ORSAY
n° d'ordre

UNIVERSITE DE PARIS-SUD
U.F.R. SCIENTIFIQUE D'ORSAY

THESE

Présentée
pour obtenir

Le grade de

DOCTEUR EN SCIENCES
DE L'UNIVERSITE PARIS XI ORSAY

Spécialité Physique Théorique

Par

Ulrich SCHOLLWÖCK

SUJET :

Le groupe de renormalisation numérique dans l'espace réel : application aux chaînes de spin quantiques

Soutenue le 16 juin 1995 devant la Commission d'examen :

MARC GABAY, président
THIERRY JOLICŒUR, directeur de thèse
CLAIRE LHUILLIER, rapporteur
DIDIER POILBLANC
HEINZ-JÜRGEN SCHULZ, rapporteur

Table des matières

Remerciements

Ce mémoire est la synthèse de mes travaux de recherche effectués pendant deux ans au Service de Physique Théorique à Saclay. Tout d'abord j'aimerais remercier Thierry Jolicœur, qui a dirigé ces travaux et m'a initié au domaine des chaînes de spin quantiques.

Je tiens aussi à remercier André Morel et Jean Zinn-Justin qui m'ont accueilli au Service de Physique Théorique.

Au sein du Service, les discussions et le support multiple d'Alain Billoire, Norbert Elstner, Thomas Garel, Olivier Golinelli, Giulia Iori et Robert Lacaze m'ont énormement aidé à mener à bien ce travail.

Des remerciements particuliers vont à David Ko, qui a collaboré avec moi pendant mon séjour à l'Université d'Oxford, et à Bill Newton-Smith, qui m'a donné la possibilité de séjourner encore une fois à Balliol College, Oxford.

Merci aussi à ceux en dehors de ces deux institutions, qui m'ont aidé de multiples façons : R. Chitra, David Huse, Hans-Jürgen Mikeska, Steve Strong, Herbert Wagner, Joachim von Zanthier, Wilhelm Zwerger.

Merci à Claire Lhuillier et Heinz-Jürgen Schulz, qui ont accepté d'être rapporteurs de cette thèse ainsi qu'aux autres membres du jury : Marc Gabay et Didier Poilblanc.

Enfin ma gratitude va au contribuable français à qui je dois le financement de cette thèse.

Présentation générale

Le travail présenté dans ce mémoire porte sur des systèmes quantiques fortement corrélés à une dimension spatiale, qui ont leur origine dans la recherche sur les interactions en matière condensée. Les systèmes fortement corrélés sont caractérisés par le fait que la nature des interactions que l'on trouve ne permet pas d'appliquer les techniques conventionnelles de la théorie de N corps en interaction, qui sont essentiellement des approches perturbatives autour des (quasi)particules libres dans la limite d'une interaction "faible". Les problèmes des théories perturbatives sont aggravés si la dimension du système est basse, comme on le sait des résultats de la théorie quantique des champs. A une dimension spatiale, les effets particuliers auxquels on s'attend devraient alors être les plus visibles.

L'intérêt pour ce type de système a été fortement relancé dans les années quatre-vingts, expérimentalement par la découverte de la supraconductivité à haute température, de l'effet de Hall quantique fractionnaire, des conducteurs et supraconducteurs unidimensionnels, des fermions lourds, des chaînes de spin quantiques avec S plus grand que $1/2$, qui sont tous caractérisés par des corrélations fortes. Du point de vue de la physique théorique, on a vite trouvé que le sujet était plus riche que l'on ne l'attendait, et contenait aussi des belles surprises : l'une des plus célèbres est la conjecture de Haldane[Haldane 83a, Haldane 83b][1] sur le comportement complètement différent des chaînes de spin quantiques à spin entier et à spin demi-entier. Parmi le grand nombre des modèles théoriques, nous allons nous limiter dans cette thèse à une étude des modèles qui incorporent seulement les degrés de liberté de spin et négligent les degrés de liberté liés à la charge. Afin d'étudier ces modèles, nous utilisons une méthode numérique très récente et puissante, le groupe de renormalisation dans l'espace réel utilisant la matrice de densité. Présentons d'abord les problèmes étudiés :

Le spectre des chaînes de spin isotropes à spin entier et demi-entier : le gap de Haldane

Le modèle le plus simple du magnétisme quantique est le modèle de Heisenberg

[1] Dans cette présentation générale, nous ne citons que très selectivement.

