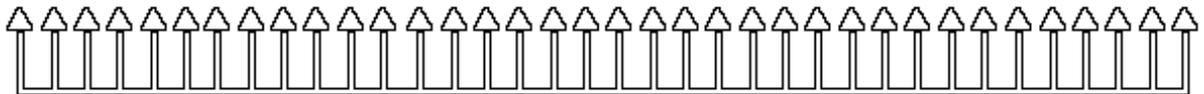


# Étude d'une Chaîne de Spin 1 Antiferromagnétique

utilisation de la méthode DMRG

Eric POLIZZI\*

juin 1997



---

\*dans le cadre du stage de DEA, Physique de la Matière, de l'UPS de TOULOUSE.

à mon grand père, Alfred Polizzi.

## Remerciements

Travail, synonyme de plaisir, c'est possible!, je remercie mon maître de stage, Erik Sørensen pour sa disponibilité, sa gentillesse, ses précieux conseils... Tout en me communiquant son savoir faire (j'ai appris énormément de choses), il a réussi à susciter chez moi un grand intérêt, une passion même, pour cette partie de la Physique que l'on appelle matière condensée. Encore Merci!

J'ai effectué mon stage au laboratoire de Physique Théorique de l'IRSAMC de Toulouse, dans une ambiance très agréable.

Je remercie Frédéric Mila pour son aide, et pour la confiance qu'il me porte.

Je remercie Bertrand Georgeot *for his help in English to fill up my European application form.*

J'aimerais terminer en exprimant mon bonheur d'avoir pu réaliser ce DEA de Physique, option Théorique. Car la Physique a toujours été pour moi une passion, et le diplôme un but à atteindre. Cependant il m'est arrivé de douter, « une route bien longue à parcourir, une arrivée incertaine... » . Je dois beaucoup à Armelle Barelli pour m'avoir accepté en stage, dans le même laboratoire, tout au long de l'année 95-96, et qui a su m'aider dans des moment difficiles. Je voudrai qu'elle trouve ici l'expression de ma plus grande gratitude.



# Table des matières

Annexe A . . . . .	37
Annexe B . . . . .	39
Références . . . . .	41
<b>I Le Modèle</b>	<b>7</b>
1 Introduction : les Systèmes Antiferromagnétiques	7
2 Les Chaînes de Spin Linéaire	8
2.1 Spin $\frac{1}{2}$ . . . . .	8
2.2 Spin 1 et Terme Biquadratique . . . . .	10
3 Description de l'Étude	11
3.1 L'intérêt du modèle . . . . .	11
3.2 le gap de Haldane . . . . .	11
3.3 Spins $\frac{1}{2}$ effectifs . . . . .	12
3.4 Quelques difficultés . . . . .	15
<b>II La Méthode</b>	<b>17</b>
1 Présentation Générale	17
1.1 Introduction : La méthode D.M.R.G . . . . .	17
1.2 L'Algorithme D.M.R.G . . . . .	17
1.3 Remarques . . . . .	19
2 Gros Plan sur les Calculs	20
2.1 L'Hamiltonien de départ . . . . .	20
2.2 Méthodes de diagonalisations . . . . .	21
2.3 Calcul de l'aimantation . . . . .	21
2.4 Procédure de réflexion . . . . .	22
2.5 Le nouvel Hamiltonien . . . . .	23
<b>III Les Résultats</b>	<b>25</b>
1 Efficacité de la Méthode D.M.R.G . . . . .	25
2 Le Gap de Haldane . . . . .	26
3 L'Aimantation du Premier Site . . . . .	30
4 Perspectives . . . . .	35



# Première partie

## Le Modèle

« ... sans un modèle absolument précis, la pensée elle-même devient imprécise, et les conséquences qui sont déduites du modèle deviennent ambiguës. »  
E. Schrödinger

### 1 Introduction : les Systèmes Antiferromagnétiques

La nature met à notre disposition divers types de matériaux renfermant des richesses de propriétés<sup>1</sup>. Afin de mettre en évidence ces propriétés, on peut s'intéresser à la susceptibilité magnétique  $\chi$  de ces matériaux. La description des couplages magnétiques peut se faire par l'intermédiaire de l'Hamiltonien d'Heisenberg suivant :

$$\mathcal{H} = \sum_{(i,j),\alpha=x,y,z} J_{ij}^\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha \quad (1)$$

où  $(i, j)$  indique une somme sur les paires de site,  $S_i$  le moment magnétique de spin au site  $i$ , et  $J_{ij}^\alpha$  le couplage magnétique entre les sites  $i$  et  $j$  dans la direction  $\alpha$ .

Si le couplage est négatif on parle de couplage ferromagnétique (les spins tendent à s'aligner dans la même direction), à l'opposé s'il est positif on le dit antiferromagnétique (les spins tendent à s'aligner dans des directions opposées). Comme je le mentionnais ci-dessus, la susceptibilité magnétique peut mettre en évidence ces propriétés :  $\chi$  diverge à  $T > 0$  pour un système ferromagnétique, et à basse température pour un matériau quelconque. Cependant on peut observer sur certains matériaux que  $\chi$  ne diverge plus à basse température, comme si quelque chose empêchait les spins de se polariser. Ainsi, pour expliquer ce phénomène Néel suppose un ordre antiferromagnétique. On devrait plutôt parler de quasi-ordre, car les fluctuations quantiques sont importantes à basse dimensionnalité.

A l'exception de quelques modèles solubles par l'Ansatz de Bethe <sup>2</sup> (dès les années 30), on ne sait pas déterminer analytiquement et exactement l'état fondamental d'un système antiferromagnétique.

Avant de débiter notre étude, on va se donner certaines hypothèses de départ :

---

<sup>1</sup>c'est d'ailleurs ce qui la rend passionnante

<sup>2</sup>nous aurons l'occasion d'y revenir

- On posera  $J^x = J^y = J^z = J = 1$  et on parlera de couplage isotrope antiferromagnétique.
- On se limitera à des couplages entre premiers voisins.
- On se situera dans un espace de dimension 1, transformant le système en chaîne de spin linéaire.
- La longueur de la chaîne ( c'est à dire le nombre de spin ) , sera finie et égale à  $L$ .
- On s'intéressera au comportement à  $T = 0$ .
- Enfin on considérera des conditions aux bords ouvertes.

L'Hamiltonien (1) s'écrira tout simplement dans le cas d'une chaîne de spin linéaire finie avec des conditions aux bords ouvertes :

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{L-1} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \quad (2)$$

## 2 Les Chaînes de Spin Linéaire

### 2.1 Spin $\frac{1}{2}$

Les Chaînes de spin  $\frac{1}{2}$  sont entièrement décrites par l'Hamiltonien (2), et sont solubles directement par le modèle de l'Ansatz de Bethe. Celui-ci nous donne pour une chaîne de longueur infinie, l'énergie par site suivante :

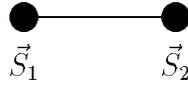
$$\frac{E}{L} = \ln(2) - \frac{1}{4}$$

Bien entendu nous pouvons connaître avec exactitude l'énergie par site pour une chaîne de longueur finie avec des conditions aux bords ouvertes ( voir Annexe A). On se sert d'ailleurs le plus souvent de ces résultats pour souligner l'efficacité des approximations des méthodes numériques que l'on souhaite employer pour résoudre de tels systèmes. Les résolutions directes, par l'intermédiaire de diagonalisation exacte, ne sont efficaces que pour un nombre de sites très petit (16,18), la dimension de l'espace de Hilbert mis en jeu augmente d'un facteur 2 à chaque nouveau site, et la puissance de calcul nécessaire pour mener à bien cette résolution exacte met aujourd'hui à défaut les plus puissantes stations de calculs. D'où la nécessité ici de développer des approximations de calculs toujours plus efficaces<sup>3</sup>.

Nous allons maintenant effectuer le calcul trivial d'une chaîne de 2 spins  $\frac{1}{2}$ . Calcul qui a pour but de nous familiariser avec certaines notions de physique élémentaire, et dont nous nous servirons par la suite en étudiant les excitations aux bords de la chaîne de spin 1. On considère donc le système suivant :

---

<sup>3</sup>voir dans la deuxième partie la méthode DMRG



Nous appellerons  $H = \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$  l'Hamiltonien décrivant un tel système. Afin de trouver les différentes énergies du système, nous pouvons, soit projeter sur la base d'état propre  $S_1, S_2$  et diagonaliser la matrice obtenue, soit par astuce de calcul ( pour de très petits systèmes) trouver directement les énergies dans la base diagonale.

- Chaque spin  $S$  comporte 2 états  $|\uparrow\rangle$  ou  $|\downarrow\rangle$ , car  $S_i^z = \pm \frac{1}{2}$  ce qui nous donne un espace de Hilbert de dimension 4 ( $2^L$  dans le cas général de  $L$  sites).

La Matrice de  $H$  dans la base  $|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle^4$  se met sous la forme Hermitienne suivante :

$$H = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Après diagonalisation, on trouve comme valeurs propres dans la nouvelle base  $|\psi_i\rangle$   $1/4$  triplement dégénéré et  $-3/4$  satisfaisant l'équation  $H |\psi\rangle = E |\psi\rangle$ . Cette nouvelle base peut aussi être retrouvée à l'aide de la méthode de couplage de moment cinétique <sup>5</sup>.

- Un procédé plus astucieux nous permet de trouver directement les énergies propres. Pour cela il nous faut considérer  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$  et  $S(S+1)$  comme la valeur propre de l'opérateur  $\vec{S}^2$  (on pose  $\hbar = 1$ ). A noter aussi que la valeur propre de l'opérateur  $\vec{S}_i^2$  vaut  $S_i(S_i+1)$ . Dans le cas des spins  $\frac{1}{2}$ ,  $S_i = 1/2$  et  $S = 0, 1$  (voir Annexe B). De plus les énergies cherchées seront dégénérées  $2S+1$  fois. Ici on est en présence d'un singulet pour  $S = 0$  et d'un triplet pour  $S = 1$ . Regardons en détail le calcul :

$$\begin{aligned} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 &= \frac{1}{2} [(\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 - S_1^2 - S_2^2] \\ &= \frac{1}{2} [(\vec{S})^2 - \frac{3}{2}] \end{aligned}$$

On trouve donc bien  $-3/4$  pour le singulet et  $1/4$  pour le triplet. Soit  $S^z$  le nombre quantique associé à l'opérateur  $\mathbf{S}^z$ . Dans le cas général l'opérateur  $S^z$  ne peut prendre que les valeurs  $-S \leq S^z \leq S$ , donc pour le cas du singulet  $S^z = 0$  et pour le triplet  $S^z = -1, 0, 1$ . Comme le montre le schéma ci-après, le singulet représente dans le spectre de l'énergie, le fondamental, tandis que le triplet représente le premier niveau excité.

<sup>4</sup>La base est écrite dans un ordre arbitraire, ordre que nous respecterons tout au long de cette étude (voir Annexe B)

<sup>5</sup>décrite dans le livre de C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë « Mécanique Quantique II »

$$\begin{array}{l}
S = 1 \quad E = \frac{1}{4} \quad \overline{S^z = -1} \quad \overline{S^z = 0} \quad \overline{S^z = 1} \\
S = 0 \quad E = -\frac{3}{4} \quad \overline{S^z = 0}
\end{array}$$

**Remarque :** cette remarque va nous permettre de rentrer dans le vif du sujet. Il se trouve que dans le cas d'une chaîne de spin  $\frac{1}{2}$  ouverte, l'Hamiltonien (2) peut être considéré comme de forme générale. C'est à dire que des termes biquadratiques du type  $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})^2$ , ou d'ordres supérieurs, peuvent s'interpréter en fonction du terme  $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})$  (que l'on pose égal à  $H = \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$  pour alléger les écritures). Un calcul élémentaire nous donne :

$$H^2 = \frac{3I}{16} - \frac{H}{2}$$

où  $I$  représente la matrice identité (c'est juste une constante du problème sans conséquence). Évidemment les termes  $H^3, H^4, \dots$  s'interprètent de la même manière seulement en fonction de  $H$  et de  $I$ . On verra que dans le cas de spin 1, le terme biquadratique doit être pris en compte.

## 2.2 Spin 1 et Terme Biquadratique

Dans le cas de spin 1, le nombre d'état par site est égal à 3, soit  $S^z = 1, 0, -1$ . Nous noterons ces états  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$  et les calculs s'effectueront dans un espace de Hilbert de dimension  $3^L$  dans le cas de  $L$  sites. Si nous conservons les mêmes notations que dans la section précédente,  $H$ , l'Hamiltonien pour 2 sites, est cette fois-ci de dimension 9. On écrit la base des états  $S_1, S_2$  suivant l'ordre arbitraire suivant (*voir* Annexe B) :

$$|11\rangle, |21\rangle, |31\rangle, |12\rangle, |22\rangle, |32\rangle, |13\rangle, |23\rangle, |33\rangle$$

La matrice de  $H$  prend donc la forme :

$$H = \left( \begin{array}{ccc|ccc|ccc}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
\end{array} \right)$$

Contrairement au cas des spins  $\frac{1}{2}$ ,  $H^2$  ne peut s'exprimer seulement en fonction de  $H$  et  $I$ . Cependant les termes d'ordres supérieurs à 2 s'expriment en fonction de  $I, H$  et  $H^2$ . On peut d'ailleurs facilement à partir de  $H$  vérifier que :

$$H^3 = -2H^2 + H + 2I$$

L'Hamiltonien pour une chaîne de spin 1 ouverte ne possède plus la forme générale (2), mais s'écrit maintenant :

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{L-1} [(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}) - \beta(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})^2] \quad (3)$$

où le coefficient  $\beta$ , nous servira de paramètre de contrôle de l'influence du terme biquadratique sur  $\mathcal{H}$  [voir Ref.1-2-3-4].

