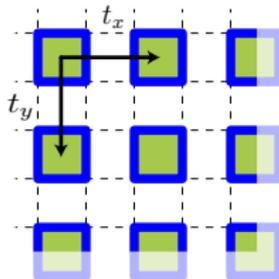
~~Ordre caché~~

~~Ordre de dimères~~

« How can you identify something when you only know what it is not ? »

White, Nature Physics (2012)

Est-ce intéressant ?... pas forcément.



Gap de spin

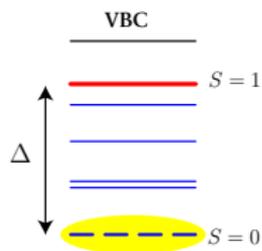
Gap singulet

Aucune symétrie brisée

Liquide de spins ?

Une contrainte sur le spectre

Spin $\frac{1}{2}$ -entier par cellule élémentaire



Symétrie restaurée $\stackrel{?}{\Rightarrow}$ levée de dégénérescence ?

Une contrainte sur le spectre

Spin $\frac{1}{2}$ -entier par cellule élémentaire

Symétrie restaurée \Rightarrow levée de dégénérescence ?

Non !

Théorème de Lieb-Schultz-Mattis-Hastings ($d > 1$)

Lieb, Schultz & Mattis, Annals of Physics (1961)

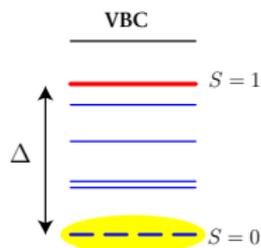
Affleck, Phys. Rev. B (1988)

Bonesteel, Phys. Rev. B (1989)

Oshikawa, Phys. Rev. Lett. (2000)

Hastings, Phys. Rev. B (2004)

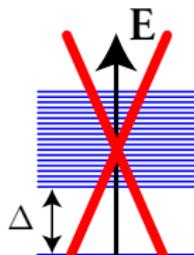
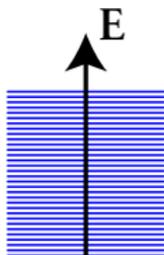
Nachtergaele & Sims, Commun. Math. Phys. (2007)



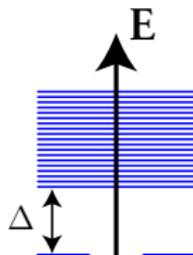
Système non-gappé

Système gappé
 \Rightarrow **fondamental dégénéré**

Ex. Néel



fondamental unique



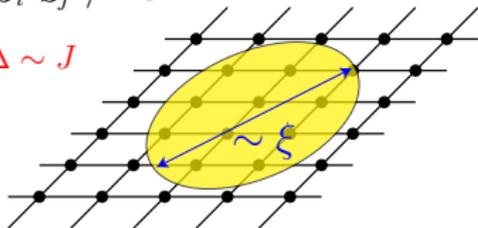
Ex. VBC

Comment concilier absence d'ordre avec ces deux scénarios ?

Spinons ?

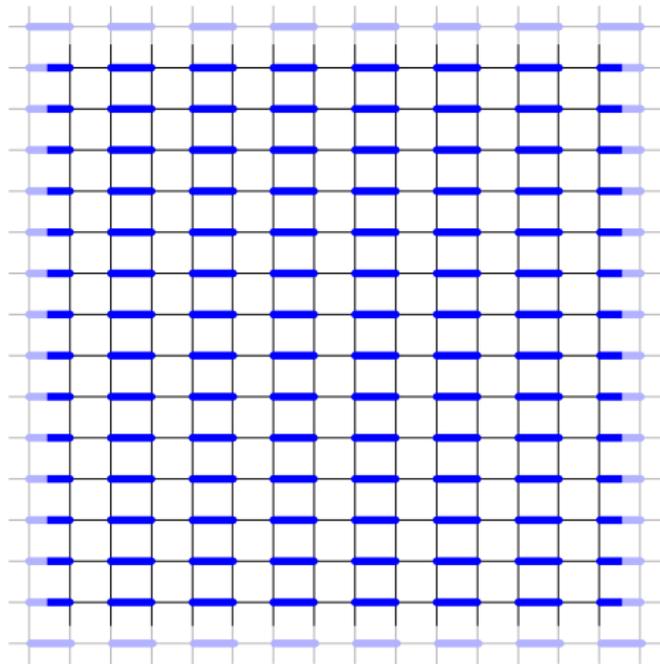
$$\langle S_i^\alpha S_j^\beta \rangle \sim e^{-|i-j|/\xi}$$

$$\Delta \sim J$$



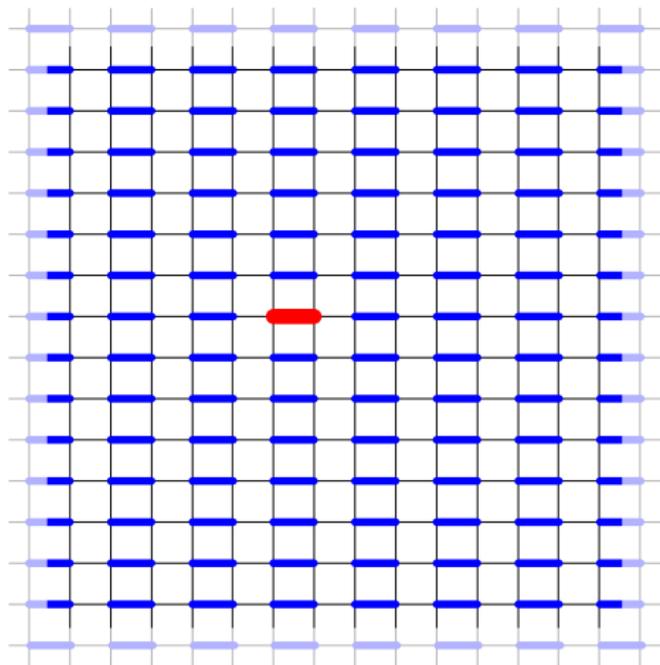
VBC

$$\text{—} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$



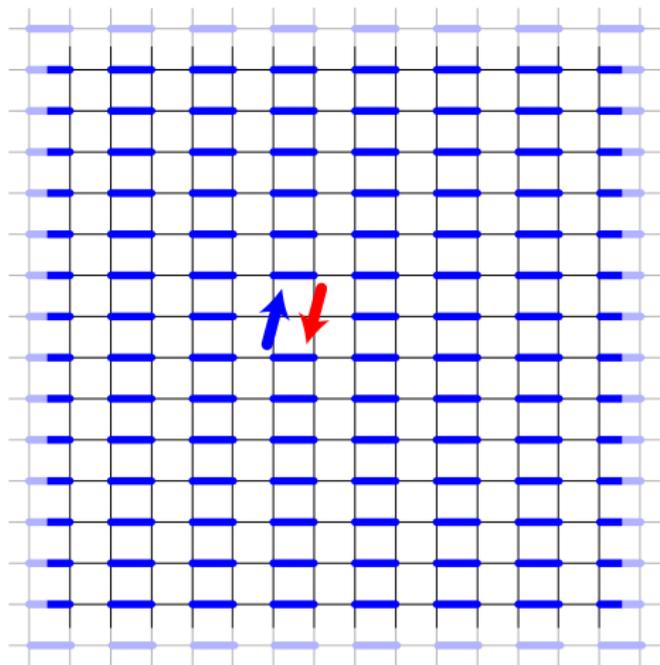
Spinons ?

— $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$
— $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$



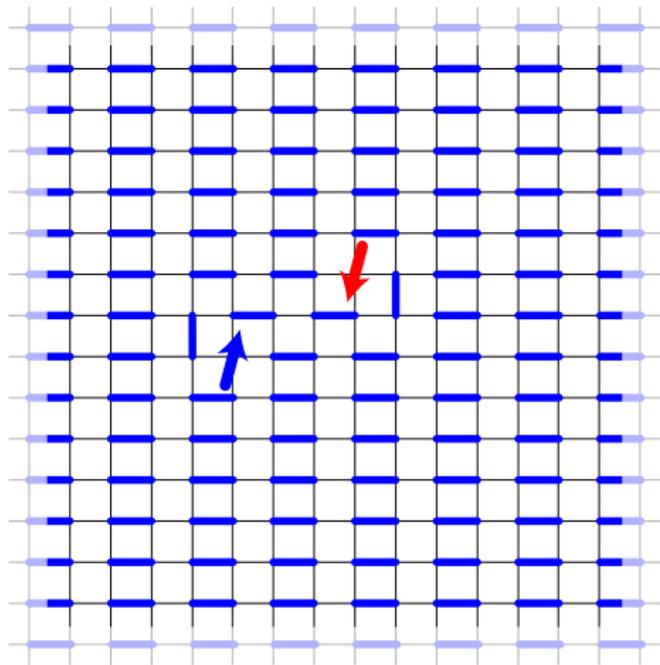
Spinons ?