isotrope avec des interactions entre les plus proches voisins. A une dimension, il s'écrit

$$H = J \sum_i \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1}$$

où les opérateurs $\mathbf{S}$ sont des opérateurs de spin S quantique. L'échange J détermine la nature du problème : pour $J > 0$, les corrélations sont antiferromagnétiques. Pour $S = 1/2$, le modèle de Heisenberg a été résolu par l'ansatz de Bethe[Bethe 31] ; l'état fondamental non-dégénéré est désordonné et le système est critique : les corrélations sont à (presque) grande portée et diminuent suivant une loi de puissance, et il n'y a pas de gap entre l'état fondamental et les excitations à basse énergie. Ces résultats sont en accord avec le célèbre théorème de Lieb, Schultz et Mattis[Lieb 61] pour $S = 1/2$ et sa généralisation à S demi-entier[Affleck 86a] : le spectre d'une grande classe de problèmes de spin quantique à une dimension a les propriétés décrites ci-dessus ou est caractérisé par une dégénérescence de l'état fondamental, associée à une brisure de symétrie, avec un gap entre les états fondamentaux et les excitations, comme c'est le cas pour le modèle de Majumdar-Ghosh[Majumdar 69]. Bien que ces résultats soient seulement valables pour $S = 1/2$, il était admis qu'ils caractérisent au moins qualitativement le comportement pour S quelconque. Or, l'analyse du modèle de Heisenberg par le modèle σ non-linéaire a indiqué qu'il y a une différence fondamentale entre S entier et S demi-entier. Alors que le comportement pour S demi-entier semble bien décrit par celui pour $S = 1/2$, il en est tout autrement pour S entier : les corrélations suivent une loi exponentielle, il y a un gap entre l'état fondamental et les excitations. Cette analyse, exacte dans la limite semiclassique $S \to \infty$, mais seulement à l'état de conjecture pour S petit, a été confirmée par d'autres études analytiques[Schulz 86a, den Nijs 89], mais qui souffrent toutes aussi d'approximations plus ou moins incontrôlables.

Numériquement[Botet 83, Parkinson 85, Nightingale 86] et expérimentalement [Renard 87], cette conjecture, dite de Haldane, a été confirmée pour $S = 1$, où aucun doute ne reste sur sa validité. Or, aucun résultat sérieux numérique ou expérimental pour $S = 2$ n'a été donné jusqu'à maintenant. L'intérêt des résultats est donné par le fait que le comportement pourrait encore une fois, dans certains aspects, être différent pour des S entiers différents, par exemple les pairs et impairs[Oshikawa 92].

Dans cette thèse, nous donnons (chap. 5.1, 5.2) pour la première fois des estimations sérieuses du gap et de la longueur de corrélation pour $S = 2$. Nos résultats confirment la conjecture de Haldane. En même temps, nous établissons d'autres quantités comme l'énergie du fondamental et la vitesse des ondes de spin, qui s'insèrent bien dans le comportement attendu.

Le modèle de Affleck, Kennedy, Lieb et Tasaki : l'ordre caché des chaînes de spins entiers et leur diagramme de phase

Dans le domaine des systèmes fortement corrélés, le nombre des modèles exactement solubles qui possèdent aussi un intérêt physique, est très limité. Une classe de tels modèles a été découverte par Affleck, Kennedy, Lieb et Tasaki[Affleck 87a, Affleck 88]. Le modèle pour une chaîne de spin 1 s'écrit

$$H_{AKLT} = \sum_i \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \frac{1}{3} \sum_i (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1})^2,$$

et peut être généralisé à un S entier quelconque. Sa solution est caractérisée par un état fondamental, dans lequel le spin S sur chaque site est effectivement décomposé en $2S$ spins $1/2$ symétrisés, qui sont liés en paires avec des spins sur les sites voisins par des liens singlet. Les corrélations antiferromagnétiques diminuent exponentiellement, il y a un gap entre l'état fondamental unique et les excitations. Pour $S = 1$, le modèle AKLT semble alors dans ses propriétés très proche de l'Hamiltonien de Heisenberg. Cette analogie est encore plus profonde ; évoquons ici seulement la présence, dans les deux cas, d'un ordre "caché"[den Nijs 89], qui est effectivement un ordre antiferromagnétique dilué par des sites avec $S_i^z = 0$. Or, le caractère de cet ordre semble être dépendant de S : il existe une symétrie $Z_2 \times Z_2$ cachée brisée pour S impair, mais pas brisée pour S pair. Au moment, il existe des propositions sur un paramètre d'ordre généralisé de celui pour $S = 1$ à S entier, qui n'ont pas encore été vérifiées[Oshikawa 92].

Les résultats que nous obtenons dans le chapitre 5 nous permettent d'établir précisement l'analogie entre le modèle AKLT et le modèle de Heisenberg isotrope pour $S = 2$. Dans le chapitre 5.3 nous examinons un paramètre d'ordre et démontrons qu'il a bien une valeur moyenne non-nulle à grande distance. Ceci ne fait pas de lui nécessairement un paramètre d'ordre ; afin d'examiner cette question, nous étudions dans le chapitre 5.4 le comportement de la phase de Haldane sous l'introduction d'une anisotropie axiale $D(S_i^z)^2$ avec $D > 0$. Cette anisotropie détruit pour grand D l'ordre caché en faveur d'un état fondamental désordonné avec gap et $S_i^z = 0$ pour tout i. Nous trouvons un résultat assez étonnant : Alors que pour $S = 1$ il y a une transition continue entre la phase de Haldane et la phase de grand D, pour $S=2$ il y a une région critique, qui les sépare. Le paramètre d'ordre ne disparaît pas en dehors de la phase de Haldane, et n'est alors pas un bon paramètre d'ordre, dans le sens que l'ordre qu'il décrit ne disparaît que pour $D \to \infty$ et n'est pas sensible aux deux transitions de phase. Le mécanisme trouvé indique que ce résultat se généralise à tout S entier, ce qui introduierait une différence fondamentale entre $S=1$ et $S>1$ pour S entier.