Jusqu'à présent, nous avons évoqué certaines notions de base qui nous serviront de point de départ pour tout l'exposé qui suivra.

## 3 Description de l'Étude

### 3.1 L'intérêt du modèle

Notre étude concernera les propriétés de la chaîne de spin 1 ouverte et finie décrite par (3). Nous allons chercher à mettre en évidence outre le célèbre gap de Haldane, plusieurs autres caractéristiques intéressantes. Ce qui nous importe en particulier, c'est l'analyse des excitations aux bords de la chaîne, c'est à dire la valeur des excitations aux sites 1 et  $L$ , où nous verrons apparaître des spins  $\frac{1}{2}$  effectifs sur chaque bord. Cette étude sera d'autant plus rigoureuse que les méthodes numériques seront efficaces<sup>6</sup>. Ainsi nous ne serons plus limité à quelques diagonalisations exactes, synonyme de petits systèmes, [voir Ref.3] et nous verrons ce qui peut se passer pour de plus grands systèmes et conforter nos résultats.

### 3.2 le gap de Haldane

De nombreuses études ont été menées au sujet du gap de Haldane [voir Ref.3-4-5-6-7-9]. D'après les prédictions de Haldane les chaînes de spin 1 possèdent des propriétés radicalement différentes des chaînes de spin  $\frac{1}{2}$ . Si nous prenons une chaîne de spin  $S$ ,  $S$  entier, il existe un gap dans le spectre d'énergie entre le niveau fondamental du système et les tout premiers niveaux excités. Ainsi, dans la limite des grands systèmes, limite thermodynamique, le gap de Haldane pour les spins 1 est remarquable contrairement au spin demi-entier où l'on voit apparaître un continuum dans le spectre d'énergie à partir du niveau fondamental synonyme d'une absence de gap.

Les systèmes décrits à l'aide de l'Hamiltonien (3) ne sont solubles par l'Ansatz de Bethe (en énergie) que pour des valeurs bien particulières de  $\beta$ , comme  $\beta = -1$  ou  $1$ , mais ces modèles ne présentent pas de gap alors que dans la nature nous pouvons trouver

---

<sup>6</sup>voir Section 2 la méthode DMRG

des composés présentant un gap : ce qui rend l'étude du gap de Haldane en fonction de la valeur de  $\beta$  pertinente. Pertinente, car les composés qui présentent un gap sont décrits par un Hamiltonien de type (2), où la valeur de  $\beta = 0$  (notons que cet Hamiltonien peut être anisotrope), et l'on peut se persuader de l'importance de pouvoir comprendre le passage d'un point soluble de type  $\beta = 1$  ou  $-1$ , vers un point physique du type  $\beta = 0$ .

Pour  $\beta = 1$  ou  $-1$ , le gap de Haldane est nul et la longueur de corrélation infinie, c'est la signature d'une transition de phase (on ne développera pas cet aspect dans cet exposé). Nous appellerons le domaine où  $-1 < \beta < 1$ , la phase de Haldane [voir Ref.4].

Il convient de noter que la différence en énergie entre le niveau fondamental et le premier niveau excité décroît exponentiellement avec la longueur de la chaîne  $L$ , d'où nous appellerons gap de Haldane la différence d'énergie entre le second et le premier niveau excité.

### 3.3 Spins $\frac{1}{2}$ effectifs

On va s'intéresser aux excitations aux bords de la chaîne, c'est à dire aux excitations aux sites 1 et  $L$  [voir Ref.8-9]. Dans la suite de l'étude on considérera la chaîne constituée de  $L$  sites ( $L$  pair). Par symétrie du problème on calculera uniquement la valeur de l'excitation (l'aimantation) au site 1 : soit  $\langle S_1^z \rangle$ ;

Essayons d'interpréter le modèle : l'aimantation pour les sites qui se situent au bord de chaîne est maximale et décroît exponentiellement jusqu'au milieu de la chaîne (voir Fig.1 et Fig.2). Ainsi pour un nombre de sites  $L$  suffisamment grand, l'aimantation du système se concentre sur les bords de la chaîne, et le 'corps' de la chaîne possède une aimantation nulle. Aux bords de la chaîne de spin 1 ouverte on voit apparaître des spins  $\frac{1}{2}$  effectifs. Des observations sur certains systèmes réel physique tel que  $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2ClO_4$  (NENP), utilisant des techniques de résonances magnétiques, ont confirmé ces résultats.

Théoriquement, on choisira de travailler dans une base de  $S^z$  où la valeur du spin total  $S_{tot}^z = 1$  ( $= \sum \langle S_i^z \rangle$ ), l'état fondamental dans lequel on se retrouve est un triplet et cette contrainte a pour effet de polariser les spins à chaque bord de la chaîne. On réalise des spins  $\frac{1}{2}$  effectifs. Nous ferons tout naturellement une analogie avec l'étude du couplage de 2 spins  $\frac{1}{2}$  (voir section 2.1).

Une étude concernant une chaîne de spin 1 décrite par un Hamiltonien de type (2) ( $\beta = 0$ ) avait déjà été menée et l'on trouvait que  $\langle S_1^z \rangle \simeq 0.532\dots$ , de cette façon on pouvait conclure qu'une chaîne de spin 1, avec la contrainte  $S_{tot}^z = 1$ , pourrait s'identifier au couplage de 2 spins  $\frac{1}{2}$  effectifs. On met en évidence ainsi la pertinence de l'étude d'une chaîne de spin 1 par l'intermédiaire d'un Hamiltonien de type (3), où la variation de la valeur  $\beta$  jouerait un rôle important sur le résultat de  $\langle S_1^z \rangle$ , et où l'on verrait apparaître un Hamiltonien effectif de type :

$$\mathcal{H}_{eff} = J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_L$$

avec «  $S = \frac{1}{2}$  » et  $J$  représentant le couplage des 2 spins effectifs avec  $J = J(\beta, L, \dots)$ .

**Remarque :** Un point important est que l'interaction entre ces 2 spins effectifs décroît exponentiellement avec la longueur  $L$  de la chaîne, par conséquent dans la limite des grands systèmes l'état fondamental est 4 fois dégénéré.

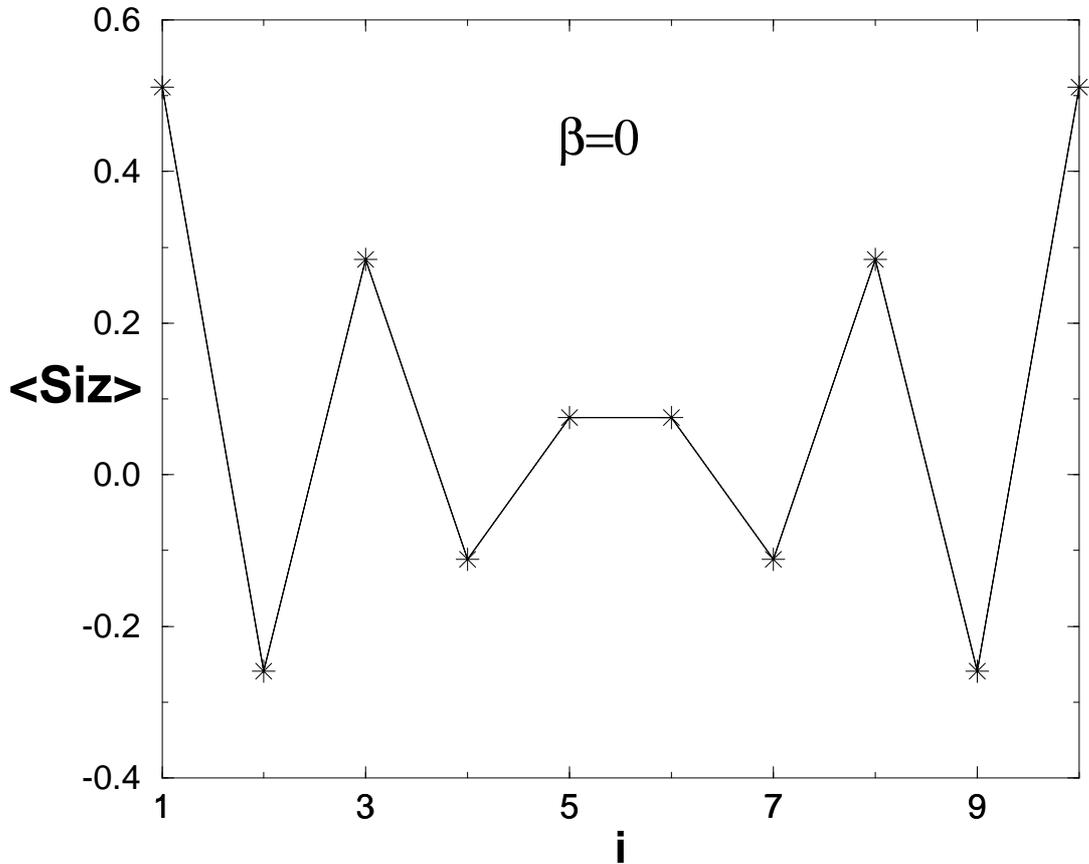


FIG.1-Valeur de l'aimantation pour chaque site d'une chaîne de spin 1 ouverte de longueur  $L = 10$ . Calcul effectué par l'intermédiaire d'une diagonalisation exacte ; on a posé  $\beta = 0$  dans (3).

Outre le caractère particulier du système pour les point  $\beta = 1$  ou  $-1$ , il existe une autre valeur de  $\beta$  particulière, soit  $\beta = -1/3$ , comme nous le verrons pour l'exemple de 2 sites que nous allons traiter, où le singulet et le triplet sont dégénérés. Il s'ensuit que l'état fondamental est 4 fois dégénéré, la longueur de corrélation finie et égale à  $1/\ln 3$ , et l'énergie ainsi que l'état du fondamental sont connus quel que soit la longueur  $L$  de la chaîne. On trouve [voir Ref.5] pour l'énergie du fondamental :

$$E_0 = -\frac{2}{3}(L - 1)$$

On pourra se servir de ce résultat pour tester les méthodes numériques (DMRG) employées.

En théorie pour  $\beta = -1/3$ , 1 spin 1 peut s'interpréter comme 2 spins  $\frac{1}{2}$  avec un lien singulet entre chaque site, on se trouve en présence d'une phase que l'on nomme VBS (Valence Bond State) [voir Ref.5-9]. Comme le gap de Haldane possède une valeur non

nulle pour  $\beta = -1/3$  et nulle en  $\beta = 1$  et  $-1$ , on peut supposer que la phase de Haldane est une phase VBS.

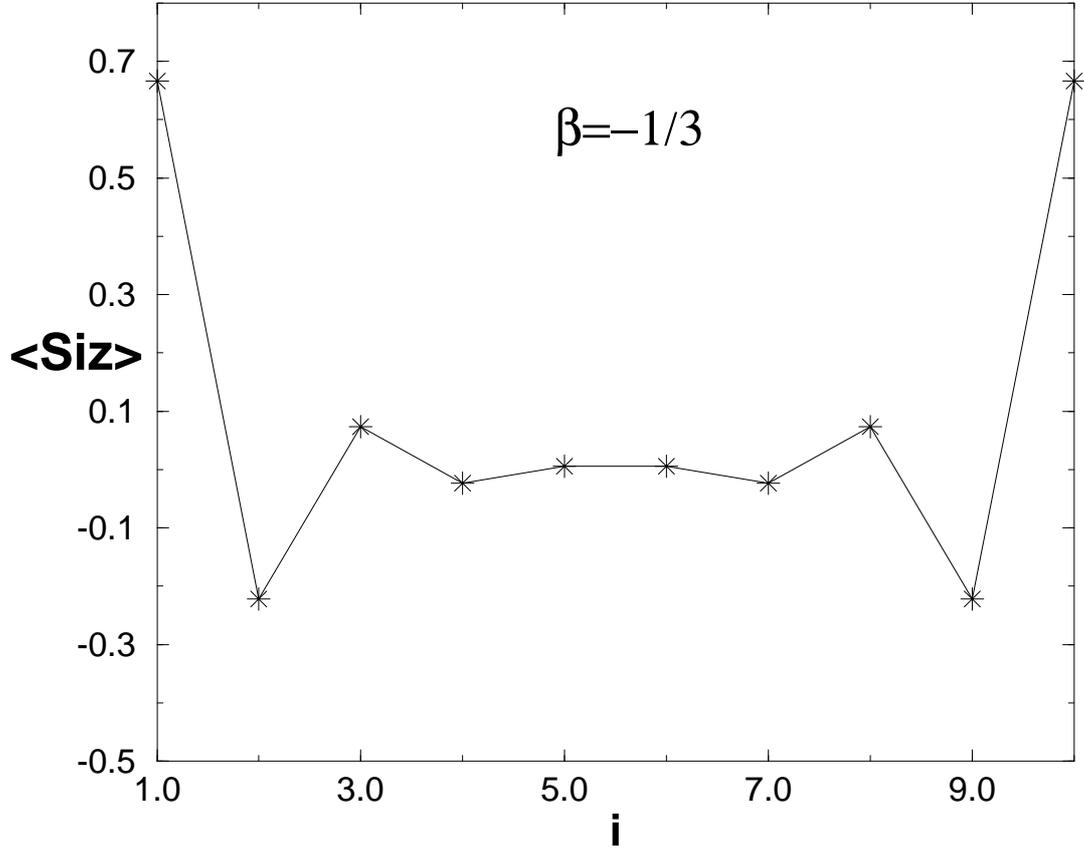


FIG.2-Figure identique à la figure 1 en considérant le terme biquadratique  $\beta = -1/3$  dans (3).

