Instabilité de la chaîne magnétique linéaire XY

J.Y. Dubois, J.P. Carton

Classification
Physics Abstracts
1.620 — 1.660

INSTABILITÉ DE LA CHAÎNE MAGNÉTIQUE LINÉAIRE XY

J. Y. DUBOIS et J. P. CARTON

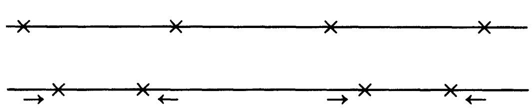
Service de Physique du Solide et de Résonance Magnétique, Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay,
BP 2, 91190 Gif-sur-Yvette, France

(*Reçu le 14 septembre 1973*)

Résumé. — Une chaîne linéaire de spins $\frac{1}{2}$ avec couplage XY est instable par rapport à une déformation qui la sépare en deux sous-réseaux. On démontre que cet effet donne lieu à une transition du second ordre. Cette instabilité, absente dans le modèle d'Ising, est aussi étudiée dans le cas d'un couplage XY anisotrope ; on montre qu'elle apparaît pour une valeur intermédiaire du coefficient d'anisotropie.

Abstract. — A linear spin-$\frac{1}{2}$ chain with XY coupling is unstable with respect to a distortion which splits it into two sub-lattices. This effect is shown to give rise to a second-order phase transition. The instability is also studied in the case of an anisotropic XY coupling; it is shown to appear for an intermediate value of the anisotropy parameter.

1. **Introduction.** — Pincus [1] a montré qu'une chaîne linéaire antiferromagnétique avec couplage XY est instable à 0 K par rapport à une déformation qui la sépare en deux sous-réseaux. Beni et Pincus [2] ont ensuite prouvé par des calculs numériques que cet effet donnait lieu à une transition du second ordre. On se propose ici de démontrer rigoureusement l'existence de cette transition.



(1)

(2)

On étudie d'abord la chaîne dimérisée (2) à température nulle puis à température finie en fonction du déplacement relatif des deux sous-réseaux. On montre ensuite introduisant tous les paramètres d'ordre brisant la symétrie de la chaîne (1) que la symétrie (2) est celle qui apparaît effectivement.

On montre enfin l'influence sur cet effet d'une anisotropie dans le couplage XY : pour une chaîne de caractéristiques données il existe une valeur limite du coefficient d'anisotropie pour laquelle l'instabilité se produit.

2. **Etude de la chaîne dimérisée.** — Soient J et J' les intégrales d'échange respectivement entre sites pair-impair et entre sites impair-pair, $2N$ le nombre total de spins supposé pair. L'hamiltonien de la chaîne (2) s'écrit dans le modèle XY :

$$\mathcal{H} = -J\sum_{i=0}^{N-1}(S^x_{2i}S^x_{2i+1} + S^y_{2i}S^y_{2i+1}) - J'\sum_{i=1}^{N-1}(S^x_{2i-1}S^x_{2i} + S^y_{2i-1}S^y_{2i}) - J'(S^x_{2N-1}S^x_0 + S^y_{2N-1}S^y_0)$$

en supposant la chaîne refermée sur elle-même.

Introduisons suivant la transformation classique de Jordan et Wigner [2] les opérateurs fermions

$$a_j = \left(\prod_{i=0}^{j-1} 2\,S_i^z\right) S_j^+ .$$

On obtient alors pour $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2}\sum_{i=0}^{N-1}(a^+_{2i}a_{2i+1} + a^+_{2i+1}a_{2i}) - \frac{J'}{2}\sum_{i=1}^{N-1}(a^+_{2i-1}a_{2i} + a^+_{2i}a_{2i-1}) + \frac{J'}{2}(a^+_{2N-1}a_0 + a_0^+a_{2N-1})\,\mathcal{T}$$

où l'opérateur $\mathcal{T} = \prod_{i=0}^{2N-1}(2\,S_i^z)$ est une constante du mouvement prenant les valeurs ± 1. On peut donc à l'intérieur de chaque sous-espace propre de $\mathcal{T}$ associé à la valeur propre τ, écrire l'hamiltonien sous la forme