— $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$
— $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$



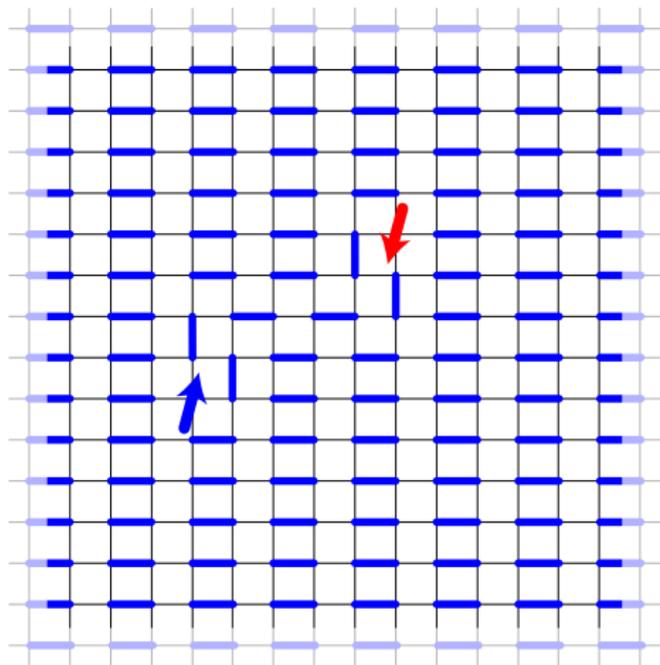
Spinons ?

— $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$
— $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$



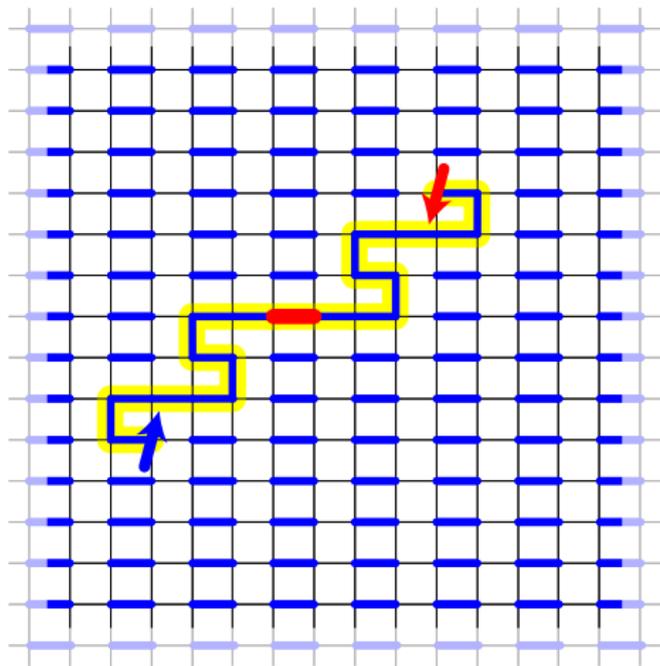
Spinons ?

— $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$
— $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$



Spinons ?

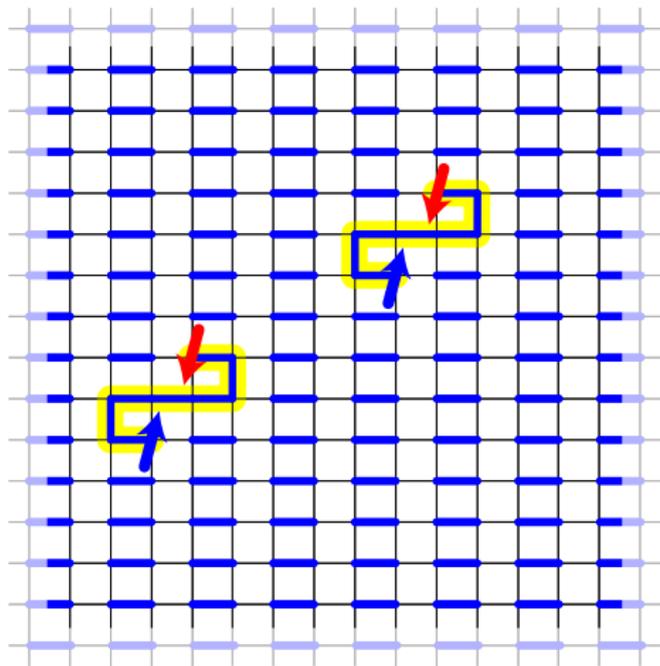
— $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$
— $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$



Spinons ?

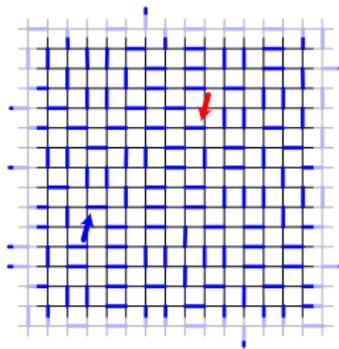
— $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$
— $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$

Confinement
Spinons non observables



Fractionalisation : exemple du liquide \mathbb{Z}_2

▶ Déconfinement



▶ Déconfinement \neq Absence d'interaction

- Champ de jauge (sur réseau)
- Variables vivant sur les liens

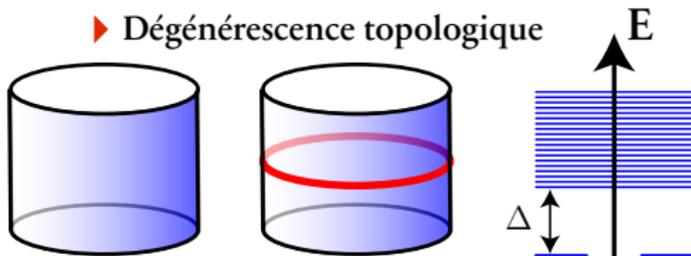
$$A_{ij} \in \{0, \pi\}$$

$$\mathbb{Z}_2$$

- Déplacement d'un spinon

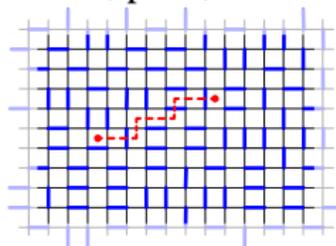
$$c_{0\uparrow}^\dagger \exp(iA_{01} + \dots + iA_{(n-1)n}) c_{n\uparrow}$$

▶ Dégénérescence topologique



- Etats *a priori* différents et dégénérés
- Indistinguable par une observable locale

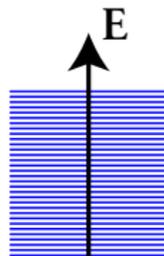
▶ Visons (spin 0)



- Facteur -1 par dimère croisé

▶ Liquide de U(1)

- Corrélations algébrique (critique)
- Non gappé



Où / Comment trouver un liquide $\mathbb{Z}_2 / U(1)$?

Théorie

▶ Modèles de spin ?

« artificiel »

- Modèles type « code torique » \mathbb{Z}_2
- Modèles SU(2) multi-spins \mathbb{Z}_2
- Modèles de dimères quantiques \mathbb{Z}_2
- ...
- Heisenberg kagome $\mathbb{Z}_2/U(1)$??



« réaliste »

▶ Caractérisation

- Spectres, gaps / absence de gaps $\mathbb{Z}_2/U(1)$
- Fonctions de corrélations $\mathbb{Z}_2/U(1)$
- Propriétés des états dégénérés \mathbb{Z}_2
- Entropie de von Neumann \mathbb{Z}_2

Expérience

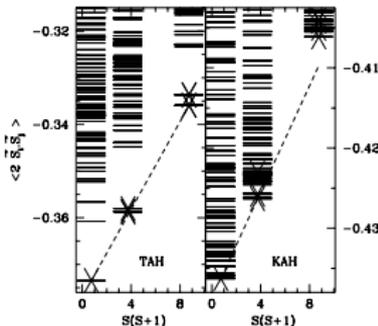
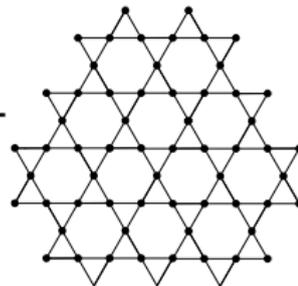
▶ Systèmes

- Frustrés $\mathbb{Z}_2/U(1)$
- Spin 1/2-entier / maille $\mathbb{Z}_2/U(1)$

▶ Caractérisation

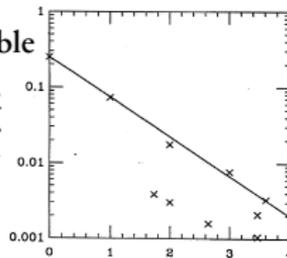
- Pas de mise en ordre à basse température $\mathbb{Z}_2/U(1)$
- Gaps \mathbb{Z}_2 . Comportement activé de C_v et χ
ou
Absence de gap $U(1)$. $C_v \sim T^2$ et $\chi \sim T$
- Continuuum à deux spinons en diffusion inélastique de neutrons \mathbb{Z}_2

Kagome



Lecheminant, Bernu, Lhuillier, Pierre & Sindzinger, Phys. Rev. B (1997)

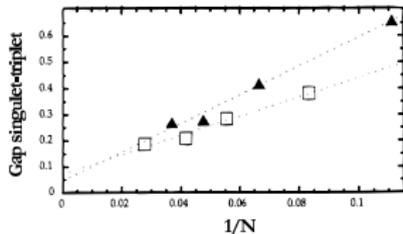
- Tour d'états incompatible avec un ordre de Néel
- Pas de corrélations antiferromagnétiques à longue distance



Leung & Elser, Phys. Rev. B (1993)

- Pas d'interprétation simple des singulets de basse énergie en terme de VBC

- Gap de spin à la limite thermodynamique ?