De plus pour  $\beta = -1/3$ , la fonction d'onde du système peut s'écrire en termes de bosons de Schwinger [voir Ref.5], on peut ainsi trouver les relations exactes suivantes (on ne développera pas ici les calculs<sup>7</sup>) :

$$\langle S_1^z \rangle_{2n} = 2 \frac{3^{2n-1} - 1}{3^{2n} - 1} \quad \text{et} \quad \langle S_1^z \rangle_{2n+1} = 2 \frac{3^{2n} + 1}{3^{2n+1} + 1}$$

on peut finalement dresser le tableau suivant :

$L$	1	2	3	4	5	... $\infty$
$\langle S_1^z \rangle$	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{7}$	$\frac{13}{20}$	$\frac{41}{61}$	$\dots \frac{2}{3}$

Nous verrons par la suite que  $\langle S_1^z \rangle$  possède un maximum pour la valeur de  $\beta = -1/3$ . Maximum qui tend vers  $2/3$  avec la longueur de la chaîne.

<sup>7</sup>calculs effectués par F. Mila

### 3.4 Quelques difficultés

Les difficultés que l'on pourrait rencontrer dans notre étude sont essentiellement liées à l'introduction du terme biquadratique. On va, sur l'exemple du couplage de 2 spins 1, préciser cette remarque.

Nous appellerons  $H = \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$  le couplage direct et  $H^2$  le terme biquadratique. On va s'intéresser dans ce cas particulier à l'écriture de  $\mathcal{H} = H - \beta H^2$  (On utilisera une méthode identique à celle effectuée dans le cadre des spin  $\frac{1}{2}$ ) :

$$\begin{aligned} H = \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 &= \frac{1}{2} [(\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 - S_1^2 - S_2^2] \\ &= \frac{1}{2} [(S)^2 - 4] \end{aligned}$$

avec  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ . Il vient donc tout naturellement :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} (S^2 - 4) - \frac{\beta}{4} (S^2 - 4)^2 \quad (4)$$

Pour des spins 1,  $S$  peut prendre les valeurs 0, 1, 2 (*voir* Annexe B). Suivant les différentes valeurs de  $S$ , on trouve pour  $\mathcal{H}$  (4) qui n'est autre que l'énergie :

$$\begin{aligned} S = 0 &\implies \text{singulet} \implies \mathcal{H} = -2 - 4\beta \\ S = 1 &\implies \text{triplet} \implies \mathcal{H} = -1 - \beta \\ S = 2 &\implies \text{quintuplet} \implies \mathcal{H} = 1 - \beta \end{aligned}$$

Dans le cas particulier où  $\beta = 0$ , le spectre d'énergie prend la forme suivante :

$$\begin{array}{ccccc} S = 2 \ E = 1 & & & & \\ \hline S^z = -2 & \hline S^z = -1 & \hline S^z = 0 & \hline S^z = 1 & \hline S^z = 2 \\ S = 1 \ E = -1 & & & & \\ \hline S^z = -1 & \hline S^z = 0 & \hline S^z = 1 & & \\ S = 0 \ E = -2 & & & & \\ & & \hline S^z = 0 & & \end{array}$$

Si on considère maintenant  $\beta \neq 0$  et si l'on trace l'énergie du système  $E$  en fonction de  $\beta$  avec  $-1 < \beta < 1$  on observe (*voir* Fig.3) que le singulet joue le rôle de l'état fondamental pour  $\beta > -1/3$ , mais quand  $\beta < -1/3$  le fondamental n'est plus un singulet mais un triplet (dans le cas étudié). On peut généraliser cette remarque à une chaîne de longueur  $L$  ( $L$  pair), où cette fois ci le quintuplet peut lui aussi passer au dessous du premier état excité. Pour conclure sur ce sujet, on peut tout simplement dire que des problèmes apparaissent dès que  $\beta < -1/3$ ; on ne peut plus prévoir les positions relatives du singulet, triplet du quintuplet, qui peuvent prendre des allures différentes suivant  $L$ . Quand on choisira d'étudier le système avec  $S_{tot}^z = 1$ , il faudra garder à l'esprit que l'on n'obtiendra pas forcément le premier état excité du système, et afin d'obtenir correctement

le gap Haldane, il suffira pour des valeurs de  $\beta$  négatives de considérer l'espace  $S_z^{tot} = 0$  et de sélectionner les 3 premières plus petites valeurs propres.

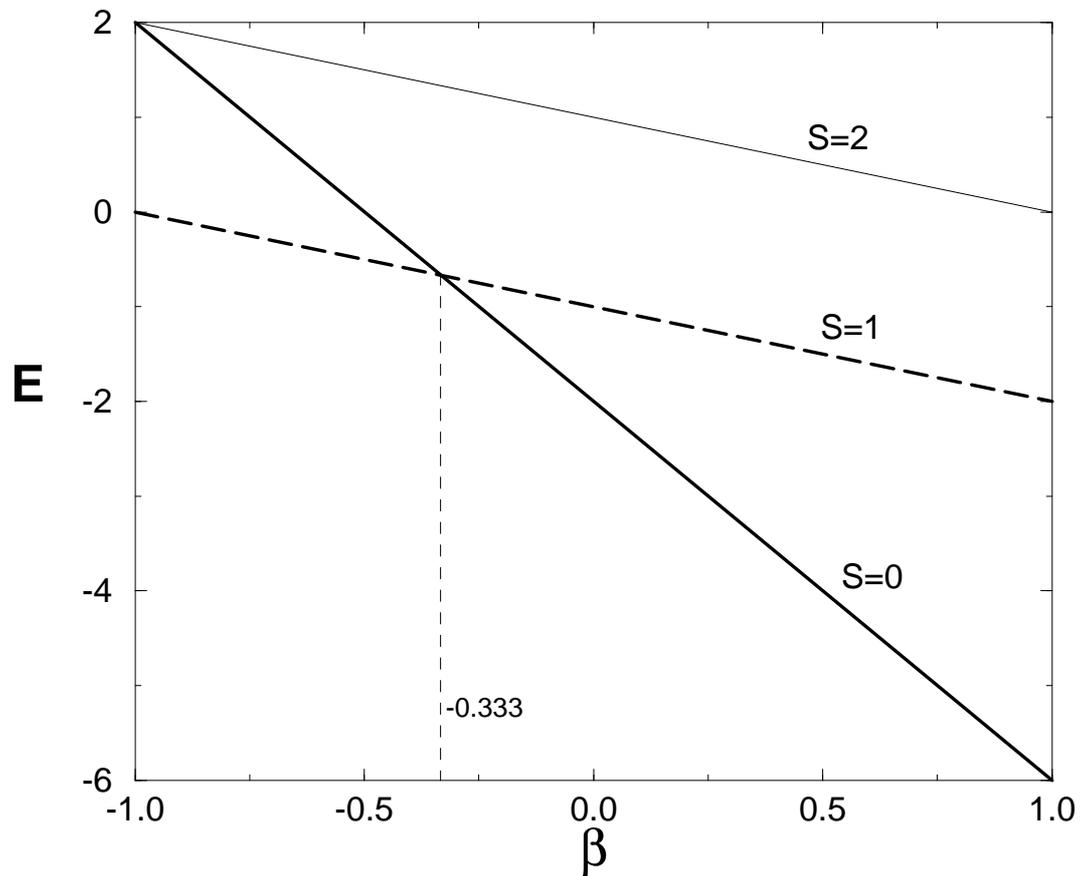


FIG.3-Positions relatives en fonction du terme  $\beta$  du singulet, triplet, et quintuplet, pour un système de 2 spins 1.

# Deuxième partie

## La Méthode

« Le renoncement à une image physique du monde en sa totalité n'est pas un renoncement de principe.  
C'est un choix, une méthode ».  
A. Einstein

### 1 Présentation Générale

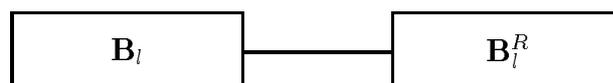
#### 1.1 Introduction : La méthode D.M.R.G

La première partie de ce rapport a été consacré à la présentation du modèle et à l'étude que nous souhaitons établir par la suite. Avant de présenter les différents résultats obtenus sur les différents sujets de recherche, il paraît essentiel de faire mention de la méthode que nous emploierons (DMRG). C'est dans le but de souligner les atouts d'une technique de pointe dans le domaine numérique que la seconde partie de cet exposé à été écrite.

La méthode DMRG (Density Matrix Renormalization Group) fut introduite par S.R. White en 1992 [voir Ref.7-8]. Le principe est simple : en partant d'un espace de Hilbert de dimension assez petite, on augmente pas à pas le nombre de sites tout en tronquant l'espace dans lequel on travaille ; ainsi en sélectionnant les vecteurs les plus significatifs de la matrice densité du système, on s'arrange pour laisser inchangée la dimension de l'espace de Hilbert. Nous allons maintenant donner un aperçu de l'algorithme de White.

#### 1.2 L'Algorithme D.M.R.G

on va considérer le système suivant :



on a tout simplement divisé le système en 2 blocs identiques en nombre de site ; tel que  $L = 2 * l$ . Nous appellerons  $|i\rangle$  un état du bloc de gauche  $B$ , et  $|j\rangle$  un état du bloc de droite  $B^R$ . On remarque que la dimension de l'espace de Hilbert du système est égale à  $3^L$ , pour des spins 1 et  $2^L$ , pour des spins  $\frac{1}{2}$ . On va dégager les grandes étapes de la méthode en considérant des spins 1 (nous précisons par la suite certaines d'entre elles) :

1. On va effectuer une diagonalisation exacte du système (la matrice  $\mathcal{H}$  est de dimension  $3^L * 3^L$ ), on sélectionnera au choix un état du système (fondamental, premier état excité, ...), nous connaissons ainsi l'énergie de cet état ainsi que le vecteur propre associé. On sait que cet état, que nous appellerons  $|\psi_0\rangle$ , est une combinaison linéaire de  $|i\rangle |j\rangle$  et possède  $3^L$  éléments. Ainsi nous pouvons écrire que :

$$|\psi_0\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle$$

2. On va maintenant former la matrice densité réduite à gauche ;

Considérons  $D = |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$  la matrice densité du système global il s'ensuit pour la matrice densité réduite :

$$\rho = \sum_j \langle j | D | j \rangle$$

et des calculs élémentaires nous permettent de donner la valeur des éléments de matrice soit :

$$\rho_{ii'} = \sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j}$$

On remarque que la matrice densité  $\rho$  est Hermitienne et de dimension  $3^{\frac{L}{2}} * 3^{\frac{L}{2}}$ .

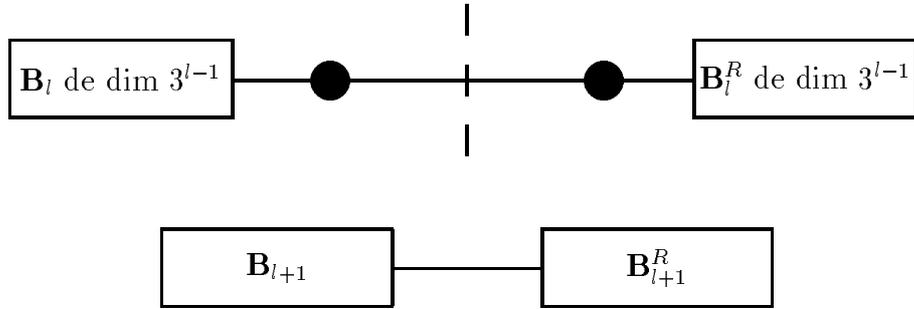
3. On diagonalise  $\rho$ . On trouve les différentes valeurs propres  $w_\alpha$  et on sélectionne les  $m$  valeurs propres de poids les plus forts, de cette façon on souhaite garder les  $m$  vecteur propres associés (de poids statistiques les plus importants). On prendra  $m = 3^{\frac{L-2}{2}}$  si l'on veut conserver par la suite la dimension de l'espace de Hilbert de départ inchangée. Avec  $w_1 > w_2 > \dots > w_\alpha > \dots > w_m$  on obtient :

$$\rho = \left( \begin{array}{c|c} w_1 & \\ & w_2 \\ & & \dots \\ & & & w_\alpha \\ & & & & \dots \\ & & & & & w_m \\ & & & & & & \dots \end{array} \right)$$

4. Avec les vecteurs propres sélectionnés à l'étape précédente on construit les matrices  $O$  et  $O^\dagger$  (adjoint de  $O$ ).  $O$  est de dimension  $m * 3^{\frac{L}{2}}$ .  $O$  et  $O^\dagger$  sont en fait des projecteurs.
5. Si on appelle  $\mathcal{H}^G$  l'Hamiltonien du bloc de gauche qui est de dimension  $3^{\frac{L}{2}} * 3^{\frac{L}{2}}$ , le nouvel Hamiltonien de dimension  $m * m$ , dans l'espace tronqué s'écrit :

$$\mathcal{H}'^G = O.\mathcal{H}^G.O^\dagger$$

6. En rajoutant 1 site au système on construit le nouveau  $\mathcal{H}^G$  de dimension  $3^{\frac{L}{2}} * 3^{\frac{L}{2}}$ , et par 'réflexion'<sup>8</sup> le nouveau  $\mathcal{H}^D$  (Hamiltonien à droite). On obtient donc un nouveau système constitué de  $L + 2$  sites mais dont la dimension est identique à celle de l'étape 1.