$$\mathcal{H}_\tau = -\frac{J}{2}\sum_{i=0}^{N-1}(a_{2i}^+ a_{2i+1} + a_{2i+1}^+ a_{2i}) - \\ -\frac{J'}{2}\sum_{i=1}^{N}(a_{2i-1}^+ a_{2i} + a_{2i}^+ a_{2i-1})$$

grâce aux conditions aux limites [3]

$$a_{2N} = -\tau a_0 .$$

La maille élémentaire contenant 2 spins, on introduit les transformées de Fourier

$$C_k = N^{-1/2}\sum_j e^{i\times 2jk} a_{2j}, \qquad C'_k = N^{-1/2}\sum_j e^{i(2j+1)k} a_{2j+1}$$

avec

$$-\frac{\pi}{2} < k \leqslant \frac{\pi}{2},$$

ce qui donne :

$$\mathcal{H}_\tau = -\tfrac{1}{2}\sum_k (J\,e^{-ik} + J'\,e^{ik})\,C_k^+ C'_k + hc$$

où k est de la forme :

$$k = \frac{2\pi}{2N}l \qquad \text{pour} \qquad \tau = -1 ;$$

$$k = \frac{\pi}{2N}(2l+1) \qquad \text{pour} \qquad \tau = +1$$

(l entier) (1).

En posant

$$\varepsilon_k\,e^{-i\theta_k} = \tfrac{1}{2}(J\,e^{-ik} + J'\,e^{ik})$$

$$\varepsilon_k = \left|\frac{J+J'}{2}\right|(\cos^2 k + b^2\sin^2 k)^{1/2}$$

où

$$b = \frac{J-J'}{J+J'}$$

puis

$$\alpha_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(C_k + e^{-i\theta_k}C'_k)$$

$$\beta_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(C_k - e^{-i\theta_k}C'_k)$$

on trouve

$$\mathcal{H}_\tau = \sum_k \varepsilon_k(\beta_k^+\beta_k - \alpha_k^+\alpha_k)$$

où α_k et β_k sont aussi des opérateurs de fermions.

On vérifie que l'on a :

$$\mathcal{T} = \exp i\pi\sum_j a_j^+ a_j = \exp i\pi\sum_k(\alpha_k^+\alpha_k + \beta_k^+\beta_k)$$

donc les états propres de $\mathcal{T}$ pour $\tau = +1$ et $\tau = -1$ contiennent un nombre respectivement pair et impair de fermions.

Les états propres de $\mathcal{H}$ sont donc :

— les états propres de $\mathcal{H}_{+1}$ ayant un nombre pair de fermions,

— les états propres de $\mathcal{H}_{-1}$ ayant un nombre impair de fermions.

Si par exemple N est pair l'état fondamental est d'après (2)

$$\left(\prod_k \alpha_k^+\right)|\,0\,\rangle , \qquad k = \frac{\pi}{2N}(2l+1)$$

où $|\,0\,\rangle = |\,+\,+\cdots+\,\rangle$ est l'état de vide des α_k et β_k. L'énergie du fondamental vaut

$$E_0 = -\sum_k \varepsilon_k = -\left|\frac{J+J'}{2}\right|\frac{2N}{2\pi}\times \\ \times\int_{-\pi/2}^{+\pi/2}(\cos^2 k + b^2\sin^2 k)^{1/2}\,dk .$$

Le développement en b de l'intégrale elliptique est :

$$E_0 = -\frac{N}{\pi}|\,J+J'\,|\left[1 + \frac{b^2}{2}\left(\mathrm{Log}\frac{4}{b} - \frac{1}{2}\right)\right] + \cdots .$$

En tenant compte d'un terme d'énergie élastique $2\,NC\eta^2$ où η est le déplacement relatif des 2 sous-réseaux

$$\eta = x_{2j+1} - x_{2j}$$

et du fait que l'on peut écrire en première approximation

$$J - J' = 2\,\lambda\eta$$

on obtient comme énergie libre du système à température nulle :

$$\frac{F_0}{2N} = -\frac{J_0}{\pi} + \eta^2\left[C - \frac{\lambda^2}{2\pi J_0}\left(\mathrm{Log}\frac{4J_0}{\lambda\eta} - \frac{1}{2}\right)\right] + \cdots$$

où

$$J_0 = \left|\frac{J+J'}{2}\right| .$$

La présence du terme η^2 Log η qui l'emporte sur le terme élastique en η^2 montre que la chaîne dimérisée est *toujours* plus stable que la chaîne uniforme à 0 K. C'est précisément le résultat obtenu par Pincus ; notons qu'il est indépendant du signe de J et J'.