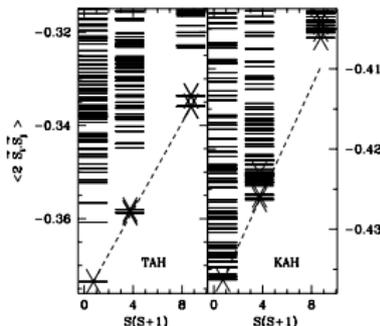
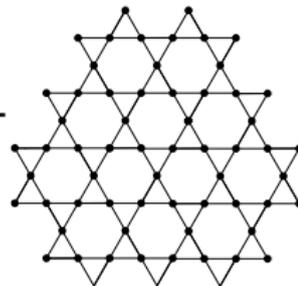


Waldtmann, Everts, Lhuillier, Sindzinger, Lecheminant & Pierre, Eur. Phys. J. B (1998)

Number	$2\langle S_i \cdot S_j \rangle$	k	R_3	R_2	σ	Deg.	VBC-1	VBC-2	VBC-3
1	-43837653	0	1	1	1	1	*b	*	*
2	-43809562	B	$e^{\pm 2\pi/3}$			4			
3	-43807091	0	$e^{\pm 2\pi/3}$	1	2	2			*
4	-43799346	0	1	1	1	1			*
5	-43785105	C				6	*b		*
6	-43758510	0	1	-1	1	1			*
7	-43758455	A		1	1	3	*b		*
8	-43751941	C			-1	6	*a		*
9	-43721566	0	1	1	-1	1	*a		*
10	-43718796	0	$e^{\pm 2\pi/3}$	1	2	2			*
11	-43714765	A		-1	-1	3			*
12	-43705108	0	$e^{\pm 2\pi/3}$	-1	2	2			*
13	-43703981	B	1	1	2	2	*b		*
14	-43703469	A		-1	1	3			*
15	-43685867	0	1	-1	-1	1			*
16	-43685319	B	1	-1	-1	2	*a		*
17	-43683757	A		1	-1	3	*a	*	*
...			
44	-0.43474519	0	$e^{\pm 2\pi/3}$	-1	2	2			*

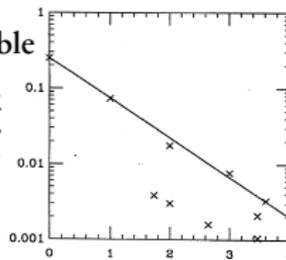
Misguich & Sindzinger, Journal of Physics: Condens. Matter (2007)

Kagome



Lecheminant, Bernu, Lhuillier, Pierre & Sindzinger, Phys. Rev. B (1997)

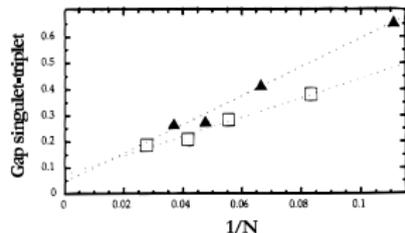
- Tour d'états incompatible avec un ordre de Néel
- Pas de corrélations antiferromagnétiques à longue distance



Leung & Elser, Phys. Rev. B (1993)

- Pas d'interprétation simple des singulets de basse énergie en terme de VBC

- Gap de spin à la limite thermodynamique ?



Waldtmann, Everts, Lhuillier, Sindzinger, Lecheminant & Pierre, Eur. Phys. J. B (1998)

Liquide de spins gappé ?

Liquide de spins sans gap ?

VBC avec grande cellule ?

number	$2(S_i \cdot S_j)$	k	R_3	R_2	σ	Deg.	VBC-1	VBC-2	VBC-3
0	-43837653	0	1	1	1	1	*b	*	*
2	-43809562	B	$e^{\pm 2i\pi/3}$	1	1	2			*
3	-43807091	0	$e^{\pm 2i\pi/3}$	1	1	2			*
4	-43799346	0	1	1	1	1			*
5	-43785105	C				6	*b		*
	-43758510	0	1	-1	1	1	*b		*
	-43758455	A		1	1	3	*a		*
	-43751941	C			-1	6	*a		*
9	-43721566	0	1	1	-1	1			*
10	-43718796	0	$e^{\pm 2i\pi/3}$	1	2	2			*
11	-43714765	A		-1	-1	3			*
	-43705108	0	$e^{\pm 2i\pi/3}$	-1	-1	2			*
	-43703981	B	1	1	2	2	*b		*
	-43703469	A		-1	1	3			*
15	-43685867	0	1	-1	-1	1			*
16	-43685319	B	1	-1	-1	2	*a		*
17	-43683757	A		1	-1	3	*a	*	*
...			
44	-0.43474519	0	$e^{\pm 2i\pi/3}$	-1	-1	2			*

Misguich & Sindzinger, Journal of Physics: Condens. Matter (2007)

Depuis 2008

► Obstacle majeur : la taille des échantillons

● Fonction d'onde

Variational projected BCS states

Iqbal, Becca, Sorella, Poilblanc, arXiv:1209.1858

DMRG (Density-Matrix Renormalization Group)

Jiang, Weng & Sheng, Phys. Rev. Lett. (2008)

Yan, Huse, White, Science (2011)

Depenbrock, McCulloch & Schollwöck, Phys. Rev. Lett. (2012)

Jiang, Wang & Balents, Nature Physics (2012)

MPS (Matrix Product States), PEPS, MERA

Evenbly & Vidal, Phys. Rev. Lett. (2010)

● Hamiltoniens (modèles effectifs)

CORE (Contractor renormalization)

Capponi, Chandra, Auerbach
& Weinstein, arXiv:1210.5519

GQDM (Generalized Quantum Dimer Models)

Poilblanc, Mambrini & Schwandt, Phys. Rev. B (2010)
Schwandt, Mambrini & Poilblanc, Phys. Rev. B (2010)
Poilblanc & Misguich, Phys. Rev. B (2011)

● Diagonalisations exactes

48 sites !

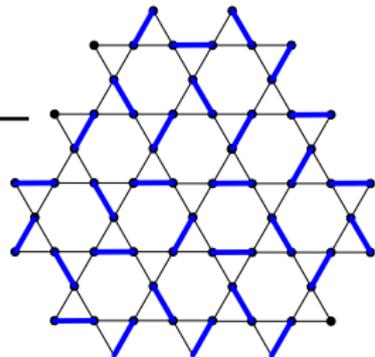
Laüchli, Johanni, Moessner, unpublished (2012)

GQDM

► Kagomé dans la base des états VB proche voisins

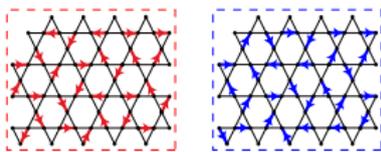
- Bonne description des singulets de basse énergie
- Point de départ raisonnable pour décrire le fondamental

Zeng & Elser, Phys. Rev. B (1995)
Mila, Phys. Rev. Lett. (1998)
Mambrini & Mila, Eur. Phys. J B (2000)



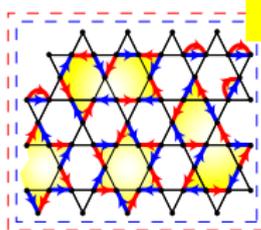
► Objectif : un (G)QDM relié de manière quantitative au modèle microscopique

Ralko, Mambrini & Poilblanc,
Poilblanc, Mambrini & Schwandt, Phys. Rev. B (2010)
Schwandt, Mambrini & Poilblanc, Phys. Rev. B (2010)
Albuquerque, Schwandt, Hetényi, Capponi, Mambrini, Läuchli, Pys. Rev. B (2011)