7. Pour finir, il nous suffit de reconstruire l'Hamiltonien du système global  $\mathcal{H}$ . Ensuite on peut revenir à l'étape (1) et ainsi de suite jusqu'à la longueur  $L$  de la chaîne que l'on souhaite obtenir.

### 1.3 Remarques

Cet algorithme porte le nom de la méthode des systèmes infinis ; il existe une méthode appelée méthode des systèmes finis qui permet d'affiner les résultats (on ne développera pas cette méthode qui n'est qu'une légère modification de l'algorithme présenté [voir Ref.8]). Les résultats obtenus dans la suite, l'ont été par la méthode des systèmes infinis. De plus, cet algorithme a donné naissance à un programme en C, qui a été écrit dans le cas général des chaînes de spin quelconque et qui nous donne aussi l'aimantation du site désiré. Les difficultés numériques qui sont survenues au fur et à mesure dans le programme, ont permis de mieux comprendre évidemment des célèbres méthodes numériques (Jacobi, Lanczos, . . .) mais aussi l'écriture de l'algorithme.

<sup>8</sup>on détaillera plus en avant cette transformée

## 2 Gros Plan sur les Calculs

### 2.1 L'Hamiltonien de départ

Pour obtenir l'Hamiltonien de départ, il nous suffira d'écrire la matrice  $\mathcal{H}$  et de la diagonaliser. Mais ceci étant, l'espace de Hilbert en question prend rapidement des dimensions difficilement accessibles par les ordinateurs. Pour remédier à cet inconvénient, on peut réduire cet espace en sélectionnant seulement les états pertinents. En bref, on peut réduire notre matrice suivant la base des  $S^z$  dans laquelle on a décidé de travailler. Exemple : si on désire obtenir l'énergie du singulet, c'est à dire l'énergie du fondamental dans la majorité des cas (nous verrons que c'est faux quand on considère la chaîne de spin 1 avec  $\beta < -1/3$ ), on décidera donc de se placer dans l'espace où  $S_{tot}^z = 0$ . En d'autres termes, on écrira la matrice  $S_{tot}^z$  (elle s'écrit dans la même base que  $\mathcal{H}$  et elle est diagonale) et on sélectionnera les différents états pour lesquels la valeur propre de  $S^z$  est nulle. Dans l'étude de l'aimantation du premier site, on restreindra les calculs à l'espace  $S_{tot}^z = 1$ .

#### Exemples :

- Il est utile de montrer sur l'exemple du système de 2 spins 1, la cohérence de cet argument. Prenons  $\beta = 0$ , la matrice  $H$  ayant déjà été donnée explicitement, la matrice  $S^z$  (voir Annexe B) nous engage à sélectionner seulement les états  $|21\rangle$  et  $|12\rangle$  avec comme contrainte  $S_{tot}^z = 1$ , ainsi on se retrouve avec une matrice  $2 * 2$  à diagonaliser (au lieu de  $9 * 9$ ) :

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

on obtient comme valeurs propres  $-1$  et  $1$ . La plus petite valeur propre correspond bien à la valeur de l'énergie du triplet pour  $\beta = 0$  alors que la deuxième nous donnera le quintuplet (voir première partie, section 3.4).

- Si l'on choisit de travailler avec des spins  $\frac{1}{2}$  et une chaîne de longueur  $L = 8$ , l'espace de Hilbert comporte donc  $N = 2^8 = 256$  états possibles. Supposons que l'on préfère travailler dans la base où  $S_{tot}^z = 0$ , alors le sous espace de Hilbert ne comporte que  $\mathcal{N} = 70$  états. On peut vérifier, dans ce cas, le résultat analytiquement car :

$$\mathcal{N} = C_{N/2}^N = \frac{N!}{((N/2)!)^2}$$

En définitive, nous aurons besoin de connaître la matrice  $S_{tot}^z$ , afin de sélectionner les états pertinents dans  $H_{tot}$ . Il nous faudra déduire tout d'abord la matrice  $H_{tot}$  à partir de la matrice de l'Hamiltonien du bloc de gauche,  $Hg$ , de la matrice de l'Hamiltonien du bloc de droite,  $Hd$ , et de la matrice de l'Hamiltonien décrite en (3),  $H$ , assurant le lien entre les 2 blocs :

$$H_{tot} = I \otimes Hg + Hd \otimes I + I \otimes H \otimes I \quad (5)$$

$H_{tot}$  est de dimension  $3^L$ , dans le cas des spins 1,  $Hg$  et  $Hd$  sont de même dimension  $3^{L/2}$ ,  $H$  de dimension 9; Les matrices  $I$  sont des matrices identités et leur dimension est appropriée dans chaque terme, de plus,  $\otimes$  représente le produit tensoriel (voir Annexe B).

On peut de façon similaire calculer  $S_{tot}^z$  du système à l'aide de  $S_{tot}^z$  à gauche et à droite, mais cette fois-ci il n'y a pas de terme d'interaction, c'est à dire que si l'on se sert de l'équation (5) (avec les changements de notations), on n'écrira pas le dernier terme.

Au départ du problème, les matrices  $Hg$  et  $Hd$ , ainsi que  $S_{tot}^z g$  et  $S_{tot}^z d$ , sont identiques, mais diffèrent dès la première itération. Cependant, et comme nous l'avons vu dans l'algorithme, les calculs ne seront effectués que pour le bloc de gauche, les résultats concernant le bloc de droite se déduisent à l'aide d'une simple réflexion (*voir plus en avant*).

La matrice  $H_{tot}$  ainsi obtenue peut se réduire, suivant la contrainte  $S_{tot}^z$  que l'on souhaite appliquer, à une matrice que nous nommerons  $H_{simp}$ . Notons enfin que la matrice  $H_{simp}$  est une matrice très creuse (comporte beaucoup d'élément nul), ainsi nous ne nous amuserons pas à la stocker entièrement en mémoire, et on sélectionnera seulement les éléments non nuls. Numériquement, les matrices les plus grandes que nous aurons à stocker seront de dimension  $3^{\frac{L}{2}}$  pour des spins 1.

## 2.2 Méthodes de diagonalisations

Il nous faut maintenant choisir une méthode de diagonalisation pour la matrice creuse  $H_{simp}$ . Nous avons choisi d'utiliser la méthode de Lanczos, dont nous connaissons l'efficacité pour résoudre les énergies et les états du bas du spectre. Le principe est simple, il suffit de réduire la matrice que l'on souhaite diagonaliser à une matrice tridiagonale de dimension beaucoup plus petite, mais nous ne donnerons pas dans le cadre de cet exposé le détail de la très répandue méthode de Lanczos.

Il existe plusieurs autres méthodes de diagonalisation, comme la méthode de Davidson [*voir Ref.10*], ou la méthode de Lanczos modifié [*voir Ref.11-12*]. Cette dernière donne des résultats sur les énergies forts intéressants (précision  $10^{-12}$ ), mais comme nous l'avons testé, des résultats sur les états trop imprécis (précision  $10^{-4}$ ). Nous avons donc préféré utilisé une méthode de Lanczos conventionnelle, car la précision que l'on doit obtenir sur les états du bas du spectre doit être primordiale pour le calcul de la matrice densité (étape 2 de l'algorithme). Cependant pour l'étape (3) de l'algorithme DMRG, qui consiste à diagonaliser la matrice densité, nous utiliserons la méthode de Jacobi et nous en déduirons tous les états de la base diagonale et toutes les valeurs propres (On a besoin d'exécuter un tel calcul afin de construire les matrices  $O$  et  $O^\dagger$ ).

## 2.3 Calcul de l'aimantation

Si on désire calculer l'aimantation du site  $i$ , on peut le faire dès le calcul de la matrice densité effectué. Exemple : si l'on souhaite calculer l'aimantation du premier site  $\langle S_1^z \rangle$ , il faut en premier lieu connaître la matrice  $S_1^z$ , ensuite, on peut au choix : soit réaliser le calcul directement par l'intermédiaire de l'état  $|\psi_0\rangle$  trouvé dans l'étape (1), soit se servir de la matrice densité à gauche  $\rho$  en remarquant que :

$$\langle S_1^z \rangle = Tr[S_1^z \rho]$$

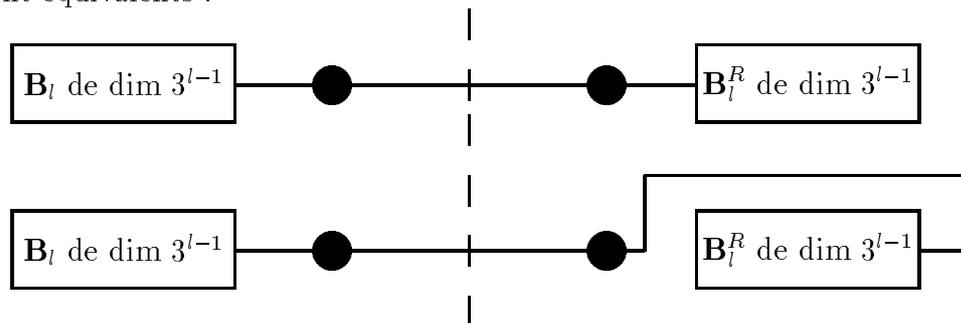
Pour calculer le nouveau  $S_1^z$ , il suffit dans l'étape (5), tout comme le calcul de l'Hamiltonien  $\mathcal{H}^G$ , de composer la matrice  $S_1^z$  à l'aide de  $O$  et  $O^\dagger$ , on obtient ainsi un nouveau  $S_1^z$

(modulo une composition tensorielle par une matrice unité à gauche, afin de se ramener à la bonne dimension).

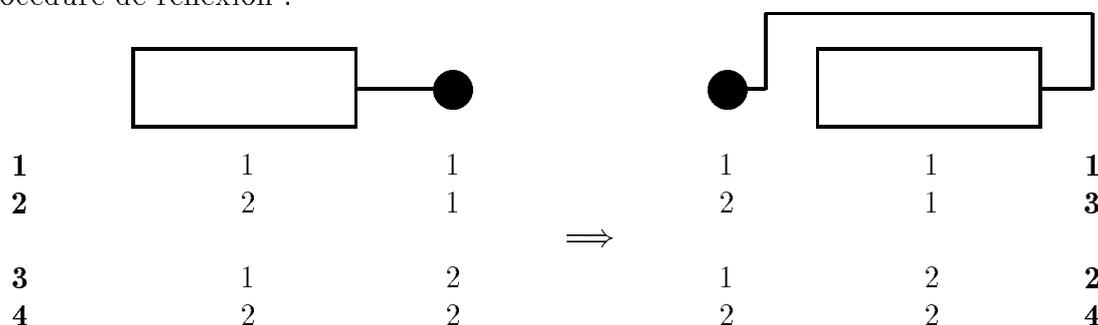
De la même manière, on calcule la nouvelle matrice  $S_{tot}^z g$ .

## 2.4 Procédure de réflexion

C'est juste une autre manière de réorganiser les états, on remarque que les 2 schémas qui suivent sont équivalents :



On va sur un exemple simple éclairer le principe : supposons des spins  $\frac{1}{2}$ , le bloc de gauche, comme celui de droite, ne comportant qu'un seul spin, et donc 2 états possibles, 1 ou 2. Regardons comment se transforme l'ordre des états (en gras sur le schéma) avec la procédure de réflexion :



Appelons  $Ag$  une matrice de gauche, calculée en tenant compte de l'ensemble bloc-spin, ce peut être  $Hg$  ou  $S_{tot}^z g$ , on peut déduire alors les éléments de matrice de  $Ad$ , matrice de droite. Dans l'exemple proposé,  $Ag$  est de dimension  $4 \times 4$ , de plus la réflexion nous apprend que :

$$Ad(1,2) = Ag(1,3), Ad(1,3) = Ag(1,2), Ad(2,2) = Ag(3,3), Ad(2,3) = Ag(3,2), Ad(2,4) = Ag(3,4), Ad(3,3) = Ag(2,2), Ad(3,4) = Ag(2,4)$$

On rappelle que les matrices  $Ad$  et  $Ag$  sont Hermitiennes.