Calculons maintenant l'énergie libre à température non nulle : dans la limite où N est grand, la distinction (1) entre les vecteurs **k** n'influe pas sur les propriétés thermodynamiques du système. Alors d'après (2)

$$Z = \operatorname{tr} e^{-\beta H} = \prod_k (1 + e^{-\beta\varepsilon_k})(1 + e^{\beta\varepsilon_k}) = \prod_k \left(2 \operatorname{ch} \frac{\beta\varepsilon_k}{2}\right)^2$$

et

$$\frac{F}{2N} = -\frac{1}{\beta}\operatorname{Log} 2 - \frac{2}{\beta\pi}\int_0^{\pi/2} \operatorname{Log} \operatorname{ch} \times \left[\frac{\beta J_0}{2}\left(\cos^2 k + \frac{\lambda^2}{J_0^2}\eta^2 \sin^2 k\right)^{1/2}\right] dk + C\eta^2 .$$

Calculons $\left.\frac{1}{2N}\frac{dF}{d\eta^2}\right|_{\eta=0}$:

$$\left.\frac{1}{2N}\frac{dF}{d\eta^2}\right|_{\eta=0} = C - \frac{\lambda^2}{2\pi J_0}\int_0^1 \operatorname{th}(\delta u)\sqrt{1-u^2}\,\frac{du}{u}$$

avec

$$u = \cos k , \qquad \delta = \beta J_0/2 .$$

L'intégrale

$$\mathcal{A}(T) = \int_0^1 \operatorname{th}(\delta u)\sqrt{1-u^2}\,\frac{du}{u}$$

décroît de $+\infty$ à 0 lorsque T varie de 0 à $+\infty$. Il existe donc toujours une température de transition T_c définie par

$$C = \frac{\lambda^2}{2\pi J_0}\mathcal{A}(T_c) .$$

On peut calculer T_c en faisant l'hypothèse que celle-ci est grande :

$$\text{si} \quad k_B T_c \gg \frac{J_0}{2} \qquad k_B T_c = \frac{\lambda^2}{16\, C} . \tag{3}$$

Remarquons que F est analytique en η pour $T \neq 0$.

On montre que la transition est du 2e ordre ; en effet le coefficient $\gamma(T)$ du terme en η^4 dans le développement de F est :

$$\gamma(T) = \left.\frac{1}{2}\frac{d}{d\eta^2}\left(\frac{dF}{d\eta^2}\right)\right|_{\eta=0} = \frac{1}{2}\frac{2N\lambda^4}{4\pi J_0^3} \times \int_0^1 \frac{(1-u^2)^{3/2}}{u^3 \operatorname{ch}^2(\delta u)}\left[\frac{1}{2}\operatorname{sh}(2\delta u) - \delta u\right] du \geqslant 0 .$$

Le paramètre d'ordre en fonction de la température est donné (à l'approximation de la théorie de Landau) par

$$\eta^2(T) = \frac{1}{2\gamma(T)}\left[\frac{\lambda^2}{2\pi J_0}\mathcal{A}(T) - C\right]$$

pour $T < T_c$.

3. **Existence de la transition.** — Introduisons la déformation la plus générale de la chaîne uniforme : elle est caractérisée par la suite $\{x_i\}$ où x_i est l'abscisse du spin i par rapport à sa position moyenne, ou mieux, par les composantes de Fourier $\hat{x}_q$. Nous allons montrer que la composante $\hat{x}_q$ apparaît spontanément à une température T_c pour q en bord de zone c'est-à-dire que la chaîne se dimérise.