Nous donnons aussi un diagramme de phase qualitatif pour $S=2$ en présence d'une anisotropie $D(S_i^z)^2$ et d'une anisotropie J^z, qui est fortement différent de celui de $S=1$. Le cas $S=2$ est "presque classique" dans le sens que la limite classique du diagramme de phase est facilement comprise à partir de ce diagramme de phase, alors qu'elle n'est pas évidente à partir du diagramme de phase de $S=1$. Si notre conjecture, que les résultats de $S=2$ se généralisent à $S>1$ entier, est correcte, le diagramme de phase pour $S=2$ serait aussi le diagramme de phase générique pour $S>1$ entier.

La chaîne de spin 1 bilinéaire-biquadratique : le modèle AKLT comme point de désordre

Une autre question non abordée dans la littérature est celle de la signification physique du modèle AKLT, ou, autrement dit, y a-t-il un phénomène proprement physique qui serait lié à sa solubilité ? Cette question mène directement à l'investigation de la généralisation du modèle AKLT, la chaîne bilinéaire-biquadratique avec $S=1$.

Ce modèle donné par l'Hamiltonien

$$H_\gamma = \cos\gamma \sum_i \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \sin\gamma \sum_i (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1})^2$$

montre au moins quatre phases différentes en fonction de γ : la phase de Haldane, génériquement décrite par le modèle de Heisenberg ($\gamma=0$) et le modèle AKLT ($\tan\gamma = 1/3$), peut-être une phase trimérisée critique, dont on ne connaît pas le paramètre d'ordre, une phase ferromagnétique et une phase dimérisée avec un gap et deux états fondamentaux dégénérés. Deux questions sont actuellement ouvertes : l'une est de comprendre la nature de la phase trimérisée, l'autre de comprendre les phénomènes associés à la transition entre la phase de Haldane et la phase trimérisée.

Dans le chapitre 6 nous étudions la deuxième question. Nous trouvons que les fluctuations changent de caractère exactement au point AKLT, dont l'importance pour ce diagramme de phase n'était pas encore connue. En même temps, nos résultats permettent de comprendre la nature du point AKLT : il est, dans le langage de la physique statistique classique, un point de désordre de première espèce, caractérisé par un changement du comportement des corrélations à courte portée dans une phase désordonnée, qui voisine deux phases ordonnées avec des corrélations differentes. Des observations comme la réduction dimensionnelle des fonctions de corrélation au point AKLT s'insèrent naturellement dans ce cadre.

Echelle de spins 1/2 quantiques

Le problème de deux chaînes de spin 1/2 couplées (une "échelle de spins") a reçu beaucoup d'attention dans les dernières années à cause de l'existence de quelques systèmes expérimentaux, mais aussi à cause du fait que l'on retrouve, dans certains cas limites, plusieurs modèles differents, qui sont liés continûment dans l'espace des paramètres de l'échelle de spins. Il s'agit notamment de la chaîne de spin 1/2 anisotrope et de la chaîne de spin 1 anisotrope. Une question qui se pose naturellement est celle de la nature de la "transition" entre ces deux limites ; mais le diagramme de phase semble posséder aussi d'autres points d'intérêt, comme un point multicritique[Strong 92, Strong 94].

Dans le chapitre 7, nous présentons d'abord une étude analytique par la bosonisation, et quelque cas limites, pour mieux situer les études numériques. On trouve deux phases ordonnées, avec de l'ordre ferromagnétique et antiferromagnétique, deux phases désordonnés avec gap, et une phase désordonnée critique. Nous examinons numériquement la question de la transition entre les chaînes de spin 1/2 isolées et les cas limites pour un couplage fort entre les chaînes. Nous trouvons que dans les deux cas d'un couplage ferromagnétique et antiferromagnétique, le comportement générique du cas limite est retrouvé déjà pour des couplages très faibles, probablement infinitésimaux. Nous examinons les differentes phases du modèle et notamment la transition vers la phase ferromagnétique, qui est la plus accessible à nos méthodes. Cette étude permet de trancher entre des prédictions contradictoires de la bosonisation et d'un cas limite exactement soluble.