Il sera facile de généraliser cet exemple pour n'importe quel système.

## 2.5 Le nouvel Hamiltonien

Après les diverses remarques que nous venons de faire, il est clair qu'il nous suffit seulement de calculer  $Hg$  ; par la suite, avec la réflexion, nous aurons  $Hd$ , puis grâce à l'équation (5),  $H_{tot}$ , ou plutôt  $H_{simp}$  si on tient compte de  $S_{tot}^z$ .

Pour calculer  $Hg$ , il faut à la fois prendre en compte l'Hamiltonien du bloc tronqué et le terme d'interaction due au spin que l'on rajoute, cela nous donne en détail (avec les matrices identités pour assurer une dimension homogène) :

$$Hg = I \otimes (OHgO^\dagger) + (I \otimes OS_i^\dagger O^\dagger)(S_{i+1}^\dagger \otimes I) - \beta[(I \otimes OS_i^\dagger O^\dagger)(S_{i+1}^\dagger \otimes I)]^2 \quad (6)$$

Dans (6), le spin  $S_{i+1}$  représente le spin libre que l'on rajoute, de plus on gardera à l'esprit la décomposition du produit scalaire des 2 moments comme :

$$\vec{S}_i \vec{S}_{i+1} = S_i^z S_{i+1}^z + 1/2(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+)$$

**Remarque :** Quand  $\beta < 0$  et devient très petit, on remarque que le terme biquadratique devient dominant. On ne peut donc plus considérer dans (6) le troisième terme comme le carré du second, c'est à dire que l'on doit le développer avec la condition que  $OO^\dagger \simeq I$ , ainsi nous limitons les fluctuations que l'on pouvait obtenir dans les résultats par un simple calcul direct (monter une matrice au carré). Le troisième terme fait place très simplement à 9 termes différents, les résultats que l'on obtient en utilisant cette « astuce »<sup>9</sup> de calcul sont très satisfaisants.

Nous connaissons maintenant les grandes lignes de fonctionnement de la méthode DMRG, mais est-elle vraiment efficace ?

---

<sup>9</sup>merci Erik!



# Troisième partie

## Les Résultats

« Et je prétends que ce qui décide en dernier ressort  
du destin d'une théorie, c'est le résultat. . . »  
K. R. Popper

### 1 Efficacité de la Méthode D.M.R.G

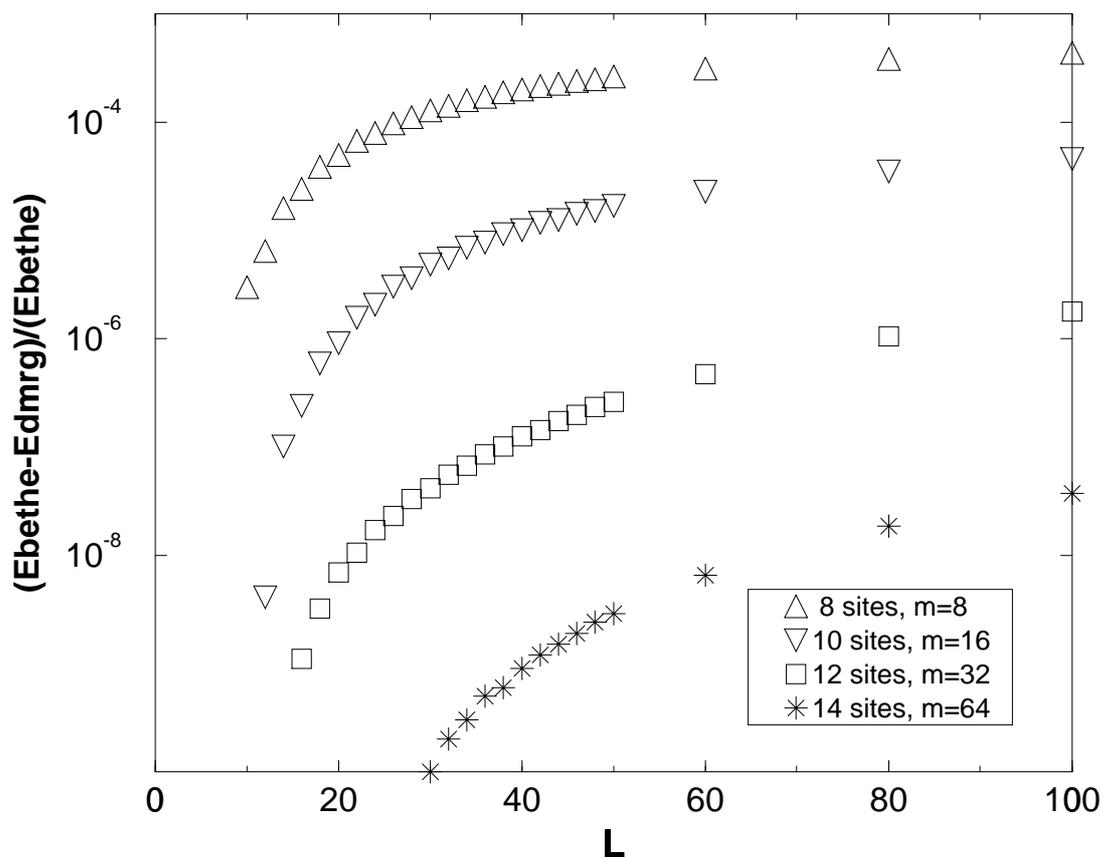


FIG.4-Valeurs des incertitudes relatives de l'énergie du chaîne de spin  $\frac{1}{2}$  suivant les différentes itérations DMRG.

Si l'on compare l'énergie d'une chaîne de spin  $\frac{1}{2}$  trouvée par la méthode DMRG avec celles que nous donne le modèle soluble de l'Ansatz de Bethe<sup>10</sup>(voir Fig.4), on remarque que l'erreur relative que l'on commet est très faible. D'autant plus faible, que le nombre de site de départ sera grand, car si on appelle  $m$  ( $m = 2^{L/2-1}$ ) le nombre d'état que l'on considère (ou que l'on conserve sur  $2m$  états possibles dans ce cas), il va de soit que pour un  $m$  plus grand, le système sera d'autant mieux décrit et l'erreur d'autant plus petite. Ce qui est remarquable c'est de voir que, pour 14 sites de départ par exemple, même après un nombre d'itération DMRG conséquent (43), on obtient pour 100 sites une précision de plus de  $10^{-7}$ . Preuve que DMRG est une méthode réellement très efficace, ainsi on va pouvoir dès à présent l'utiliser sans risque sur des modèles non solubles analytiquement.

## 2 Le Gap de Haldane

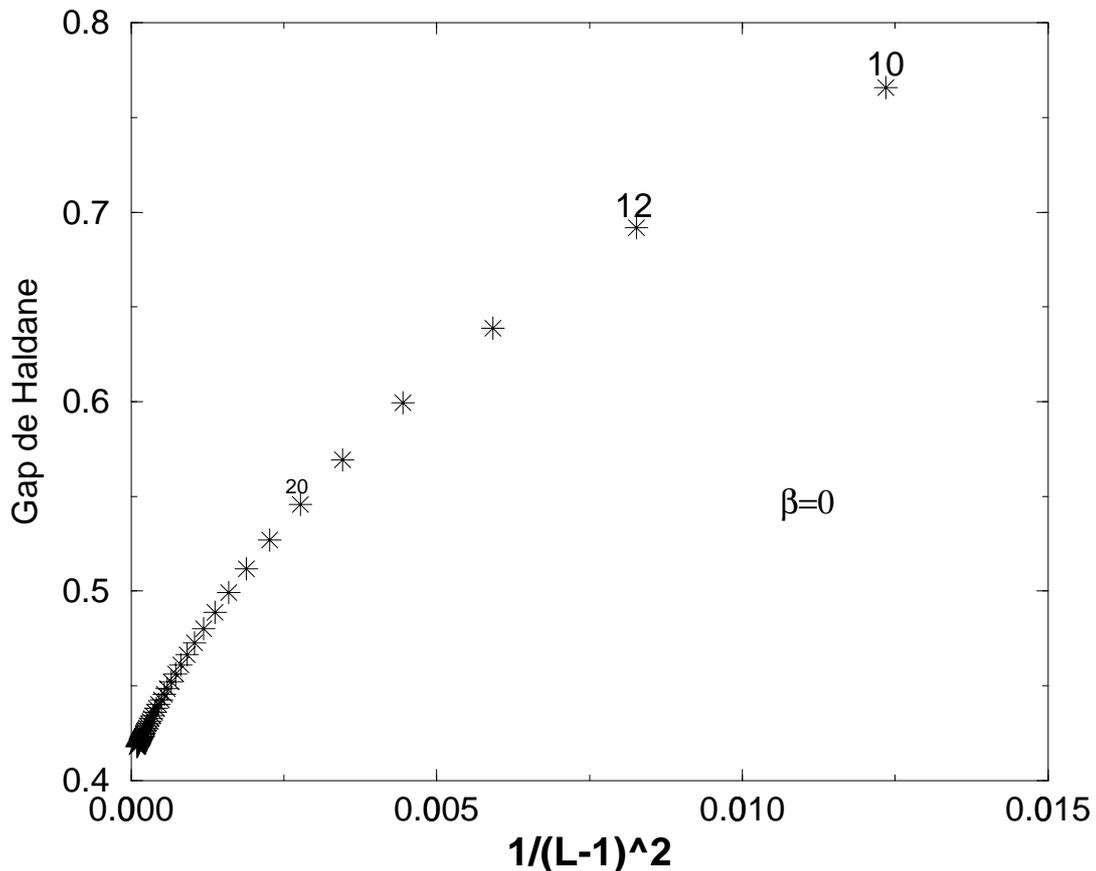


FIG.5-Gap de Haldane pour 45 itérations DMRG (départ 10 sites et arrivée 100 sites) pour une chaîne de spin 1 privée de terme biquadratique. On conserve  $m = 81$  états.

<sup>10</sup>voir Annexe A

Dans la première partie de ce rapport nous avons présenté le gap de Haldane comme étant la différence d'énergie entre le deuxième et le premier niveau excité du système. Rappelons que le gap de Haldane est une particularité des chaînes de spin 1. On décrit les systèmes se trouvant dans la nature à l'aide d'un Hamiltonien de type (2) (plus anisotropie), c'est à dire ne possédant pas de terme biquadratique  $\beta = 0$ . Ces systèmes présentent un gap dans leur spectre d'énergie. L'étude théorique, ou plutôt numérique, par l'intermédiaire de DMRG, nous confirme ce résultat (*voir* Fig.5). Nos calculs s'arrêtent au bout de 45 itérations DMRG, en partant de 10 sites on arrive à 100 sites; on trouve à la dernière itération pour le gap de Haldane la valeur  $\Delta = 0.417\dots$ : résultat que l'on pourrait améliorer en réalisant un ajustement des valeurs obtenues pour les différentes itérations (on «*fitte*» les différentes valeurs). Le procédé est simple, il nous suffit de tracer le gap de Haldane en fonction de  $(L-1)^{-2}$  [*voir* Ref.6], comme l'indique toutes les figures présentent dans cette section, puis de fitter les résultats<sup>11</sup>. White, dans un de ces articles [*voir* Ref.7], propose un ajustement linéaire à partir du 40<sup>ième</sup> site, avec  $L^{-2}$  comme abscisse il trouve (un résultat qui est cohérent avec le nôtre):  $\Delta = 0.4107 + 67.9L^{-2}$

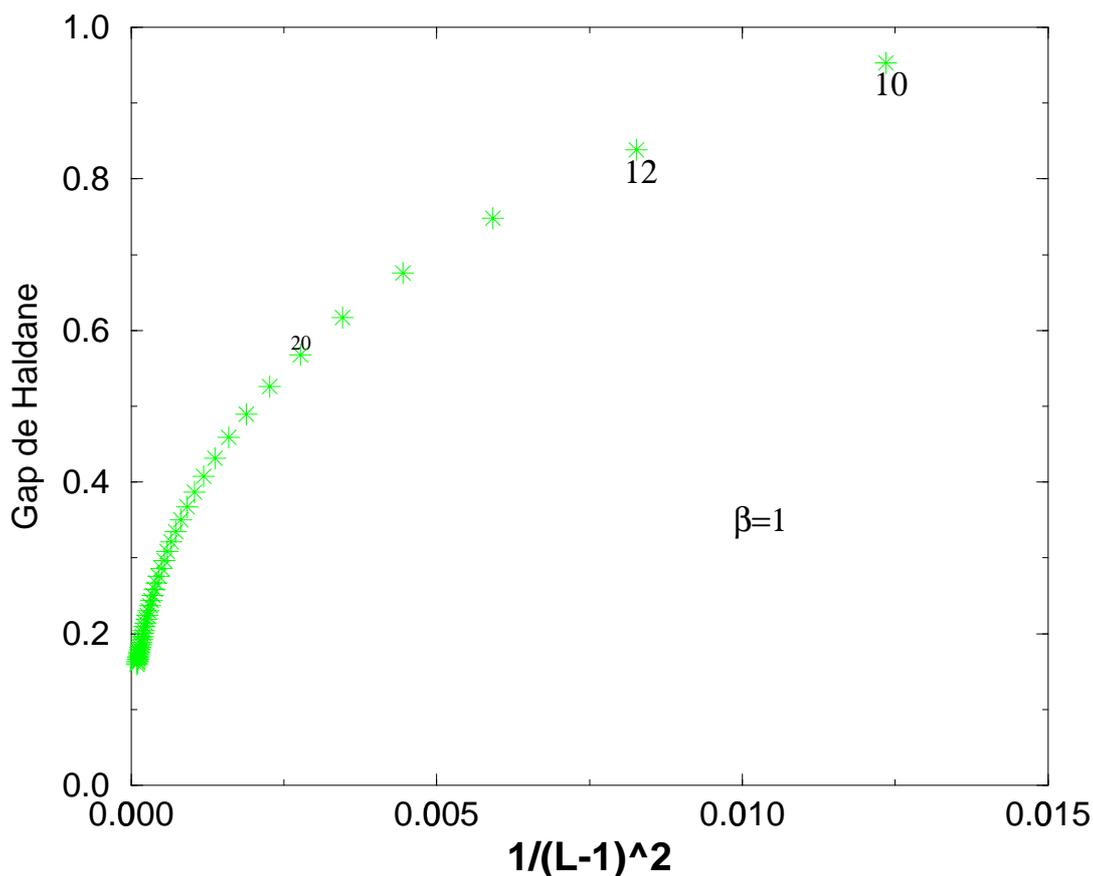


FIG.6-Gap de Haldane pour 45 itérations DMRG (départ 10 sites et arrivée 100 sites) pour une chaîne de spin 1 avec  $\beta = 1$ . On conserve  $m = 81$  états.