Partant d'un hamiltonien de la forme

$$\mathcal{H} = -\sum_j J_j (S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y)$$

on aboutit aisément à

$$\mathcal{H} = -\tfrac{1}{2}\sum_j J_j (a_j^+ a_{j+1} + a_{j+1}^+ a_j)$$

puis à

$$\mathcal{H} = -\tfrac{1}{2}\sum_q \hat{J}_q \sum_k [e^{ik} + e^{i(q-k)}]\, b_k^+ b_{k-q}$$

où

$$\hat{J}_q = \frac{1}{2N}\sum_j e^{iqj} J_j \qquad (-\pi < q \leqslant \pi)$$

et où les

$$b_k = \frac{1}{\sqrt{2N}}\sum_j e^{ikj} a_j$$

sont des opérateurs fermions.

Posons

$$\mathcal{H}_0 = -J\sum_k \cos k\, b_k^+ b_k = \sum_k \varepsilon_k^{(0)} b_k^+ b_k$$

$$V = -\tfrac{1}{2}\sum_{q\neq 0} \hat{J}_q \sum_k [e^{ik} + e^{i(q-k)}]\, b_k^+ b_{k-q}$$

$\mathcal{H}_0$ est l'hamiltonien de la chaîne uniforme ; V traduit la déformation de celle-ci que nous supposons faible. Comme précédemment on a :

$$J_i = J - \lambda(x_{i+1} - x_i)$$

$$\hat{J}_q = -\lambda(e^{-iq} - 1)\,\hat{x}_q \qquad \text{pour} \qquad q \neq 0$$

avec

$$\hat{x}_q = \frac{1}{2N}\sum_j e^{iqj} x_j .$$

Dans cette étude on néglige la possibilité de dilatation de la chaîne : J est donc pris indépendant de la température.

Ici l'énergie élastique vaut

$$E_{el} = \sum_j C(x_{j+1} - x_j)^2 = 4NC\sum_{q\neq 0}(1 - \cos q)\,|\hat{x}_q|^2 .$$

Nous allons développer le terme d'énergie libre magnétique

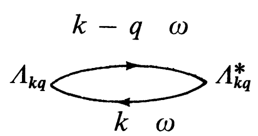
$$F_{\mathrm{m}} = -\frac{1}{\beta}\,\mathrm{Log\,tr}\;\mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}} = -\frac{1}{\beta}\,\mathrm{Log\,tr}\;\mathrm{e}^{-\beta(\mathcal{H}_0+V)}$$

au second ordre en V.

V est de la forme

$$V = \sum_{qk} \Lambda_{kq}\, b_k^+\, b_{k-q}$$

c'est-à-dire analogue à un champ extérieur agissant sur les fermions. Si F_0 est l'énergie libre de la chaîne uniforme, l'écart $F_{\mathrm{m}} - F_0$ est donnée par le diagramme [4]



(la condition $q \neq 0$ élimine le diagramme du 1^{er} ordre).

On a alors :

$$F = F_0 + \\ + \sum_{q\neq 0} 2(1-\cos q)\left[2\,NC - \frac{\lambda^2}{\beta} f(\beta, q)\right] |\,\hat{x}_q\,|^2$$

où

$$f(\beta, q) = -\frac{1}{2}\sum_k \sum_{\omega_n} \frac{\cos^2(k - q/2)}{(i\omega_n - \varepsilon_k^{(0)})\,(i\omega_n - \varepsilon_{k-q}^{(0)})}$$

avec $\omega_n = (2\,n+1)\,\pi/\beta$ (fréquences de Matsubara).

Dans la théorie de Landau une transition se produit à T_{c}, si, pour une valeur de q,

$$g(T, q) = 2\,NC - \frac{\lambda^2}{\beta} f(\beta, q) > 0 \quad \text{pour} \quad T > T_{\mathrm{c}}$$

et si cette quantité change de signe à T_{c}.