φ $\langle \varphi | \psi \rangle$ ψ

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \alpha^{N-2n_t(g)}$$



$$\mathcal{H}|\psi\rangle = E \mathcal{O}|\psi\rangle$$

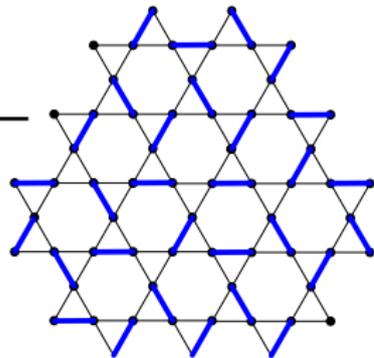
Problème aux valeurs
propres généralisé (plein)

$$\mathcal{H}^{\text{eff}} = \mathcal{O}^{-1/2} \mathcal{H} \mathcal{O}^{-1/2}$$

Opérateur hermitien (creux)
Base orthogonale

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = & -\frac{4}{5} \text{[hexagon]} + \frac{1}{5} \text{[pentagon]} + \frac{16}{63} \text{[pentagon]} + \frac{16}{63} \text{[triangle]} + \frac{16}{63} \text{[square]} \\ & + \frac{2}{63} \text{[pentagon]} + \frac{2}{63} \text{[triangle]} + \frac{2}{63} \text{[square]} - \frac{16}{255} \text{[triangle]} - \frac{16}{255} \text{[square]} \\ & - \frac{16}{255} \text{[triangle]} + \frac{1}{255} \text{[star]} + \frac{1}{255} \text{[star]} + \frac{1}{255} \text{[star]} + \frac{1}{255} \text{[star]} \\ & + 0 \text{[star]} + 0 \text{[star]} \end{aligned}$$

GQDM



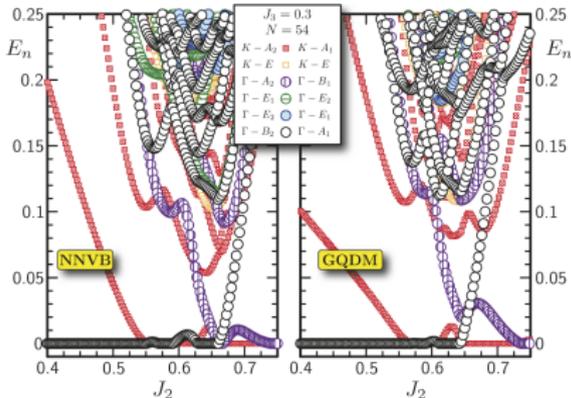
► Kagomé dans la base des états VB proche voisins

- Bonne description des singulets de basse énergie
- Point de départ raisonnable pour décrire le fondamental

Zeng & Elser, Phys. Rev. B (1995)
 Mila, Phys. Rev. Lett. (1998)
 Mambrini & Mila, Eur. Phys. J B (2000)

► Objectif : un (G)QDM relié de manière quantitative au modèle microscopique

Ralko, Mambrini & Poilblanc,
 Poilblanc, Schwandt & Mambrini, Phys. Rev. B (2010)
 Schwandt, Mambrini & Poilblanc, Phys. Rev. B (2010)
 Albuquerque, Schwandt, Hetényi, Capponi, Mambrini, Läuchli, Pys. Rev. B (2011)



$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = -\frac{4}{5} \text{[Diagram 1]} + \frac{1}{5} \text{[Diagram 2]} + \frac{16}{63} \text{[Diagram 3]} + \frac{16}{63} \text{[Diagram 4]} + \frac{16}{63} \text{[Diagram 5]}$$

$$+ \frac{2}{63} \text{[Diagram 6]} + \frac{2}{63} \text{[Diagram 7]} + \frac{2}{63} \text{[Diagram 8]} - \frac{16}{255} \text{[Diagram 9]} - \frac{16}{255} \text{[Diagram 10]}$$

$$- \frac{16}{255} \text{[Diagram 11]} + \frac{1}{255} \text{[Diagram 12]} + \frac{1}{255} \text{[Diagram 13]} + \frac{1}{255} \text{[Diagram 14]}$$

$$+ 0 \text{[Diagram 15]} + 0 \text{[Diagram 16]}$$

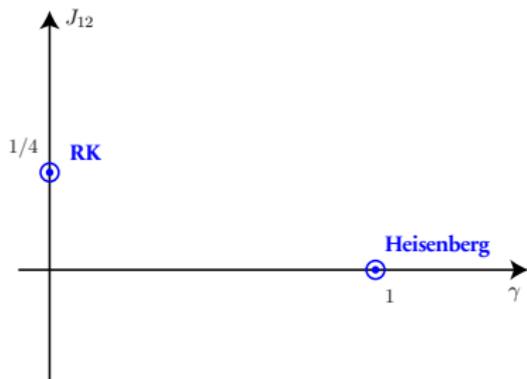
GQDM

$$\hat{H}_{RK} = - \left(\text{Diagram 1} + \frac{1}{5} \text{Diagram 2} \right) - \left(\text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} \right) \\ + \left(\text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} \right) - \left(\text{Diagram 9} + \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} \right) \\ + \left(\text{Diagram 12} + \text{Diagram 13} + \text{Diagram 14} \right) - \left(\text{Diagram 15} + \text{Diagram 16} \right)$$

(Note: Diagrams 2, 6, 7, 8, 12, 13, 14, and 16 are crossed out with red X's.)

G. Misguich, D. Serban, and V. Pasquier, Phys. Rev. Lett. **89**, 137202 (2002)

$$\hat{H}_{\text{interp.}}(\gamma, J_{12}) = \gamma \hat{H}_{\text{eff}} + (1 - \gamma) \hat{H}_{RK} \\ + \left(J_{12} + \frac{1}{4}(\gamma - 1) \right) \text{Diagram 15}$$



$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{4}{5} \text{Diagram 1} + \frac{1}{5} \text{Diagram 2} + \frac{16}{63} \left(\text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} \right) \\ + \frac{2}{63} \left(\text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} \right) - \frac{16}{255} \left(\text{Diagram 9} + \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} \right) \\ + \frac{1}{255} \left(\text{Diagram 12} + \text{Diagram 13} + \text{Diagram 14} \right) + 0 \left(\text{Diagram 15} + \text{Diagram 16} \right)$$

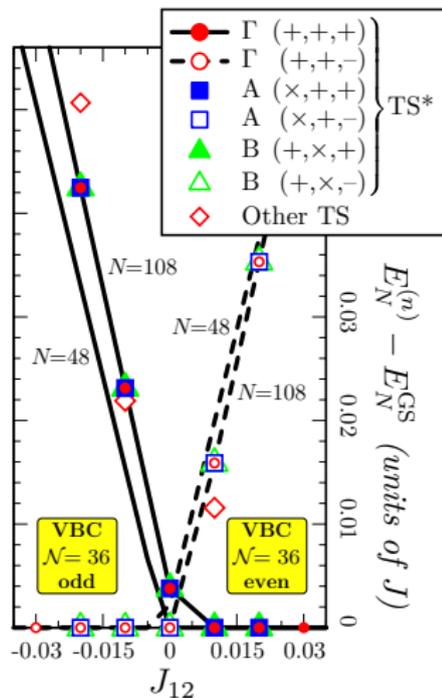
GQDM

$$\hat{H}_{RK} = - \left[\text{Diagram 1} + \frac{1}{5} \text{Diagram 2} \right] - \left(\text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} \right) \\ + \left(\text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} \right) - \left(\text{Diagram 9} + \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} \right) \\ + \left(\text{Diagram 12} + \text{Diagram 13} + \text{Diagram 14} \right) - \left(\text{Diagram 15} + \text{Diagram 16} \right)$$

G. Misguich, D. Serban, and V. Pasquier, Phys. Rev. Lett. **89**, 137202 (2002)

$$\hat{H}_{\text{interp.}(\gamma, J_{12})} = \gamma \hat{H}_{\text{eff}} + (1 - \gamma) \hat{H}_{RK} \\ + \left(J_{12} + \frac{1}{4}(\gamma - 1) \right) \text{Diagram 17}$$

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{4}{5} \text{Diagram 18} + \frac{1}{5} \text{Diagram 19} + \frac{16}{63} \left(\text{Diagram 20} + \text{Diagram 21} + \text{Diagram 22} \right) \\ + \frac{2}{63} \left(\text{Diagram 23} + \text{Diagram 24} + \text{Diagram 25} \right) - \frac{16}{255} \left(\text{Diagram 26} + \text{Diagram 27} + \text{Diagram 28} \right) \\ + \frac{1}{255} \left(\text{Diagram 29} + \text{Diagram 30} + \text{Diagram 31} \right) + 0 \left(\text{Diagram 32} + \text{Diagram 33} \right)$$



Poiblan, Mambrini & Schwandt, Phys. Rev. B (2010)

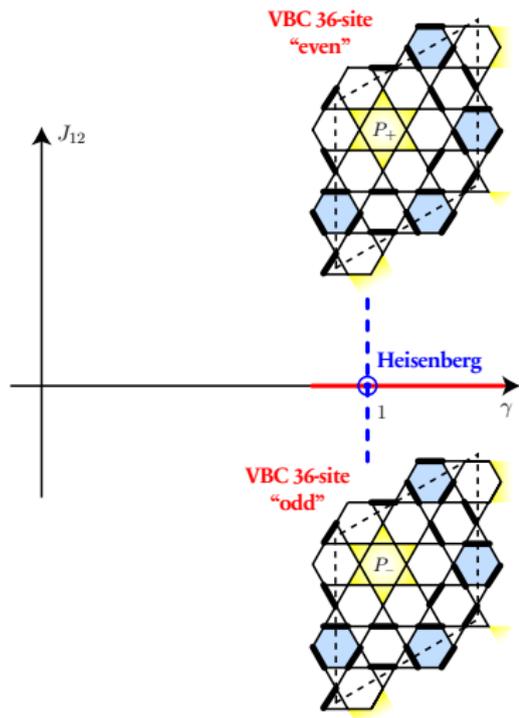
GQDM

$$\begin{aligned} \hat{H}_{RK} = & - \left(\text{Diagram 1} + \frac{1}{5} \text{Diagram 2} \right) - \left(\text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} \right) \\ & + \left(\text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} \right) - \left(\text{Diagram 9} + \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} \right) \\ & + \left(\text{Diagram 12} + \text{Diagram 13} + \text{Diagram 14} \right) - \left(\text{Diagram 15} + \text{Diagram 16} \right) \end{aligned}$$