<sup>11</sup>calculs que l'on n'a pas effectué dans le cadre de ce rapport

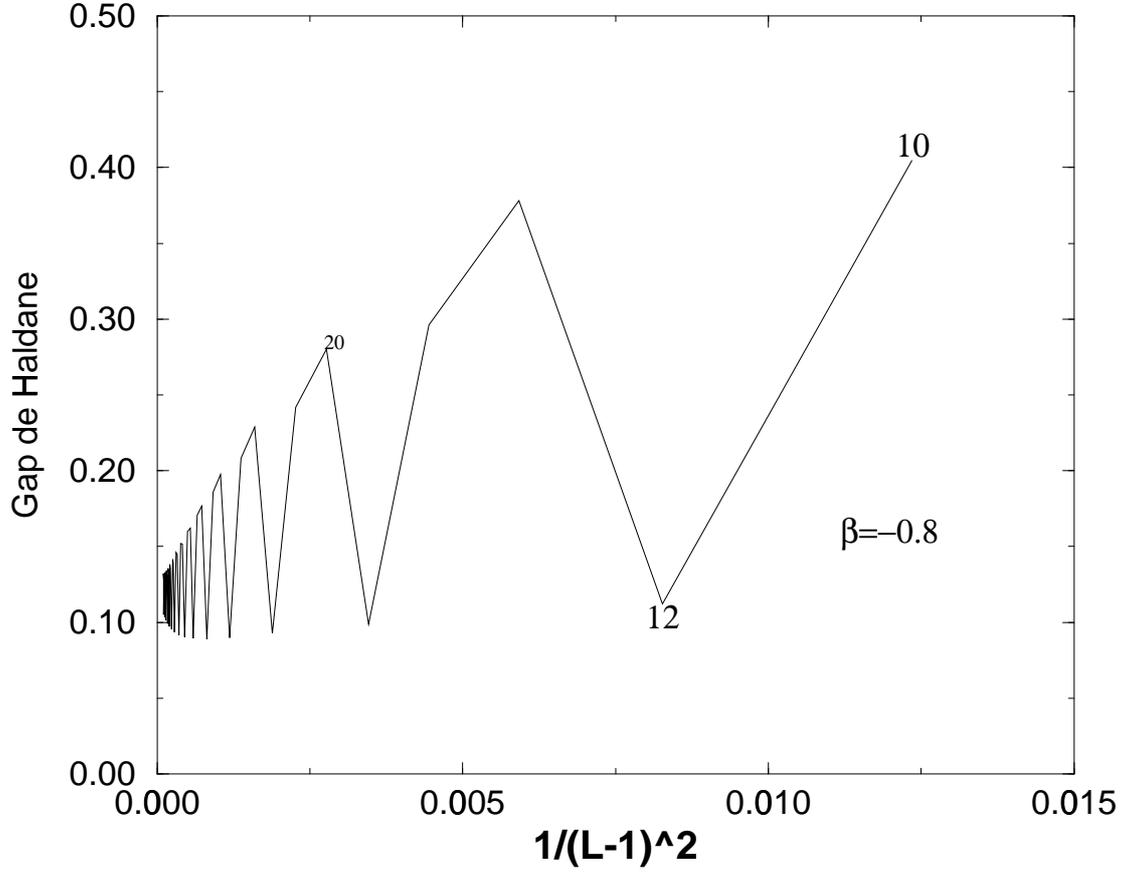


FIG.7-Gap de Haldane pour 45 itérations DMRG (départ 10 sites et arrivée 100 sites) pour une chaîne de spin 1 avec  $\beta = -0.8$ . On conserve  $m = 81$  états mais l'on remarque des fluctuations anormales.

Une étude plus poussée a amené White [voir Ref.9] à proposer la valeur 0.4105020 pour le gap de Haldane, dans le cadre d'une chaîne de longueur  $L = 120$  et en conservant  $m = 140$  états.

Maintenant, nous allons nous intéresser à la variation du gap de Haldane dans ce que l'on nomme la phase de Haldane ( $-1 < \beta < 1$ ). On sait que pour les points  $\beta = 1$  et  $-1$ , le gap est nul. Numériquement, on obtiendra une valeur minimale non nulle pour le gap (voir Fig.6), pour affiner les résultats il nous suffit de fitter les valeurs ou augmenter le nombre d'itération DMRG (on peut aussi augmenter le nombre d'état  $m$  que l'on conserve, mais le temps de calcul augmente aussi considérablement). Pour cette raison la figure (8) nous donne seulement l'allure de la variation du gap de Haldane en fonction de  $\beta$ .

Cependant et comme nous l'avons vu dans la section 3.4 de la première partie, des difficultés peuvent apparaître si l'on considère des valeurs de  $\beta$  négatives et petites (voir Fig.7). Notre programme, effectuant les divers calculs dans une base  $S_{tot}^z = 1$ , ne peut différencier dans ce cas un triplet d'un quintuplet, dont la position relative varie en plus avec  $L$ . Afin

d'obtenir des résultats corrects concernant cette partie de la phase de Haldane<sup>12</sup>, c'est à dire les véritables première et seconde énergies propres du système, il nous suffira de travailler dans une base  $S_{tot}^z = 0$  (donc relancer les calculs).

**Remarque :** La valeur du gap de Haldane en fonction de  $\beta$  fait apparaître un maximum sur notre figure (car  $\Delta = 0$  pour  $\beta = -1$ ).

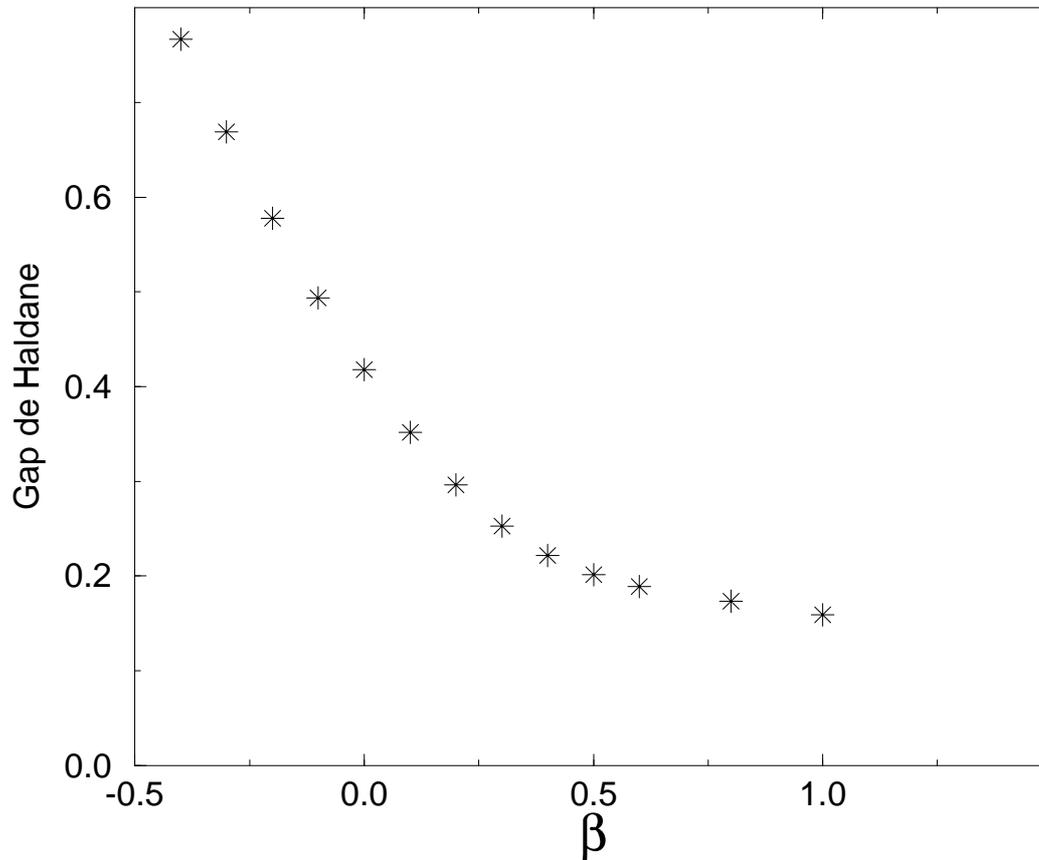


FIG.8-Allure du gap de Haldane en fonction de  $\beta$  (les valeurs sont non fittées), nous avons délibérément ignoré les valeurs pour lesquelles  $\beta$  est négatif et faible.

---

<sup>12</sup>Si l'on souhaite observer les valeurs du gap sur la phase complète voir Ref.4

### 3 L'Aimantation du Premier Site

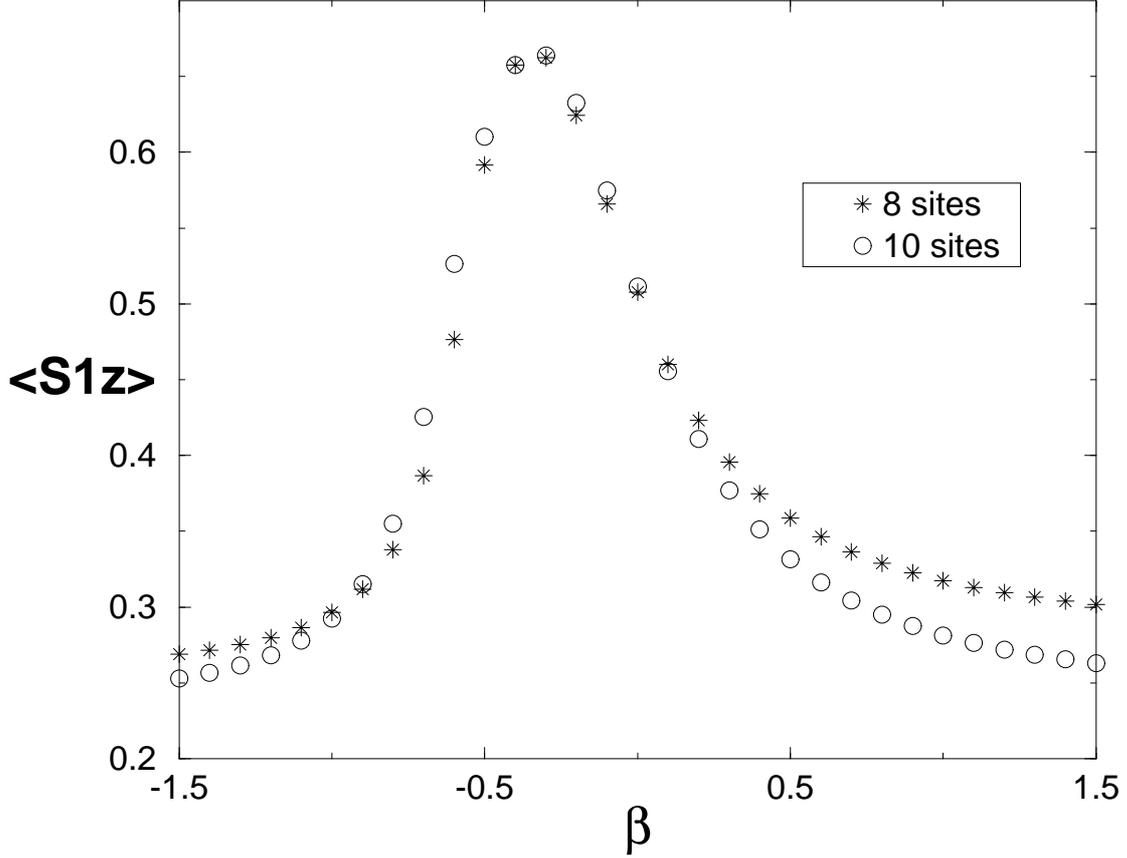


FIG.9-  $\langle S_1^z \rangle$  en fonction de  $\beta$ , dans le cas d'une résolution par diagonalisation exacte pour 8 et 10 sites de départ. Pour 8 sites on conserve  $m=27$  états tandis que pour 10 sites on conserve  $m=81$  états.