En posant $z = \exp i(k - q/2)$ il vient :

$$f(\beta, q) = \sum_{\omega' \geqslant 0} -\frac{1}{J^2}\frac{N}{\pi}\,\mathrm{Re} \times \\ \times \int -\, i\,\frac{(1+z^2)^2\,\mathrm{d}z}{z(z^2 - 2\,i\omega'\,\mathrm{e}^{iq/2}\,z + \mathrm{e}^{iq})\,(z^2 - 2\,i\omega'\,\mathrm{e}^{-iq/2}\,z + \mathrm{e}^{-iq})}$$

$$\omega' = \frac{\omega}{J}$$

où l'intégrale est étendue au cercle unité : celle-ci est calculée par la méthode des résidus :

$$f(\beta, q) = \frac{2\,N}{J^2}\sum_{\omega'\geqslant 0} \times \\ \times \left[\frac{\omega'}{\sqrt{1+\omega'^2}} - 1 + \frac{\omega'}{\sqrt{1+\omega'^2}(\omega'^2 + \cos^2 q/2)}\right].$$

Cette quantité, à température fixée, est maximale en $q = \pi$.

Quand $\beta \to 0$, $\frac{1}{\beta} f(\beta, q) \to 0$; d'autre part quand $\beta \to \infty$

$$f(\beta, \pi) \sim \frac{2\,N}{J^2}\frac{\beta J}{2\,\pi}\int_{2\pi/\beta J}^{\infty}\left(\frac{\sqrt{1+\omega'^2}}{\omega'} - 1\right)\mathrm{d}\omega'$$

donc $\frac{1}{\beta} f(\beta, \pi) \to \infty$.

Par conséquent il existe une température T_{c} telle que $g(T_{\mathrm{c}}, \pi) = 0$.

Lorsque la température décroît, le premier coefficient $g(T, q)$ qui s'annule correspond donc à $q = \pi$: cqfd.

On peut calculer T_{c} dans les 2 cas :

$$k_{\mathrm{B}}\,T_{\mathrm{c}} \ll \frac{J^2\,C}{\lambda} : \quad k_{\mathrm{B}}\,T_{\mathrm{c}} = J \exp -\frac{2\,\pi JC}{\lambda^2} ;$$

$$k_{\mathrm{B}}\,T_{\mathrm{c}} \gg \frac{J}{2} : \quad k_{\mathrm{B}}\,T_{\mathrm{c}} = \frac{\lambda^2}{16\,C}$$

(on retrouve (3)).

Remarque 1. — On sait qu'un système à une dimension où les interactions sont à courte portée ne peut présenter de transition à température non nulle. Néanmoins dans un cristal réel les atomes ou ions sont toujours couplés élastiquement dans les trois dimensions. Mais il existe également de tels systèmes réels dans lesquels on peut considérer que les interactions magnétiques ne couplent que les atomes d'une même chaîne linéaire. La transition dont il est question ici concerne des systèmes de ce type. La théorie de style Landau qui vient d'être faite est qualitativement correcte. En effet soit $x_{\alpha n}$ la position d'un atome du crystal, α étant un indice de chaîne et n l'indice de l'atome sur la chaîne, et soient $\eta_{\alpha n} = (-1)^n\,x_{\alpha n}$ les paramètres d'ordre ; l'énergie libre du cristal réel $F_{\mathrm{crist}}(\{\,\eta_{\alpha n}\,\})$ s'écrit alors :

$$F_{\mathrm{crist}}(\{\,\eta_{\alpha n}\,\}) = \sum_{\alpha} F_{\mathrm{ch}}(\{\,\eta_{\alpha n}\,\}) + \tfrac{1}{2}\,D\sum_{\substack{n\\ \alpha\beta}}(\eta_{\alpha n} - \eta_{\beta n})^2$$

F_{ch} représente l'énergie libre d'une chaîne calculée précédemment ; le deuxième terme est l'énergie d'interaction élastique entre chaînes voisines (on a découplé les variables de déplacement y et z des variables x ce qui ne modifie pas fondamentalement le problème).