Le groupe de renormalisation numérique dans l'espace réel

Nos résultats ont été obtenus en très grande partie en utilisant la méthode du *groupe de renormalisation numérique dans l'espace réel.* Cette méthode se propose de calculer le spectre à basse énergie d'un système infini de la façon suivante : on prend un petit système, et on ajoute systématiquement les interactions avec des nouveaux sites, et on décrit le système, dont le nombre de degrés de liberté explose, par un petit nombre d'états effectifs. Cette procédure est l'équivalent d'une trajectoire d'un système dans l'espace des couplages généralisés sous des transformations d'échelle. Le grand problème de cette méthode est le bon choix des états effectifs. Cette méthode est, dans certains cas, devenue une méthode très efficace depuis que S. White[White 92a, White 92b] ait établi le lien entre le choix des états et la matrice de densité du système et ait introduit le groupe de renormalisation utilisant la matrice de densité (DMRG = Density Matrix Renormalization Group). Ce progrès décisif repose sur l'observation que la meilleure approximation à un état d'un système est obtenue dans un produit des espaces de Hilbert pour des sous-systèmes qui contiennent les états qui ont le plus de poids dans les matrices de densité obtenues par la projection de l'état du système sur les sous-systèmes. A chaque étape, on projette alors l'état du système total que l'on cherche sur des sous-systèmes (les deux moitiés du système, par exemple), et calcule, à l'aide des matrices de densité, les états des sous-systèmes qui contribuent le plus à la projection. Si l'on suppose que les états à basse énergie d'un grand système montrent seulement une faible dépendance de la longueur totale, les états ainsi trouvés vont aussi contribuer le plus à l'état cherché du système de la prochaine étape, qui est un petit peu plus grand.

Dans cette thèse, nous développons une implémentation de cette méthode, qui est beaucoup plus complexe que d'autres méthodes numériques, décrite dans ses détails dans chap. 1 et 2, et nous l'appliquons systématiquement aux problèmes mentionnés ci-dessus. Nous introduisons notamment un nouveau paramètre de contrôle pour la performance de cet algorithme.

Plan de la thèse

Cette thèse se divise comme suit :

– Le premier chapitre est consacré à une introduction générale au groupe de renormalisation dans l'espace réel : Nous exposons les idées principales, et discutons la portée de la méthode.

- Le deuxième chapitre est consacré à une discussion approfondie de notre implémentation de cette méthode, qui est assez complexe et dont la performance est essentiellement déterminée par des détails de l'implémentation. Dans la littérature, ces problèmes n'ont pas encore été abordés. Le chapitre se termine sur une discussion des moyens informatiques nécessités par cette méthode. *Un lecteur qui ne s'intéresse qu'aux résultats physiques de cette thèse devrait omettre ce chapitre, qui est essentiellement écrit pour un lecteur qui veut utiliser la méthode lui-même.*
- Dans le troisième chapitre, nous exposons la conjecture de Haldane : nous décrivons le mapping sur le modèle σ non-linéaire et les résultats clés sur le spectre des chaînes de spin quantiques qui en suivent.
- Dans le quatrième chapitre, nous introduisons le modèle AKLT et construisons son état fondamental. Nous discutons la nature de ses corrélations, son ordre particulier et ses excitations. Nous terminons ce chapitre sur une discussion des conséquences possibles du modèle AKLT pour les chaînes de spin entier avec une anisotropie axiale.
- Le cinquième chapitre contient nos résultats centraux sur la chaîne de spin 2 : d'abord, nous donnons une analyse approfondie de l'effet des états de bord d'une telle chaîne ouverte, qui peuvent subtilement influencer le résultat. Les résultats ainsi établis nous permettent de procéder à un calcul numérique du gap, qui est beaucoup plus complexe que celui pour $S = 1$, à cause de la petite taille du gap. Ensuite, nous présentons le calcul de la longueur de corrélation, qui nous permet de trouver aussi la vitesse des ondes de spin. Nous démontrons que le paramètre d'ordre proposé pour $S = 2$ a bien une valeur moyenne à grande distance, et étudions son comportement quand une excitation est présente. Enfin, nous étudions le comportement du spectre et du paramètre d'ordre proposé en présence d'une anisotropie axiale du type $D(S_i^z)^2$, ce qui nous permet de montrer que la phase de grand D et la phase de Haldane sont liés pour $S = 2$ d'une façon complètement différente que pour $S = 1$ et d'établir que le paramètre d'ordre proposé n'est pas un paramètre d'ordre, dans le sens suivant : l'ordre associé ne disparaît que pour $D \to \infty$, et non pas dans toute la phase de grand D comme pour $S = 1$. Nos résultats nous permettent d'établir un diagramme de phase générique pour $S > 1$ entier en présence des anisotropies D et J^z, qui est bien différent de celui pour $S = 1$. Le chapitre se termine sur

une revue des résultats qui, ensemble, permettent d'établir que le modèle de Heisenberg isotrope est génériquement décrit par le modèle AKLT aussi pour $S = 2$.