G. Misguich, D. Serban, and V. Pasquier, Phys. Rev. Lett. **89**, 137202 (2002)

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{interp.}}(\gamma, J_{12}) = & \gamma \hat{H}_{\text{eff}} + (1 - \gamma) \hat{H}_{RK} \\ & + \left(J_{12} + \frac{1}{4}(\gamma - 1) \right) \text{Diagram 17} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} = & -\frac{4}{5} \text{Diagram 18} + \frac{1}{5} \text{Diagram 19} + \frac{16}{63} \left(\text{Diagram 20} + \text{Diagram 21} + \text{Diagram 22} \right) \\ & + \frac{2}{63} \left(\text{Diagram 23} + \text{Diagram 24} + \text{Diagram 25} \right) - \frac{16}{255} \left(\text{Diagram 26} + \text{Diagram 27} + \text{Diagram 28} \right) \\ & + \frac{1}{255} \left(\text{Diagram 29} + \text{Diagram 30} + \text{Diagram 31} \right) + 0 \left(\text{Diagram 32} + \text{Diagram 33} \right) \end{aligned}$$



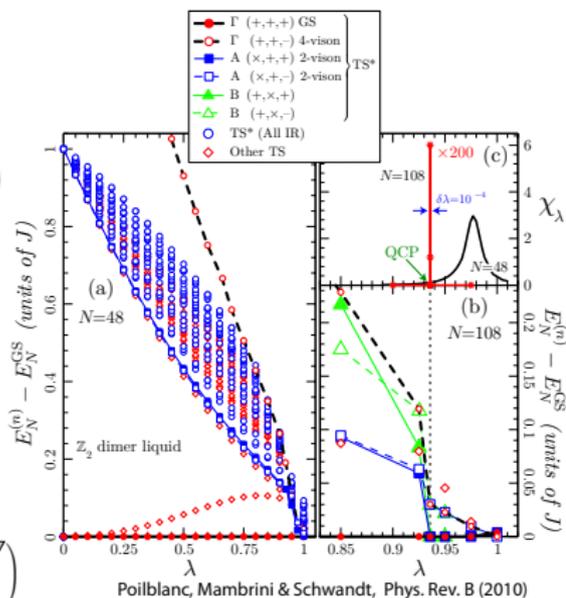
GQDM

$$\hat{H}_{RK} = - \left[\text{Diagram 1} + \frac{1}{5} \text{Diagram 2} \right] - \left(\text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} \right) \\ + \left(\text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} \right) - \left(\text{Diagram 9} + \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} \right) \\ + \left(\text{Diagram 12} + \text{Diagram 13} + \text{Diagram 14} \right) - \left(\text{Diagram 15} + \text{Diagram 16} \right)$$

G. Misguich, D. Serban, and V. Pasquier, Phys. Rev. Lett. **89**, 137202 (2002)

$$\hat{H}_{\text{interp.}}(\gamma, J_{12}) = \gamma \hat{H}_{\text{eff}} + (1 - \gamma) \hat{H}_{RK} \\ + \left(J_{12} + \frac{1}{4}(\gamma - 1) \right) \text{Diagram 17}$$

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{4}{5} \text{Diagram 18} + \frac{1}{5} \text{Diagram 19} + \frac{16}{63} \left(\text{Diagram 20} + \text{Diagram 21} + \text{Diagram 22} \right) \\ + \frac{2}{63} \left(\text{Diagram 23} + \text{Diagram 24} + \text{Diagram 25} \right) - \frac{16}{255} \left(\text{Diagram 26} + \text{Diagram 27} + \text{Diagram 28} \right) \\ + \frac{1}{255} \left(\text{Diagram 29} + \text{Diagram 30} + \text{Diagram 31} \right) + 0 \left(\text{Diagram 32} + \text{Diagram 33} \right)$$



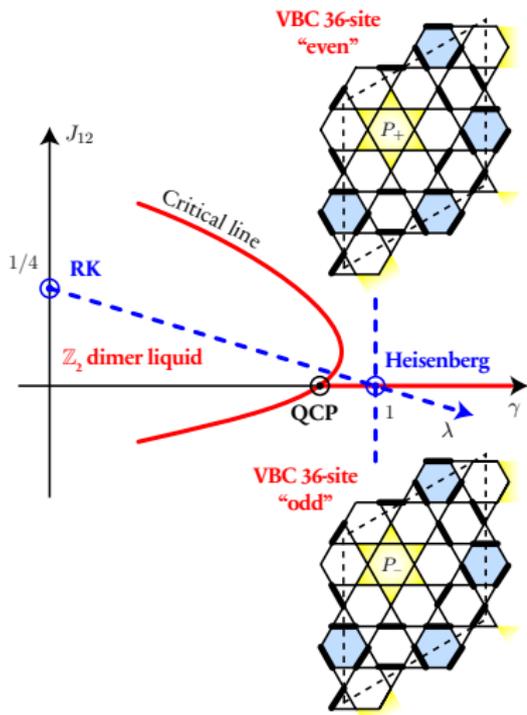
GQDM

$$\hat{H}_{RK} = - \left(\text{Diagram 1} + \frac{1}{5} \text{Diagram 2} \right) - \left(\text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} \right) \\ + \left(\text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} \right) - \left(\text{Diagram 9} + \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} \right) \\ + \left(\text{Diagram 12} + \text{Diagram 13} + \text{Diagram 14} \right) - \left(\text{Diagram 15} + \text{Diagram 16} \right)$$

G. Misguich, D. Serban, and V. Pasquier, Phys. Rev. Lett. **89**, 137202 (2002)

$$\hat{H}_{\text{interp.}}(\gamma, J_{12}) = \gamma \hat{H}_{\text{eff}} + (1 - \gamma) \hat{H}_{RK} \\ + \left(J_{12} + \frac{1}{4}(\gamma - 1) \right) \text{Diagram 17}$$

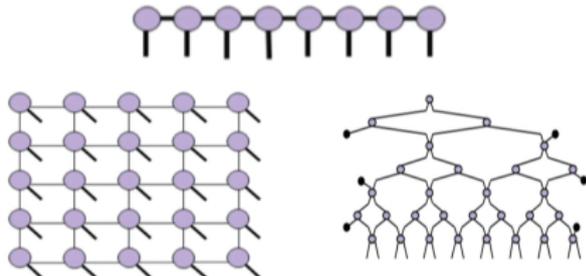
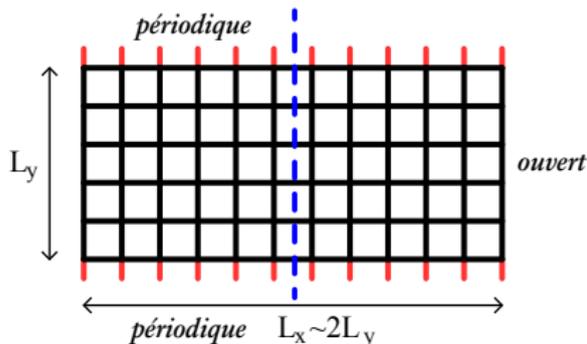
$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{4}{5} \text{Diagram 18} + \frac{1}{5} \text{Diagram 19} + \frac{16}{63} \left(\text{Diagram 20} + \text{Diagram 21} + \text{Diagram 22} \right) \\ + \frac{2}{63} \left(\text{Diagram 23} + \text{Diagram 24} + \text{Diagram 25} \right) - \frac{16}{255} \left(\text{Diagram 26} + \text{Diagram 27} + \text{Diagram 28} \right) \\ + \frac{1}{255} \left(\text{Diagram 29} + \text{Diagram 30} + \text{Diagram 31} \right) + 0 \left(\text{Diagram 32} + \text{Diagram 33} \right)$$



DMRG

$$\sum_{s_1 \cdots s_N} \text{Tr}(A^{s_1} \cdots A^{s_N}) |s_1 \cdots s_N\rangle$$

- Système 2d simulé comme un système 1d
- Accès à de très grandes tailles
- Propriétés d'intrication accessibles via la matrice densité



$$S(A) \sim \sigma L - \gamma + \dots$$

Jiang, Weng & Sheng, Phys. Rev. Lett. (2008)

Yan, Huse, White, Science (2011)