En toute rigueur, l'énergie libre $F_{\mathrm{crist}}(\{\,\eta_{\alpha n}\,\})$ donne en fait la loi de probabilité des variables aléatoires $\eta_{\alpha n}$ dont les fluctuations devraient être prises en compte ; cette loi est :

$$\mathrm{Cte} \times \exp -\beta F_{\mathrm{crist}}(\{\,\eta_{\alpha n}\,\}) .$$

Démonstration : la valeur moyenne d'une grandeur $f(\{\,\eta_{\alpha n}\,\})$ est :

$$\langle f(\eta_{\alpha n})\rangle = \\ = \mathrm{tr}\,f(\eta_{\alpha n}) \exp -\beta\mathcal{H}(\mathbf{S}_{\alpha n}, \eta_{\alpha n})/\mathrm{tr} \exp -\beta\mathcal{H}(\mathbf{S}_{\alpha n}, \eta_{\alpha n})$$

où tr désigne la trace sur tous les spins et tous les $\eta_{\alpha n}$, $\mathcal{H}$ l'hamiltonien total (inculant toutes les interactions élastiques)

$$\langle f(\eta_{\alpha n}) \rangle = \int [\mathrm{d}\eta_{\alpha n}]\, f(\{\eta_{\alpha n}\}) \operatorname*{tr}_{\text{spins}} \times \exp - \beta\mathcal{H}(\mathbf{S}_{\alpha n}, \eta_{\alpha n}) \Big/ \int [\mathrm{d}\eta_{\alpha n}] \operatorname*{tr}_{\text{spins}} \times \exp - \beta\mathcal{H}(\mathbf{S}_{\alpha n}, \eta_{\alpha n})$$

or précisément dans ce qui précède :

$$\operatorname*{tr}_{\text{spins}} \exp - \beta\mathcal{H}(\mathbf{S}_{\alpha n}, \eta_{\alpha n}) = \exp - \beta F_{\text{crist}}(\eta_{\alpha n}) .$$

Si dans la formule (4) on développe au voisinage de $q = 0$, on obtient :

$$F_{\text{ch}}(\{\hat{\eta}_{\alpha q}\}) \propto \sum_q (r_0 + q^2) \mid \hat{\eta}_{\alpha q} \mid^2 + \cdots$$

où r_0 reste fini et s'annule à T_c. En introduisant les transformées de Fourier tridimensionnelles on met alors l'énergie libre sous la forme :

$$F_{\text{crist}} \propto \sum_{\mathbf{q}} (r_0 + q_x^2 + \rho q_y^2 + \rho q_z^2) \mid \hat{\eta}_{\mathbf{q}} \mid^2 + \cdots$$

qui correspond typiquement à $n = 1$, $d = 3$ selon la notation de Wilson (n : nombre de composantes du paramètre d'ordre, d = dimension du réseau) et assure l'existence de la transition.

Remarque 2. — Le modèle étudié est sensiblement différent du modèle d'Ising compressible de Baker et Essam [6]. En effet dans celui-ci les interactions magnétiques sont à trois dimensions mais surtout la forme choisie pour les interactions élastiques et telle qu'en l'absence des interactions magnétiques les différentes chaînes du système se découplent.

Notons en particulier ici, à la différence du modèle B-E, *l'absence d'ordre magnétique à longue distance.* En effet l'opérateur densité est

$$\rho \propto \exp - \frac{1}{T}\left[\sum_\alpha \mathcal{H}_{\text{ch}}(\mathbf{S}_{\alpha n}, \eta_{\alpha n}) + \sum_{\alpha\beta} \Phi(\eta_{\alpha n}, \eta_{\beta n})\right]$$

(l'hamiltonien $\mathcal{H}_{\text{ch}}$ contient tous les termes d'énergie associés à une chaîne α, Φ est l'interaction élastique entre chaînes premières voisines). Soit A une observable fonction des spins de la seule chaîne α. Dans le calcul de la valeur moyenne $\langle A \rangle$ on peut d'abord effectuer la trace sur les spins des chaînes $\beta \neq \alpha$ (les hamiltoniens $\mathcal{H}_{\text{ch}}$ associés à des chaînes différentes commutent), puis la trace sur les $\eta_{\beta n}$ ($\beta \neq \alpha$). Cette trace est une fonction $Q(\{\eta_{\alpha n}\})$ des paramètres d'ordre de la chaîne α. Alors :

$$\langle A \rangle \propto \int [\mathrm{d}\eta_{\alpha n}]\, Q(\{\eta_{\alpha n}\}) \operatorname*{tr}_{\text{spins}\,\alpha} \times \left[A \exp - \frac{1}{T}\mathcal{H}_{\text{ch}}(\mathbf{S}_{\alpha n}, \eta_{\alpha n})\right].$$