- Dans le sixième chapitre, nous présentons d'abord l'état des connaissances actuelles sur le diagramme de phase de la chaîne de spin 1 bilinéaire-biquadratique. Nous introduisons, de la physique statistique classique, la notion d'un point de désordre et d'un point de Lifshitz. Enfin nous démontrons le rôle du point AKLT dans ce diagramme de phase, et trouvons que la nature physique du point AKLT est d'être exactement un point de désordre.
- Dans le septième chapitre, nous présentons d'abord le calcul de la bosonisation pour l'échelle de spins 1/2 quantiques, afin d'établir une idée générale du diagramme de phase. Ensuite, nous étudions plusieurs questions, notamment la présence d'un gap pour des couplages très faibles entre les chaînes, ainsi que la transition vers le ferromagnétisme dans ce modèle.

Première partie

Méthode : Le groupe de renormalisation dans l'espace réel

Dans cette partie du mémoire, nous allons d'abord exposer les principes fondamentaux du groupe de renormalisation dans l'espace réel utilisant la matrice de densité (appelé, par suite, DMRG) et les formules indispensables à une implémentation de cet algorithme. Cet algorithme est - on va le voir - extrêmement puissant dans beaucoup de cas qui jusqu'alors échappaient à une analyse précise analytique ou numérique. La littérature sur les détails de l'algorithme est presque inexistante, aucun code n'a jamais été rendu accessible, alors que la complexité de cet algorithme est très élevée par rapport à des méthodes comme la diagonalisation exacte ou les simulations Monte-Carlo quantiques : les programmes que nous avons développés sont, sans les commentaires, d'une longueur typique de 3000 à 4000 lignes de FORTRAN ; et beaucoup d'effort doit être porté à une organisation efficace de cet algorithme très consommateur de mémoire vive et de temps de calcul. C'est pourquoi nous allons exposer, dans un deuxième temps, notre implémentation pratique de l'algorithme, bien sûr sans rentrer dans les détails informatiques. Cela devrait permettre aux intéressés d'aboutir rapidement dans l'application de l'algorithme et aussi permettre une compréhension plus approfondie des difficultés possibles auxquelles on peut se heurter comme utilisateur et des limitations de la méthode. Par ailleurs, d'après les quelques informations que nous tenons sur la performance relative des differentes implémentations, notre implémentation semble être très efficace. Répétons qu'un lecteur intéressé seulement par les résultats physiques peut facilement omettre ce chapitre destiné aux lecteurs qui veulent utiliser cette méthode eux-mêmes.

Chapitre 1

L'algorithme du groupe de renormalisation utilisant la matrice de densité (DMRG)

1.1 Le groupe de renormalisation dans l'espace réel

Pour mettre au point le problème que nous voulons résoudre et mettre en évidence les difficultés auxquelles on se heurte, commençons par un modèle général, un Hamiltonien quantique H, qui décrit une chaîne de longueur L où chaque site a N degrés de liberté. Les degrés de liberté des sites (que nous allons aussi appeler "spins" sans nécessairement penser à des vrais spins) interagissent seulement à courte portée. En général, ce problème à L^N degrés de liberté ne peut pas être résolu de manière simple.

Kadanoff[Kadanoff 66] a proposé en 1966 un algorithme pour réduire ce problème à un problème plus faisable par décimation des degrés de liberté en formant des blocs de spin : on forme un bloc de n spins (qui sera le nouveau spin) et réduit les N^n degrés de liberté à N en donnant au nouveau spin une valeur dépendante de la configuration originale $\{S_j\}$ des spins appartenant au bloc i :

$$S_i' = f(S_{j \in \text{bloc } i}) \tag{1.1}$$

Mettons-nous à une température finie T. Pour construire l'Hamiltonien H' au nombre réduit des degrés de liberté, qui a les mêmes propriétés physiques que H

nous demandons l'égalité des fonctions de partition $Z(H)$ et $Z'(H')$:

$$\sum_{\{S'_i\}} \exp -(H'(\{S'_i\})/k_bT) = \sum_{\{S_j\}} \exp -(H(\{S_j\})/k_bT). \tag{1.2}$$

Les sommes portent sur tous les blocs et spins respectivement. Ceci permet d'obtenir l'expression suivante formelle pour H', où la somme porte sur toutes les configurations de spins $\{S_j\}$ possibles :

$$\exp -(H'(\{S'_i\})/k_bT) = \sum_{\{S_j\}} \prod_i \delta(S'_i - f(S_{j\in \text{bloc } i})) \exp -(H(\{S_j\})/k_bT) \tag{1.3}$$

En général, l'Hamiltonien H' aura des interactions beaucoup plus complexes que l'Hamiltonien original H. On tronque alors de façon arbitraire les interactions générées. C'est ici que l'approximation intervient, de façon incontrôlable, et les résultats sont généralement décevants.