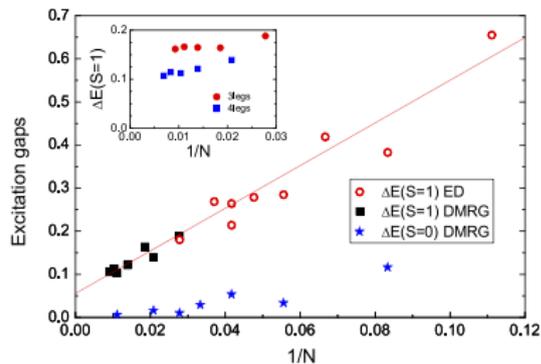
Depenbrock, McCulloch & Schollwöck, Phys. Rev. Lett. (2012)

Jiang, Wang & Balents, Nature Physics (2012)

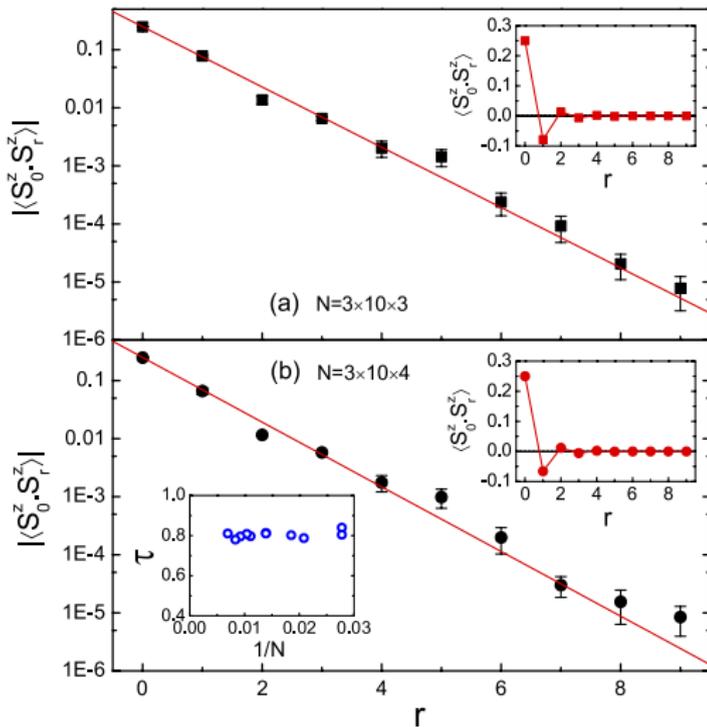
Evenbly & Vidal, Phys. Rev. Lett. (2010)

DMRG

Jiang, Weng & Sheng, Phys. Rev. Lett. (2008)

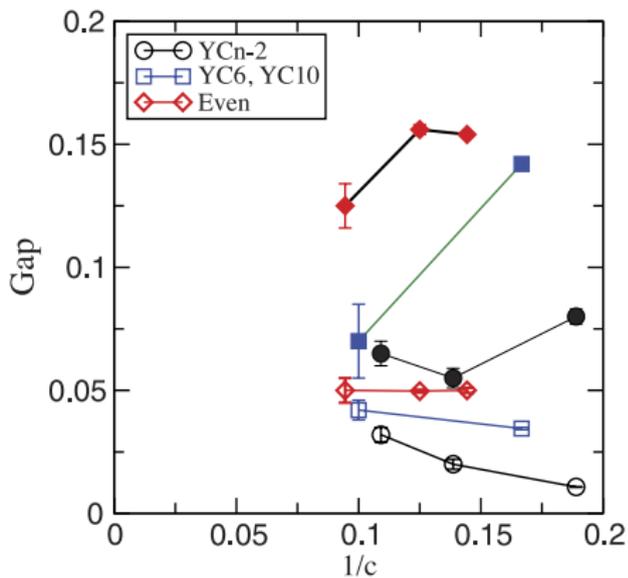
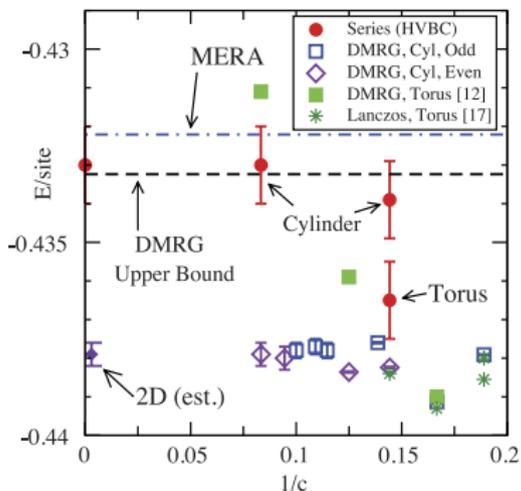
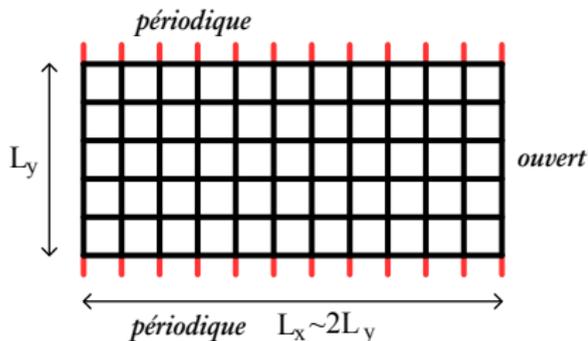


N	ϵ_0	$\Delta E(S=1)$
$3 \times 4 \times 3$	-0.438 98	0.188
$3 \times 6 \times 3$	-0.438 75	0.164
$3 \times 8 \times 3$	-0.438 67	0.165
$3 \times 10 \times 3$	-0.438 68	0.163
$3 \times 12 \times 3$	-0.438 65	0.163
$3 \times 4 \times 4$	-0.435 91	0.140
$3 \times 6 \times 4$	-0.435 64	0.122
$3 \times 8 \times 4$	-0.435 56	0.112
$3 \times 10 \times 4$	-0.435 52	0.114
$3 \times 6 \times 6$	-0.431 11	0.105



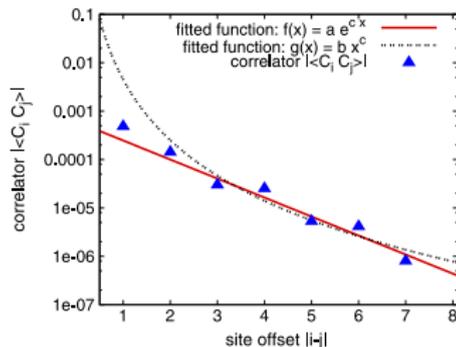
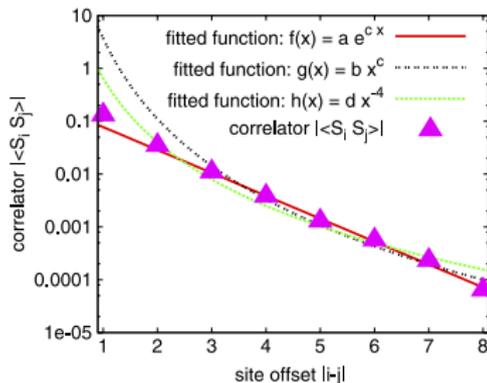
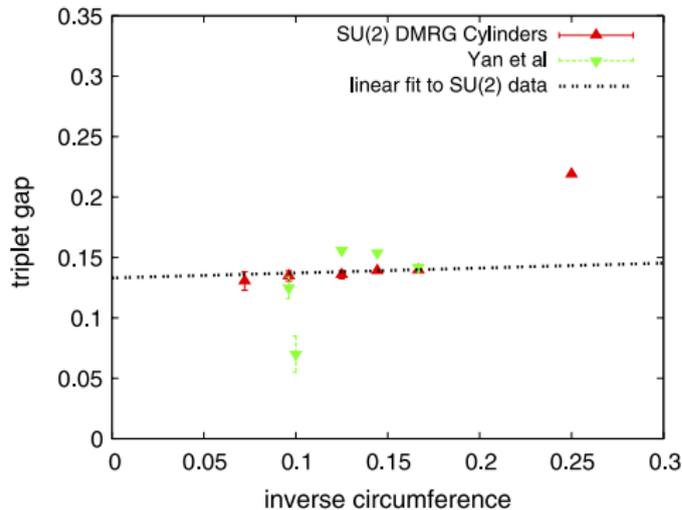
DMRG

Yan, Huse, White, Science (2011)



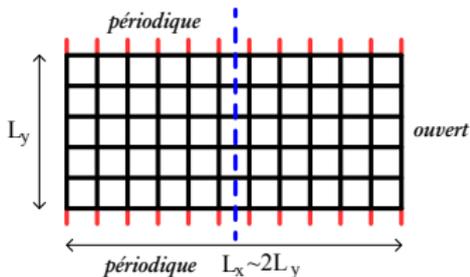
DMRG

Depenbrock, McCulloch & Schollwöck, Phys. Rev. Lett. (2012)



$$\langle C_{ijk} C_{lmn} \rangle = \langle \vec{S}_i \cdot (\vec{S}_j \times \vec{S}_k) \cdot \vec{S}_l \cdot (\vec{S}_m \times \vec{S}_n) \rangle$$