Le calcul de $\operatorname*{tr}_{\text{spins}\,\alpha} A \exp - \frac{1}{T}\mathcal{H}_{\text{ch}}(S_{\alpha n}, \eta_{\alpha n})$ ne fait apparaître aucun ordre magnétique puisque l'hamiltonien utilisé est celui d'une chaîne linéaire avec interactions entre premiers voisins, et cela quelle que soit la configuration $\{\eta_{\alpha n}\}$. Cette absence d'ordre subsiste en moyennant sur les $\eta_{\alpha n}$ de la chaîne α avec le poids $Q(\{\eta_{\alpha n}\})$.

4. Influence d'une anisotropie de couplage. — Nous avons vu que le modèle XY est instable à basse température. En revanche le modèle d'Ising uniforme est toujours stable puisque le niveau du fondamental de la chaîne dimérisée est :

$$E_0 = - N \mid J + J' \mid_4 .$$

Il est intéressant de chercher le coefficient γ_L limite d'anisotropie pour lequel apparaît l'instabilité. Soit donc le modèle XY anisotrope dont l'hamiltonien s'écrit [3] :

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = &-J \sum_{i=0}^{N-1} [(1+\gamma) S_{2i}^x S_{2i+1}^x + (1-\gamma) S_{2i}^y S_{2i+1}^y] - \\ &-J' \sum_{i=1}^{N-1} [(1+\gamma) S_{2i-1}^x S_{2i}^x + (1-\gamma) S_{2i-1}^y S_{2i}^y] \\ &-J'[(1+\gamma) S_{2N-1}^x S_0^x + (1-\gamma) S_{2N-1}^y S_0^y] \\ &(-1 \leqslant \gamma \leqslant +1) .\end{aligned}$$

On alors $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2$, avec :

$$\mathcal{H}_1 = - \frac{J}{2} \sum_{i=0}^{N-1} (a_{2i+1}^+ a_{2i} + a_{2i}^+ a_{2i+1}) - \frac{J'}{2} \sum_{i=1}^{N} (a_{2i-1}^+ a_{2i} + a_{2i}^+ a_{2i-1})$$

$$\mathcal{H}_2 = - \gamma \frac{J}{2} \sum_{i=0}^{N-1} (a_{2i}^+ a_{2i+1}^+ + a_{2i+1} a_{2i}) - \gamma \frac{J'}{2} \sum_{i=1}^{N} (a_{2i-1}^+ a_{2i}^+ + a_{2i} a_{2i-1})$$

puis, après transformation de Fourier (voir § 2)

$$\mathcal{H}_1 = - \tfrac{1}{2} \sum_k (J \,\mathrm{e}^{-ik} + J' \,\mathrm{e}^{ik})\, C_k^+ C_k' + hc$$

$$\mathcal{H}_2 = - \frac{\gamma}{2} \sum_k (J \,\mathrm{e}^{-ik} - J' \,\mathrm{e}^{ik})\, C_k' C_{-k} + hc .$$

Posons alors

$$\varepsilon_k' \,\mathrm{e}^{i\varphi_k'} = \frac{J}{2}(1 + \gamma)\,\mathrm{e}^{ik} + \frac{J'}{2}(1 - \gamma)\,\mathrm{e}^{-ik}$$

$$\varepsilon_k'' \,\mathrm{e}^{i\varphi_k''} = \frac{J}{2}(1 - \gamma)\,\mathrm{e}^{ik} + \frac{J'}{2}(1 + \gamma)\,\mathrm{e}^{-ik}$$

et

$$u_k = \tfrac{1}{2}[\mathrm{e}^{-i\varphi_k'/2}(C_k' + C_{-k}'^+) - \mathrm{e}^{i\varphi_k'/2}(C_{-k}^+ - C_k)]$$

$$v_k = \tfrac{1}{2}[\mathrm{e}^{-i\varphi_k''/2}(C_{-k}'^+ - C_k') - \mathrm{e}^{i\varphi_k''/2}(C_{-k}^+ + C_k)]$$