Il est important de noter que les résultats que l'on va obtenir dans cette section n'ont jamais été observés, ni commentés. Il ont été réalisés avec la contrainte  $S_{tot}^z = 1$  afin de pouvoir observer l'apparition des spins  $\frac{1}{2}$  effectifs. Nous savons ainsi que l'aimantation du corps de la chaîne tend vers 0 avec  $L$  qui croît (*voir* la section 3.3 de la première partie). L'aimantation se concentre donc sur les bords de la chaîne. On peut se représenter nos 2 spins effectifs comme 2 « objets » se situant aux 2 extrémités de la chaîne. Pour des  $L$  petits il se peut que l'on ait recouvrement des 2 objets, mais pour des  $L$  grands ces objets sont bien définis.

Dans notre étude nous considérerons seulement l'évolution de l'extrémité du spin  $\frac{1}{2}$  effectif (l'objet), c'est à dire l'aimantation du premier site,  $\langle S_1^z \rangle$ , en fonction du paramètre  $\beta$ .

En réalisant des diagonalisations exactes pour différentes valeurs de  $\beta$  sur une chaîne de spin 1 ouverte de longueur  $L = 10$ , on peut déjà avoir une idée du comportement de

$\langle S_1^z \rangle$  (voir Fig.9). Les résultats seront d'autant plus précis que la longueur  $L$  de départ sera grande (dans les calculs on se limitera à  $L = 10$ , donc on conservera  $m = 3^4 = 81$  états). On se servira de la méthode DMRG afin d'obtenir des résultats pour des systèmes plus grands (voir Fig.10-11). On remarque que dans la phase de Haldane  $\langle S_1^z \rangle$  possède une valeur non nulle et maximale,  $2/3$ , pour  $\beta = -1/3$  (calcul déjà mentionné dans la première partie de l'exposé).

Petite remarque anecdotique : avant d'obtenir le moindre résultat on supposait, au vu de la particularité du point  $\beta = -1/3$ , que l'aimantation aurait la valeur exacte  $\frac{1}{2}$ , mais le résultat numérique nous a fait revoir le détail du calcul analytique<sup>13</sup>.

On a l'impression que plus le nombre d'itération DMRG est élevé, plus  $\langle S_1^z \rangle$  semble atteindre la valeur nulle en dehors de la phase de Haldane (voir Fig.11). On constate en outre que pour  $-0.6 \leq \beta \leq 0.2$ , l'aimantation en fonction du nombre de site  $L$  varie peu (voir Fig.11). Les figures (12) et (13) confirment d'ailleurs ce résultat. Cependant des difficultés peuvent apparaître pour des valeurs de  $\beta$  négatives où l'on observe des fluctuations (voir Fig.13 pour  $\beta = -0.6, -0.8, -1$  et section précédente).

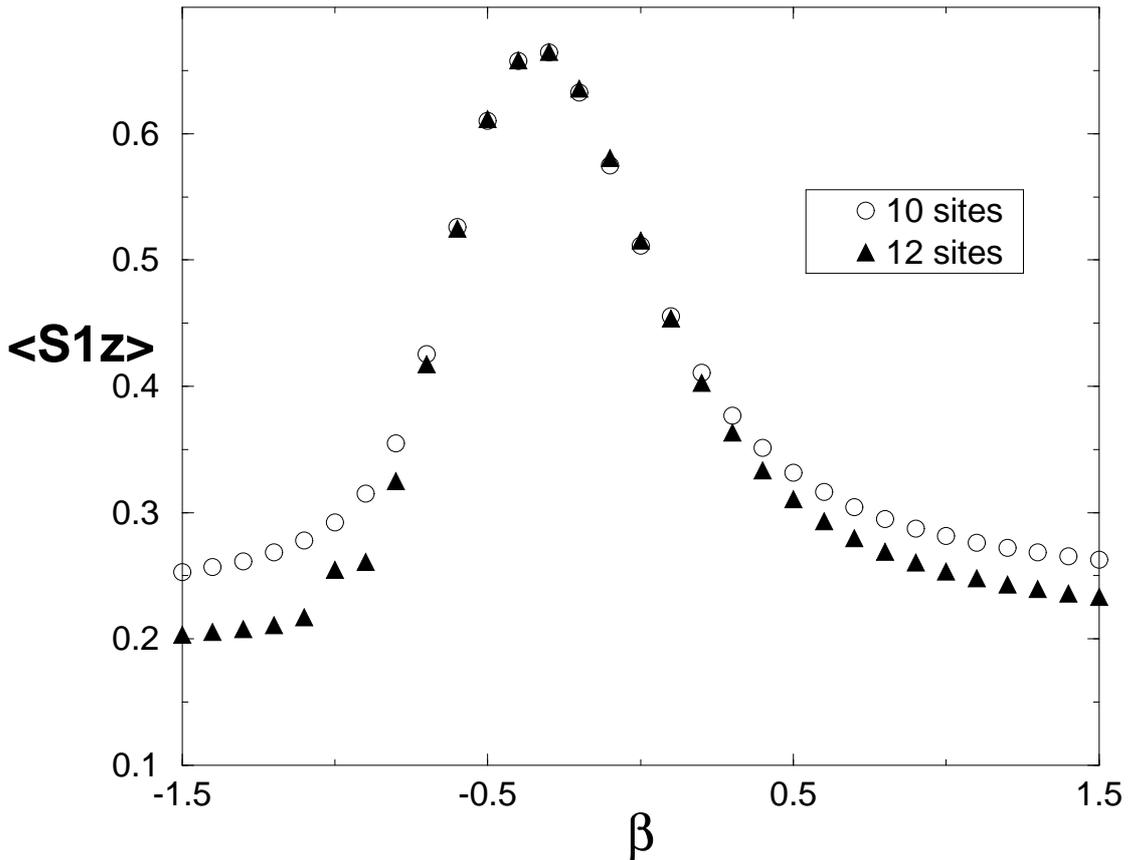


FIG.10-  $\langle S_1^z \rangle$  en fonction de  $\beta$ , dans avec 10 sites de départ et  $m=81$  états conservés, on observe l'évolution de l'aimantation après 1 itération DMRG (ce qui nous donne 12 sites).

<sup>13</sup>je me réjouis de constater ici l'efficacité du duo numérique-analytique

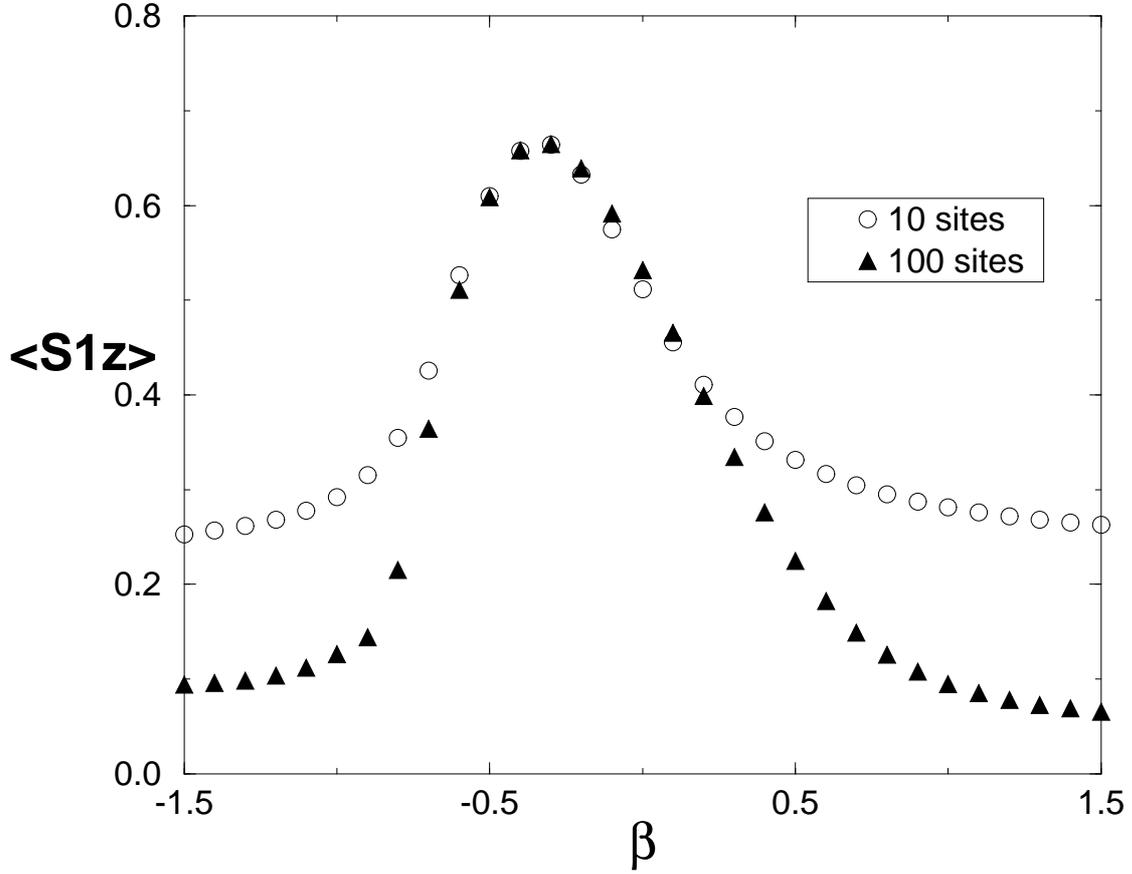


FIG.11-  $\langle S_1^z \rangle$  en fonction de  $\beta$ , dans avec 10 sites de départ et  $m=81$  états conservés, on observe l'évolution de l'aimantation après 100 itérations DMRG (ce qui nous donne 100 sites).

**Dernière remarque :** Dans la phase dite de Haldane,  $\langle S_1^z \rangle$  peut s'écrire en fonction de  $L$  et surtout en fonction de la longueur de corrélation du système  $\xi$  (plus certains exposant comme  $\alpha$ ) ainsi :

$$\langle S_1^z \rangle = aL^{-\alpha} \exp(-L/\xi) + cte \quad (7)$$

Cette relation (7) est « supposée » écrite dans le cas général pour chaque valeur de  $\beta$ . Elle englobe même les points  $\beta = 1, -1$ , car il apparaît pour chacun de ces points une transition de phase, donc une longueur de corrélation  $\xi$  infinie. On se retrouve alors avec une loi de puissance, c'est d'ailleurs pour cette raison que dans les figures (12) et (13) les graphes  $\beta = 1$  et  $-1$  ont été tracés en  $(\log - \log)$ . Nous pouvons avec le graphe  $\beta = 1$  trouver l'exposant  $\alpha$  associé à  $\beta = 1$  (le graphe  $\beta = -1$  comporte trop de fluctuation pour conclure à une droite). On aspire pour toutes les diverses valeurs de  $\beta$  à trouver les constantes *cte* dans (7). On pourrait exécuter ensuite un fitte pour chaque valeur de l'aimantation, et obtenir une courbe  $\langle S_1^z \rangle$  en fonction de  $\beta$  extrêmement précise. De plus, si on confirme le fait que l'aimantation du premier site tend vers une valeur finie avec  $L$  qui croît, alors nos 2 spins effectifs seront clairement définis et localisés.