Reformulons pour $T = 0$: le système est complètement décrit par son état fondamental (supposons qu'il n'est pas dégénéré). Procédant de la même manière, afin de déterminer l'état fondamental d'un système simplifié, nous diagonalisons l'Hamiltonien qui décrit un bloc de n spins et retenons N de N^n états, et reconstruisons l'interaction entre blocs en utilisant

$$\epsilon'_{i,i'}|i_A\rangle\langle i'_B| = \sum_{j,j'} \langle j_A|i_A\rangle\langle i'_B|j'_B\rangle(\epsilon_{j,j'}|j_A\rangle\langle j'_B|) \tag{1.4}$$

où $|i_A\rangle$ est un des états retenus dans un bloc A et $|i'_B\rangle$ dans un bloc B, alors que $|j_A\rangle$ et $|j'_B\rangle$ sont les états originaux des spins dans les blocs. L'interaction entre les spins originaux des deux blocs est donnée par $\epsilon_{j,j'}|j_A\rangle\langle j'_B|$. Ici l'approximation intervient au moment du choix des états à retenir. Le choix évident serait de retenir les états à plus basse énergie dans chaque bloc, en supposant qu'ils contribueront le plus à l'état fondamental du système entier.

Après une première application réussie de cet approche (dans une forme beaucoup plus sophistiquée) au problème Kondo à une dimension par Wilson[Wilson 75] en 1975, la méthode tomba vite en désuétude.

En 1992 White et Noack réalisèrent les défaillances de cet approche[White 92a] et réussirent à apporter des solutions[White 92b, White 93b]. Il s'agit du problème de la *troncation optimale* (qui sera résolu à l'aide de la matrice de densité) et de la *croissance optimale* : la croissance géometrique impliquée par la méthode des blocs de spin est trop rapide et ne tient pas compte des effets de bord, au moins dans la version la plus simple.

1.2 Algorithme de croissance et de troncation de l'espace des états

1.2.1 Algorithme de croissance

Pour expliquer l'algorithme du groupe de renormalisation de la matrice de densité nous suivons un chemin différent de la littérature courante (surtout [White 93b]).

Nous partons d'un problème de diagonalisation exacte : soit un Hamiltonien pour une chaîne *ouverte* de longueur L_0 avec N états par site. Pour trouver l'état fondamental et les excitations les plus basses, il faut diagonaliser au moins partiellement une matrice de taille $N^{L_0} \times N^{L_0}$; pour minimiser des effets de taille finie, il est souhaitable (dans un système non-critique) d'atteindre $L_0 \gg \xi$. La croissance géométrique de la taille de la matrice à diagonaliser limite sérieusement L_0, et même avec une forte croissance des moyens informatiques, il est peu plausible que des progrès soient à attendre de ce côté-là.

L'idée est maintenant de partir d'un système A de taille $L \ll L_0$, qui peut facilement être diagonalisé, et de diagonaliser des systèmes A de taille croissante $L \to L_0$, avec une croissance linéaire (non géométrique), et de retenir à chaque étape seulement M états du système diagonalisé. Si l'on imagine une croissance d'un site par étape, on a à choisir M états parmi MN états.

L'approche naïve serait effectivement de former le nouveau système en ajoutant un site au système actuel A :

$$A \leftarrow A + \bullet, \tag{1.5}$$

ce qui rencontre quand même une difficulté sérieuse : les états de plus basse énergie que l'on va retenir (ne disposant d'autre information) ne sont pas ceux qui contribuent le plus à la projection de l'état fondamental du système complet sur le petit système que l'on traite actuellement. La raison est que A, alors qu'il forme une partie d'un système beaucoup plus grand, est traité comme isolé.

L'hypothèse fondamentale du DMRG est maintenant la suivante : *Pour $L \to \infty$, la projection de l'état fondamental (ou n'importe quel état à basse énergie) d'un système de longueur L sur un sous-système de longueur $L' \ll L$ sera, dans une première approximation, peu dépendante de L.* Un choix fait pour les états importants (qui contribuent le plus à l'état du système entier qu'on cherche) d'un *sous*-système seulement est optimal dans le sens que la contribution des états sera approximativement la même pour les grands systèmes de longueur L et, disons, $L+2$, et l'information ainsi obtenue pour le système de longueur L sera donc une bonne approximation pour le système de longueur $L+2$.

On va alors construire des systèmes de plus en plus longs, mais, dans le choix des états à retenir, ne considérer que des sous-systèmes dont est composé le système total. Une procédure possible (que nous allons utiliser par la suite) est de construire un grand système B de sous-systèmes A comme

$$B = A + \bullet + \bullet + A, \tag{1.6}$$

où la longueur des sous-systèmes A est L', $\bullet$ est un site (nous en ajoutons deux pour ne pas rencontrer des problèmes de parité ; pensons, par exemple, au fait que l'état fondamental d'une chaîne de spin isotrope antiferromagnétique fermée de longueur paire est un singlet de parité impaire, et d'une chaîne de longueur impaire un triplet de parité paire), et donc la longueur totale $L = 2L' + 2$. Le sous-système A est décrit par M états, le système B alors par M^2N^2 états. C'est ici que réside une limitation du DMRG : alors que L peut être choisi à volonté (au moins en principe), M est limité par le fait qu'une matrice de taille $M^2N^2 \times M^2N^2$ doit être diagonalisable par une méthode comme la diagonalisation itérative de Lanczos avec les moyens disponibles, pour pouvoir effectuer la troncation de l'espace d'états. Ceci implique aussi indirectement une limitation de L : A cause des troncations successives, on accumule à chaque étape une erreur dans la description du système, qui va alors augmenter avec L. On est alors, pour garder une précision suffisante des quantités globales, forcé d'augmenter M, ce qui réduit l'erreur.