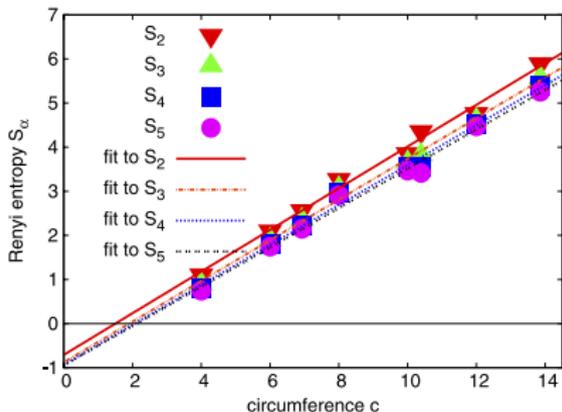
DMRG



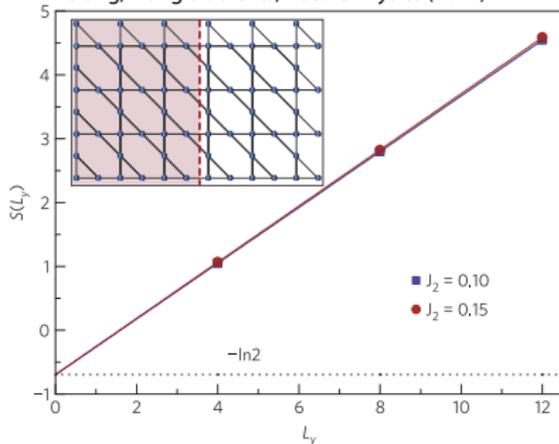
$$S(A) \sim \sigma L - \gamma + \dots$$

Liquide de spins \mathbb{Z}_2

Depenbrock, McCulloch & Schollwöck, Phys. Rev. Lett. (2012)



Jiang, Wang & Balents, Nature Physics (2012)



Fonctions fermioniques projetées

Iqbal, Becca, Sorella, Poilblanc, arXiv:1209.1858

Représentation fermionique

$$\vec{S}_i = \frac{1}{2} c_{i,\alpha}^\dagger \vec{r}_{\alpha,\beta} c_{i,\beta}$$

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j,\alpha,\beta} J_{ij} \left(c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\alpha} c_{j,\beta}^\dagger c_{i,\beta} + \frac{1}{2} c_{i,\alpha}^\dagger c_{i,\alpha} c_{j,\beta}^\dagger c_{j,\beta} \right)$$

$$c_{i,\alpha}^\dagger c_{i,\alpha} = 1 \quad c_{i,\alpha} c_{i,\beta} \epsilon_{\alpha\beta} = 0$$

Champ moyen

$$\mathcal{H}_{MF} = \sum_{i,j,\alpha} (\chi_{ij} + \mu \delta_{ij}) c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\alpha} + \sum_{i,j} \{ (\Delta_{ij} + \zeta \delta_{ij}) c_{i,\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow}^\dagger + \text{h.c.} \}$$

$$\langle c_{i,\alpha}^\dagger c_{i,\alpha} \rangle = 1 \quad \langle c_{i,\alpha} c_{i,\beta} \rangle \epsilon_{\alpha\beta} = 0$$

Contrainte : 1 fermion par site

$$|\Psi_{\text{Proj}}(\chi_{ij}, \Delta_{ij}, \mu)\rangle = \mathcal{P}_G |\Psi_{MF}(\chi_{ij}, \Delta_{ij}, \mu, \zeta)\rangle$$

$$\mathcal{P}_G = \prod_i (1 - n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow})$$

Quelques pas Lanczos

$$|\Psi_{p-LS}\rangle = \left(1 + \sum_{m=1,\dots,p} \alpha_m \mathcal{H}^m \right) |\Psi_{VMC}\rangle$$

Extrapolation variance nulle

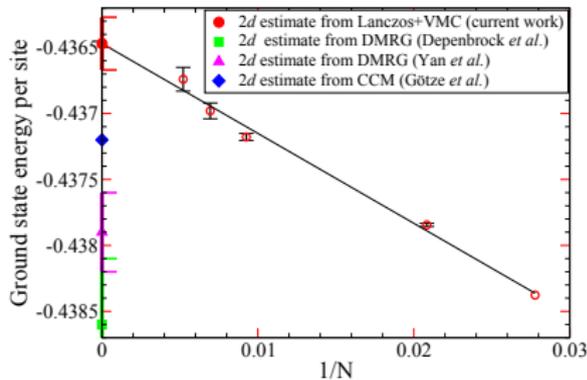
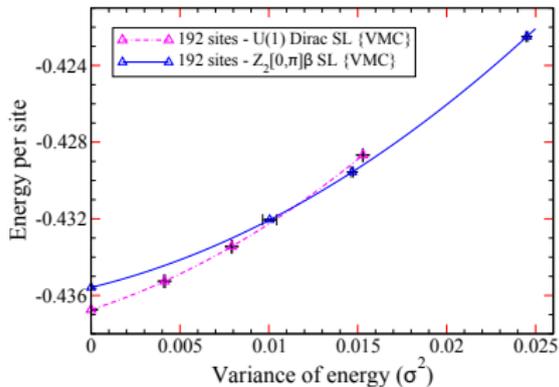
$$E = \langle \mathcal{H} \rangle / N$$

$$\sigma^2 = (\langle \mathcal{H}^2 \rangle - E^2) / N$$

$$E \simeq E_0 + \text{const} \times \sigma^2$$

Fonctions fermioniques projetées

Iqbal, Becca, Sorella, Poilblanc, arXiv:1209.1858

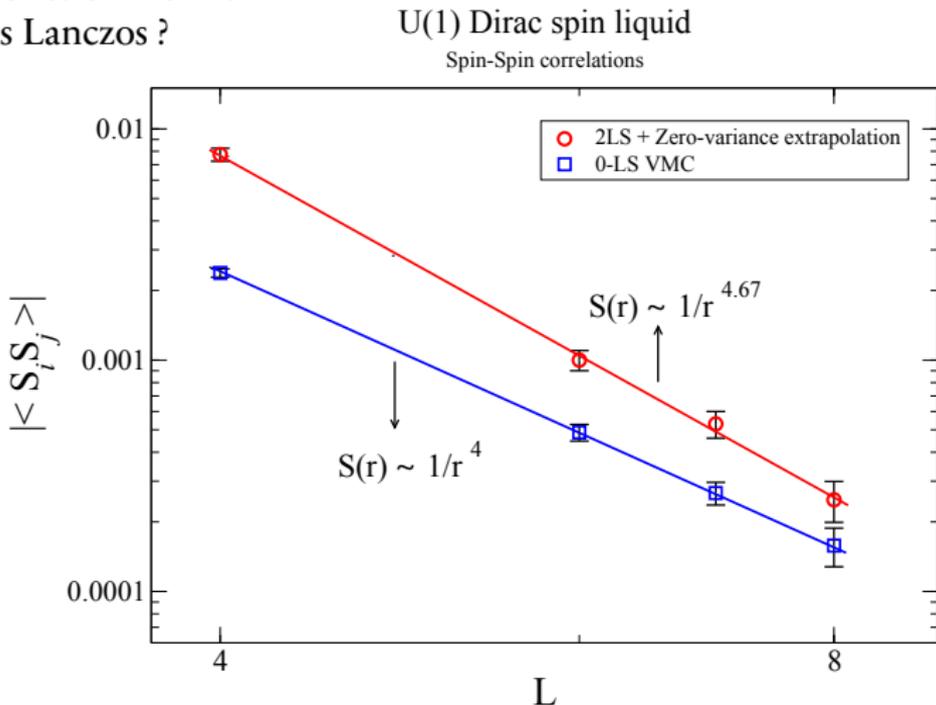


Liquide de spins U(1) algébrique (sans gap)

Fonctions fermioniques projetées

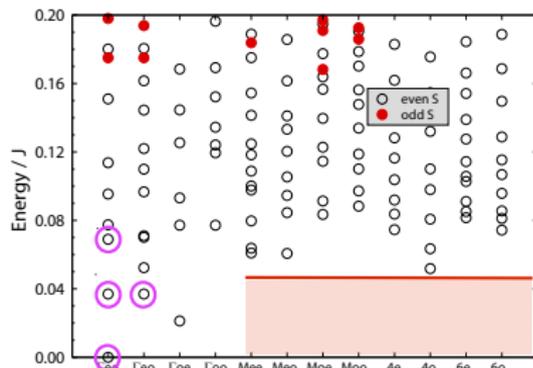
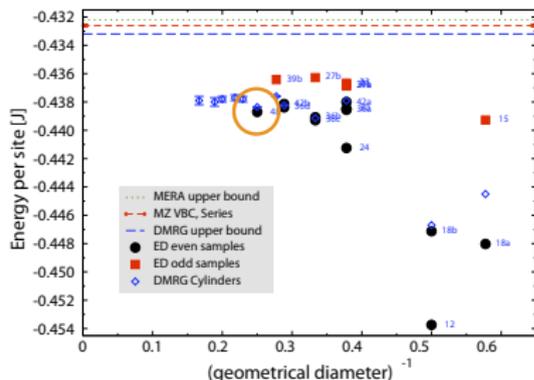
Iqbal, Becca, Sorella, Poilblanc, arXiv:1209.1858

- Nature de la fonction d'onde après deux pas Lanczos ?