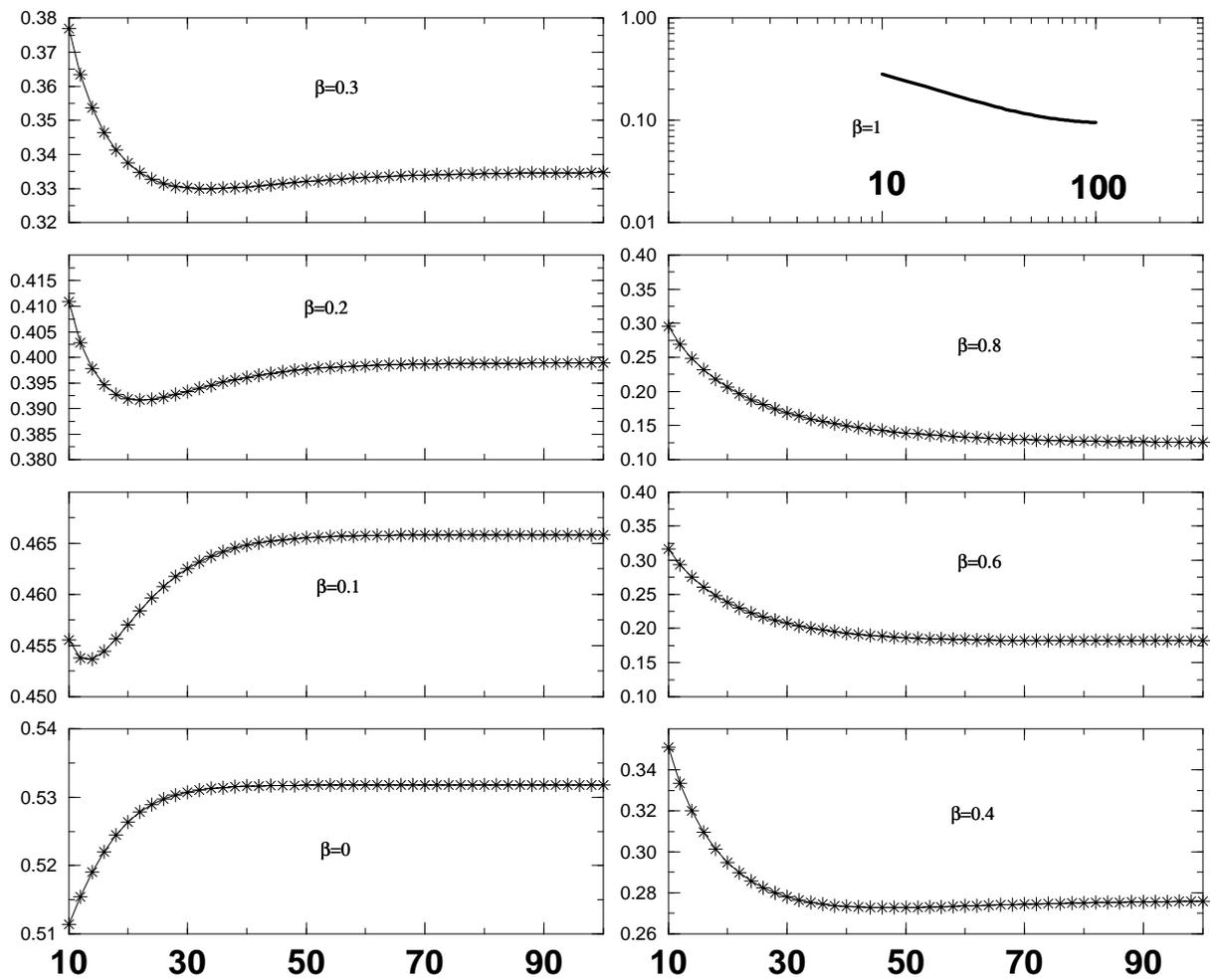


FIG.12-  $\langle S_1^z \rangle$  en fonction de  $L$ , pour différentes valeurs de  $\beta$  positives.

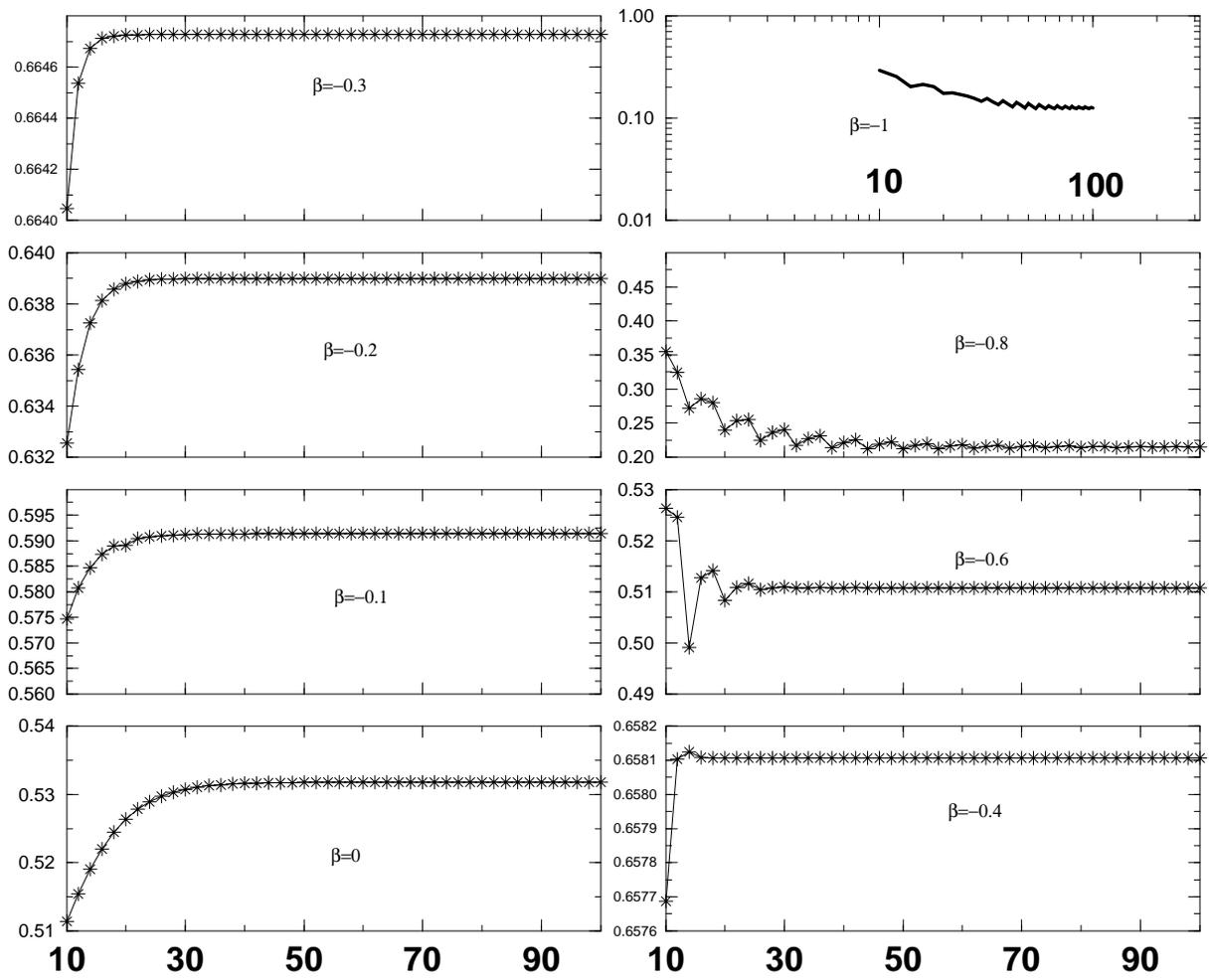


FIG.13-  $\langle S_1^z \rangle$  en fonction de  $L$ , pour différentes valeurs de  $\beta$  négatives.

## 4 Perspectives

L'étude des chaînes de spin 1 antiferromagnétiques suscite de nos jours un grand intérêt dans le domaine de la physique. Il existe d'énormes travaux à entreprendre concernant ces modèles unidimensionnelles. Nous avons essayé à travers cet exposé de présenter certaines propriétés remarquables (surprenantes) comme le gap de Haldane, ou la très intéressante étude des spins  $\frac{1}{2}$  effectifs. Le fait d'étudier l'influence d'un terme biquadratique dans l'Hamiltonien permet de créer un lien important entre les modèles solubles exactement et les systèmes physiques réels existants dans la nature. A travers une stupéfiante méthode DMRG, on peut aujourd'hui résoudre avec succès des problèmes numériques complexes. Les perspectives pour l'avenir sont indénombrables : étude d'un paramètre d'ordre entre une transition de phase VBS et Dimerisé pour  $\beta = 1$  (ou  $-1$  ?) ; effets de l'introduction d'une impureté de spin quelconque dans une chaîne de spin 1 ; étude du gap entre l'état à 1 magnon et celui à 3 magnons (en tenant compte de l'espace des moments) ; mais aussi une étude poussée sur les spins  $\frac{1}{2}$  effectifs (problème de recouvrement...) ; etc...



## Annexe A

Valeurs des énergies trouvées par l'Ansatz de Bethe pour une chaîne de spin  $\frac{1}{2}$  ouverte (avec une précision de  $10^{-12}$ ) :

Nombre de sites	Énergie du système
2	-0.75000000000004119
4	-1.6160254037847226
6	-2.4935771338882375
8	-3.3749325986881731
10	-4.2580352072832861
12	-5.1420906328410059
14	-6.0267246618626569
16	-6.9117371455751027
18	-7.7970110685365128
20	-8.6824733343989671
22	-9.5680758759835580
24	-10.4537857604095805
26	-11.3395796527551411
28	-12.2254405486029540
30	-13.1113557586031355
32	-13.9973156182243308
34	-14.8833126351048719
36	-15.7693409098990927
38	-16.6553957333393825
40	-17.5414732999047054
42	-18.4275705004913917
44	-19.3136847697434000
46	-20.1998139719183136
48	-21.0859563143863014
50	-21.9721102812505080
60	-26.4030151473576353
80	-35.2652370546614335
100	-44.1277398932968339



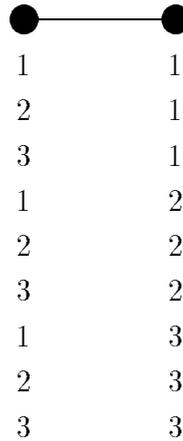
## Annexe B

- **Ordre des états :**

Soit un site d'une chaîne qui peut se trouver dans  $n$  états différents (3 pour des spins 1, 2 pour des spin  $\frac{1}{2}$ ). On va ordonner les états du système global  $|x, y, z \dots\rangle$ , où  $x, y, z \dots$  représentent les positions des différents sites de gauche à droite :

L'état de départ sera  $|1, 1, 1 \dots\rangle$ , ensuite on augmentera  $x$  de 1 à  $n$ . Une fois terminer on augmente  $y$  de 1 et on exécute une nouvelle fois la variation sur les  $x$ . Dès que  $y = n$ , on augmente  $z$  de 1 et on recommence toute la procédure. On continue par récurrence jusqu'à obtenir l'état final  $|n, n, n \dots\rangle$ .

Exemple de 2 spins 1 ( $n=3$ ) :



Remarque :  $n$  représente un nombre quantique, il seront rangés par ordre décroissant. Par exemple pour un spin 1,  $n$  peut prendre 3 valeurs 1, 0,  $-1$ , respectivement notées  $n = 1, 2, 3$ .

- **Couplage de 2 moments :**

Soit  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ , pour obtenir la valeur du spin  $S$ , il suffit d'exécuter  $S = S_1 \oplus S_2$ , c'est à dire :

$$|S_1 - S_2| \leq S \leq |S_1 + S_2|$$

Exemple : pour  $S_1 = S_2 = 1$ , on obtient  $S = 0, 1, 2$ .

- **Produit tensoriel :**

On appellera  $A \otimes B$  :

$$\begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \dots \\ a_{21}B & a_{22}B & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

- **Matrice  $S^z$  pour 2 spin 1 :**

La matrice  $S^z$  pour 1 spin 1 s'écrit (dans la base  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ ) :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

On en déduit alors avec le produit tensoriel la matrice  $S^z$  ( $I$  de dimension  $3 * 3$ ) :

$$S^z = I \otimes S_1^z + S_2^z \otimes I$$

et la matrice s'écrit dans la base :

$$|11\rangle, |21\rangle, |31\rangle, |12\rangle, |22\rangle, |32\rangle, |13\rangle, |23\rangle, |33\rangle$$

$$S^z = \left( \begin{array}{ccc|ccc|ccc} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{array} \right)$$

## Références

- 1- Rajiv R. P. Singh, Martin P. Gelfand, *Ordering and Criticality in Spin-1 Chains*, Physical Review Letters 61,2133 (1988).
- 2- Erik S. Sørensen, A. Peter Young, *Correlation length of the biquadratic spin-1 chain*, Physical Review B 42,754 (1990).
- 3- Tom Kennedy, *Exact diagonalisations of open spin-1 chains*, J. Phys : Condens. Matter 2,5737 (1990).
- 4- U. Schollwöck, T. Jolicoeur, T. Garel, *Physical Meaning of the Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki  $S=1$  Quantum Spin Chain*, Physical Review B (1995).
- 5- Assa Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, chez Springer-Verlag.
- 6- Erik S. Sørensen, Ian. Affleck, *Equal Time Correlations in Haldane Gap Antiferromagnets*, (1993).
- 7- Steven R. White, *Density Matrix Formulation for Quantum Renormalization Groups*, Physical Review Letters 69,2863 (1992).
- 8- Steven R. White, *Density-Matrix algorithms for quantum renormalization groups*, Physical Review B 48,10345 (1993).
- 9- Steven R. White, David A. Huse *Numerical renormalization-group study of low-lying eigenstates of the antiferromagnetic  $S=1$  Heisenberg chain*, Physical Review B 48,3844 (1993).
- 10- Ernest R. Davidson, *The Iterative Calculation of a Few of the Lowest Eigenvalues and Corresponding Eigenvectors of Large Real-Symmetric Matrices*, J. of computational Physics 17,87 (1975).
- 11- Eduardo R. Gagliano, Elbio Dagotto, Adriana Moreo, Fransisco C. Alcaraz, *Correlation fonctions of the antiferromagnetic Heisenberg model using a modified Lanczos method*, Physical Review B 34,1677 (1986).
- 12- S. Eggert, *Thèse de doctorat, University of Wyoming*, Appendice B (1990).