Un nouveau sous-système A' est maintenant formé comme $A' = A + \bullet$, décrit par MN états. Après troncation, il sera décrit par M états, et l'algorithme peut recommencer avec $L' \leftarrow L' + 1$ et $L \leftarrow L + 2$ pour le nouveau système $B' = A' + \bullet + \bullet + A'$. On continue jusqu'à ce que B ait la taille souhaitée.

Notons que cet algorithme de croissance élimine des effets de bord dans la mesure où les nouveaux sites sont ajoutés au milieu de la chaîne. Mais il reste le problème que nous venons de décrire un système ouvert, alors qu'on aimerait souvent étudier un système fermé : ceci n'est pas possible avec cet algorithme, si l'on veut retenir une précision suffisante[White 93b]. On peut construire des systèmes fermés, mais la précision baisse de plusieurs ordres de grandeur. L'algorithme est très sensible à la structure topologique : *deux* nouvelles interactions à chaque bord des sous-systèmes font que la troncation est beaucoup moins efficace, un effet empiriquement observé, mais théoriquement pas encore compris.

1.2.2 Prescription de troncation

Il reste à définir la *prescription de troncation.* On choisit d'abord un état que l'on veut calculer pour le système final, par exemple, l'état fondamental. Nous appelons cet état *l'état visé.* A chaque étape, on le calcule pour le système B de longueur L dans la base de produit (incomplète) des bases des blocs et des nouveaux sites. Maintenant, on garde les M états de $A' = A + \bullet$ qui ont le poids le plus grand dans la projection de l'état visé (l'état fondamental) de B sur $A+\bullet$. Ce choix est optimal dans la mesure où notre hypothèse fondamentale est vraie : ce sont ces états qui contribueront aussi le plus à la projection de l'état visé de B' sur A', et ce sont ces états que nous cherchons.

Ecrivons l'état fondamental (ou un autre état) de B ("l'univers" dans la thermodynamique) decomposé dans un produit d'états de A' ("le système") et d'états de $B \setminus A'$ ("l'environnement")

$$|\Psi\rangle_B = \sum_{i=1}^{MN} \sum_{j=1}^{MN} \psi_{ij} |i\rangle_{A'} |j\rangle_{B\setminus A'}, \tag{1.7}$$

où $\{|i\rangle\}$ est une base de longueur MN de l'espace de Hilbert pour A', et $\{|j\rangle\}$ une base de la même longueur de $B \setminus A'$. On écrit maintenant tentativement pour un état fondamental approximatif

$$|\Psi\rangle_B^{approx} = \sum_{\alpha=1}^{M} \sum_{j=1}^{MN} a_{\alpha j} |\alpha\rangle_{A'} |j\rangle_{B\setminus A'}, \tag{1.8}$$

où $\{|\alpha\rangle\}$ est un ensemble de M états orthonormaux dans l'espace de Hilbert de A' encore indéterminés :

$$|\alpha\rangle_{A'} = \sum_{i=1}^{MN} u_{\alpha i} |i\rangle_{A'}. \tag{1.9}$$

On demande maintenant, afin de les déterminer, la meilleure approximation possible à l'état fondamental $|\Psi\rangle$ avec M tels états. Ceci est équivalent au choix de $u_{\alpha i}$ qui minimise

$$\parallel |\Psi\rangle_B - |\Psi\rangle_B^{approx} \parallel^2 = 1 - 2 \sum_{\alpha i j} \psi_{ij} a_{\alpha j} u_{\alpha i} + \sum_{\alpha j} a_{\alpha j}^2. \tag{1.10}$$