On trouve :

$$\mathcal{H} = -\tfrac{1}{2}\sum_k (\varepsilon'_k + \varepsilon''_k) + \sum_k \varepsilon'_k u_k^+ u_k + \sum_k \varepsilon''_k v_k^+ v_k$$

où

$$\varepsilon'_k = \left|\frac{J+J'}{2}\right| (1+\gamma b) \left[\cos^2 k + \left(\frac{b+\gamma}{1+\gamma b}\right)^2 \sin^2 k\right]^{1/2}$$

$$\varepsilon''_k = \left|\frac{J+J'}{2}\right| (1-\gamma b) \left[\cos^2 k + \left(\frac{b-\gamma}{1-\gamma b}\right)^2 \sin^2 k\right]^{1/2}$$

$\left(\text{comme précédemment } b = \dfrac{J-J'}{J+J'}\right)$.

Notons que dans ces formules b et γ jouent des rôles symétriques. Le niveau fondamental est :

$$\begin{aligned} E_0 &= -\frac{1}{2}\sum_k (\varepsilon'_k + \varepsilon''_k) \\ &= -\frac{2N}{2\pi} J_0 \int_0^{\pi/2} [(1+\gamma b)(1 - d^2 \sin^2 k)^{1/2} + \\ &\qquad + (1-\gamma b)(1 - d'^2 \sin^2 k)]\, \mathrm{d}k \end{aligned}$$

avec

$$d^2 = 1 - \left(\frac{b+\gamma}{1+\gamma b}\right)^2 \quad \text{et} \quad d'^2 = 1 - \left(\frac{b-\gamma}{1-\gamma b}\right)^2 .$$

En développant en $\eta = x_{2i+1} - x_{2i}$, on définit $K(\gamma)$ par :

$$\frac{F_0}{2N} = \frac{E_0 + E_{\mathrm{el}}}{2N} = \frac{E_0(\eta = 0)}{2N} + \left[C - K(\gamma)\frac{\lambda^2}{J_0}\right]\eta^2 .$$

On peut étudier la fonction K au voisinage de $\gamma = 0$ (modèle XY) et de $\gamma = 1$ (modèle d'Ising) :

$$\gamma \to 0 \qquad K(\gamma) \sim -\frac{1}{\pi}\mathrm{Log}\,\gamma \to +\infty$$

$$\gamma \to 1 \qquad K(\gamma) \sim \frac{1-\gamma^2}{2} \quad \to 0 .$$

On retrouve le fait que le modèle d'Ising est toujours stable, et le modèle XY isotrope toujours instable. Remarquons que F_0 est analytique en η pour $\gamma \neq 0$.

L'instabilité n'a lieu que pour $\gamma < \gamma_L$ où γ_L est donné par :

$$C = K(\gamma_L)\frac{\lambda^2}{J_0} .$$

Notons que l'instabilité n'exigeant pas un couplage isotrope, elle peut être mise plus aisément en évidence expérimentalement.

Dans cet article la transition a été principalement étudiée dans le cadre d'une théorie de Landau. Les fluctuations n'ont en effet pas été prises en considération comme mentionné dans la remarque 1. Par ailleurs il est intéressant d'étudier la dimérisation d'une chaîne d'Heisenberg anisotrope, en fonction en particulier des paramètres d'anisotropie. Ces deux questions feront l'objet de publications ultérieures.

Nous tenons à exprimer nos remerciements à MM. Sarma et Boccara du Service de Physique du Solide et de Résonance Magnétique, pour les conseils et suggestions prodigués au cours de cette étude.

Bibliographie

[1] PINCUS, P., *Solid State Commun.* **22** (1971) 1971.
[2] BENI, G., PINCUS, P., *J. Chem. Phys.* **57** (1972) 3531.
[3] JORDAN, P., WIGNER, E., *Z. Phys.* **47** (1928) 631.
[4] LIEB, E., SCHULTZ, MATTIS, D., *Ann. Phys.* (NY) **16** (1961) 407.
[5] ABRIKOSOV, GORKOV, DZYALOSHINSKI : *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Prentice Hall) p. 120.
[6] BAKER, ESSAM, *Phys. Rev. Lett.* **24** (1970) 447. Proceedings of 1970 Grenoble.