Diagonalisation Exactes

Laüchli, Johanni, Moessner, unpublished (2012)



DMRG: Yan, Huse, White, Science (2011)

ED 42 sites: Laüchli, Sudan & Sørensen, Phys. Rev. B (2011)

- Energie par site
- Borne supérieure pour le gap

$$E/NJ = -0.4387 \quad \Delta/J = 0.168$$

-0.4383(2) Depenbrock, McCulloch & Schollwöck, Phys. Rev. Lett. (2012)

-0.437845(4) Iqbal, Becca, Sorella, Poilblanc, arXiv:1209.1858

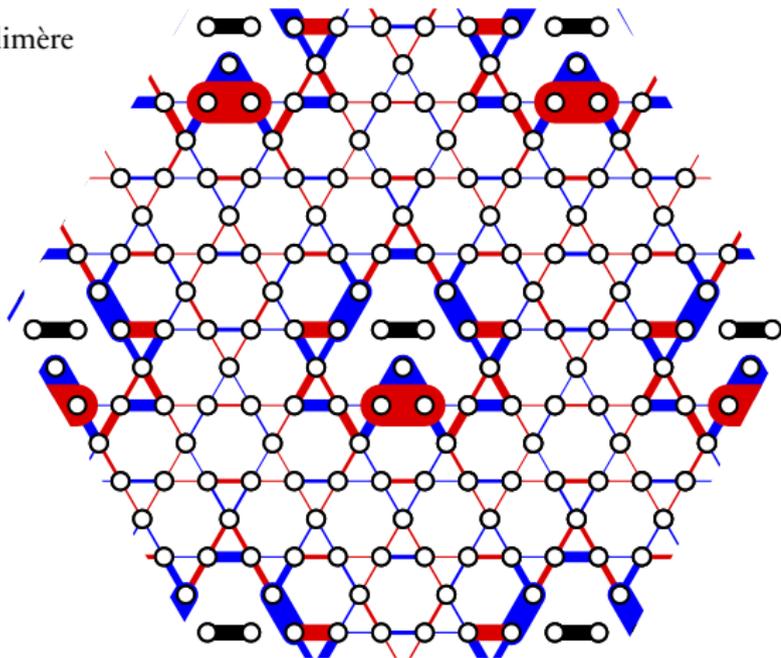
-0.43663 Jiang, Weng & Sheng, Phys. Rev. Lett. (2008)

- Evaporation des singulets ?
- Dégénérescence topologique \mathbb{Z}_2 ?
- Brisure de translation peu probable

Diagonalisation Exactes

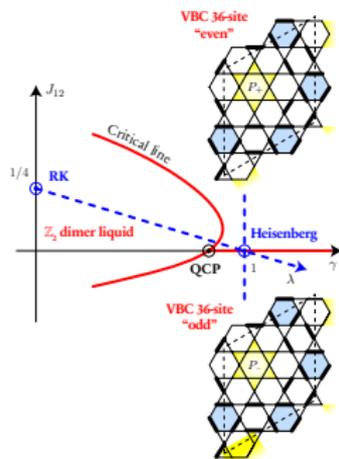
Laüchli, Johanni, Moessner, unpublished (2012)

- Corrélations dimères-dimère dans le fondamental

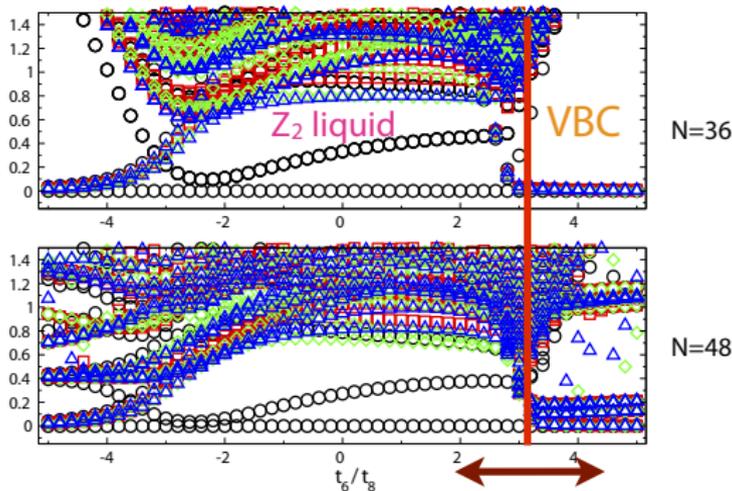


Diagonalisation Exactes

Laüchli, Johanni, Moessner, unpublished (2012)

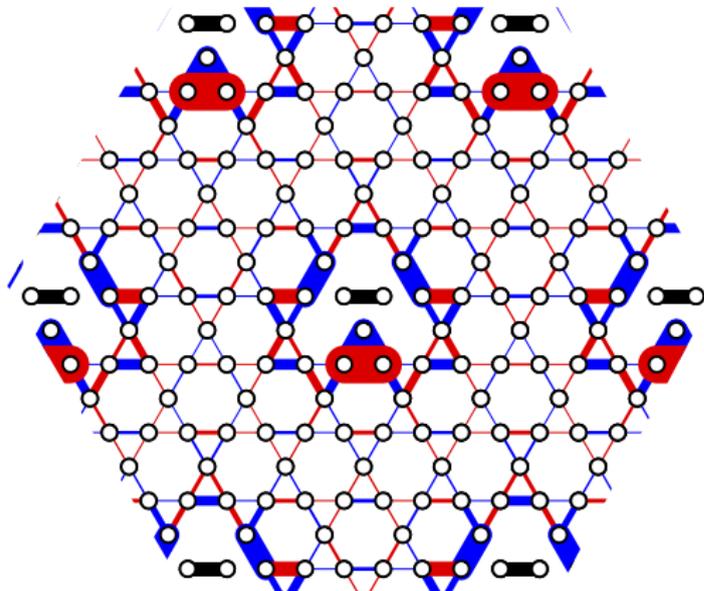


$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} = & -\frac{4}{5} \langle \text{hexagon} \rangle + \frac{1}{5} \langle \text{pentagon} \rangle + \frac{16}{63} \left(\langle \text{triangle} \rangle + \langle \text{square} \rangle + \langle \text{pentagon} \rangle \right) \\ & + \frac{2}{63} \left(\langle \text{hexagon} \rangle + \langle \text{heptagon} \rangle + \langle \text{octagon} \rangle \right) - \frac{16}{255} \left(\langle \text{star} \rangle + \langle \text{star} \rangle + \langle \text{star} \rangle \right) \\ & + \frac{1}{255} \left(\langle \text{star} \rangle + \langle \text{star} \rangle + \langle \text{star} \rangle \right) + 0 \left(\langle \text{star} \rangle + \langle \text{star} \rangle \right) \end{aligned}$$

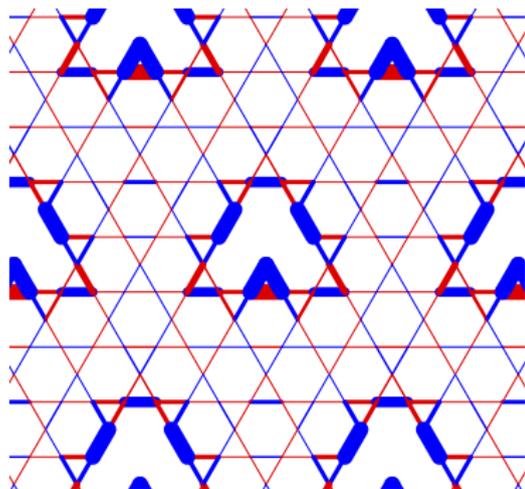


Diagonalisation Exactes

Laüchli, Johanni, Moessner, unpublished (2012)



● Exact



● GQDM Heisenberg modifié (\mathbb{Z}_2)

Conclusion

Claudine Lacroix
Philippe Mendels
Frédéric Mila
Editors

SPRINGER SERIES IN SOLID-STATE SCIENCES 164

Introduction to Frustrated Magnetism

Materials, Experiments, Theory

Springer



- Grande variété de phases
ordre magnétique ... liquides de spins
- Modèles sans désordre... *états désordonnés $T=0$*
Modèles locaux... *effets non-locaux (topologiques)*

*Mises en évidence
expérimentale*

COMPOSÉS RÉELS

*Modèle de Heisenberg
 $SU(2)$*

**MODÈLES MICROSCOPIQUES
« RÉALISTES »**

*Liquides de spins
Spinons déconfinés
Fractionalisation
Visons
Propriétés topologiques
Intrication*

**THÉORIES DE JAUGE SUR RÉSEAU
MODÈLES « ARTIFIELS »**