La stationnarité par rapport à $a_{\alpha j}$ donne $\sum_i \psi_{ij} u_{\alpha j} = a_{\alpha j}$. On trouve alors

$$\| \, |\Psi\rangle_B - |\Psi\rangle_B^{approx} \, \|^2 = 1 - \sum_{\alpha i i'} u_{\alpha i} \rho_{ii'} u_{\alpha i'} \tag{1.11}$$

qui doit être stationnaire pour le minimum global de $\| \, |\Psi\rangle_B - |\Psi\rangle_B^{approx} \, \|^2$. Nous avons introduit la *matrice de densité réduite*

$$\rho_{ii'} = \sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j} \tag{1.12}$$

bien connue (voir par exemple [Feynman 72]) de la thermodynamique où elle sert à séparer le système de l'environnement. Ici elle est la projection de l'état $|\Psi\rangle$ sur A'. Il suit de (1.12) que les valeurs propres d'une matrice de densité sont toutes réelles, $0 \leq \lambda_i \leq 1$ et $\sum \lambda_i = 1$. Pour les minima de (1.11) l'expression à droite sera stationnaire. Utilisant la condition de Ritz et Rayleigh sur la stationnarité de $\langle\psi|T|\psi\rangle / \langle\psi|\psi\rangle$ pour les vecteurs propres d'une matrice symétrique T et la non-négativité des valeurs propres de ρ, on démontre facilement que pour les minima de (1.11) les vecteurs $|\alpha\rangle = \sum_{i=1}^{MN} u_{\alpha i} |i\rangle$ sont donnés par *les vecteurs propres de la matrice de densité réduite.* Afin de choisir parmi les minima le minimum global, nous insérons M des vecteurs propres de ρ dans (1.11) et considérons cette expression dans la base des vecteurs propres de la matrice de densité :

$$\| \, |\Psi\rangle_B - |\Psi\rangle_B^{approx} \, \|^2 = 1 - \sum_{\alpha=1}^{M} \lambda_\alpha, \tag{1.13}$$

où on somme sur les M valeurs propres λ_α des vecteurs propres choisis. Afin d'obtenir le minimum global, nous choisissons les M valeurs propres les plus grandes de la matrice de densité. *La prescription de troncation est alors de retenir les M états propres de la matrice de densité réduite qui possèdent les valeurs propres les plus grandes.*

1.2.3 Bons nombres quantiques du DMRG

Les états propres de la matrice de densité réduite possèdent une autre propriété importante : Prenons un opérateur quantique $\hat{Q}$, qui commute avec l'Hamiltonien H_B du système B. Il y a alors un "bon" nombre quantique :

$$Q(|\psi\rangle)|\psi\rangle = \hat{Q}|\psi\rangle \tag{1.14}$$

avec $|\psi\rangle$ un état propre de H_B. Supposons en plus que $\hat{Q}$ est *additif* dans le sens qu'il se décompose comme $\hat{Q} = \sum_i \hat{Q}_i$, où les $\hat{Q}_i$ commutent et agissent sur le site i seulement. En particulier, si B se décompose dans des sous-systèmes A_L et A_R (moitiés gauche et droite), l'opérateur peut être décomposé en $\hat{Q} = \hat{Q}_{A_L} + \hat{Q}_{A_R}$, qui agissent sur la moitié gauche et droite respectivement. Les exemples les plus importants sont l'aimantation totale $\sum_{i=1}^{L} S_i^z$ pour les systèmes de spins et fermions isotropes et le nombre total de particules dans un système pour les systèmes fermioniques avec conservation du nombre des particules ; un contre-exemple est l'impulsion k, qui est ni additif ni un bon nombre quantique lorsque nous travaillons avec des chaînes ouvertes.

Si maintenant les états $|i\rangle$ et $|j\rangle$, qui décrivent A_L et A_R, sont des états propres de $\hat{Q}_{A_L}$ et $\hat{Q}_{A_R}$, les états propres des matrices de densité réduites respectives sont aussi des états propres de $\hat{Q}_{A_L}$ et $\hat{Q}_{A_R}$.

Cette propriété suit immédiatement de

$$Q(|i\rangle) \neq Q(|i'\rangle) \Rightarrow \rho_{ii'} = 0, \tag{1.15}$$

où $|i\rangle$, $|i'\rangle$ sont des états de A_L (nous nous limitons à discuter le cas de la moitié gauche de la chaîne) pour lesquels $Q(|i^{(')}\rangle)$ sont des bons nombres quantiques avec $Q(|i\rangle)|i\rangle = \hat{Q}_{A_L}|i\rangle$: si (1.15) est vérifié, la diagonalisation de la matrice de densité a lieu pour des sous-matrices à Q fixe. (1.15) suit de la définition de la matrice de densité (1.12) : $\psi_{ij}\psi_{i'j}$ est nul sauf si $Q(|i\rangle)+Q(|j\rangle) = Q(|i'\rangle)+Q(|j\rangle) = Q(|\psi\rangle)$, donc si $Q(|i\rangle) = Q(|i'\rangle)$, $|\psi\rangle$ étant un état propre de $\hat{Q}$ et $|j\rangle$ des états propres de $\hat{Q}_{A_R}$. Notons que les les états $|i\rangle$, $|j\rangle$ sont automatiquement des états propres de $\hat{Q}_{A_L}$ et de $\hat{Q}_{A_R}$, si on les choisit ainsi à la première étape de l'algorithme ; par suite ils le sont par construction.

On peut alors se limiter à travailler dans des sous-espaces de l'espace de Hilbert correspondants à la valeur totale du nombre quantique pour le système entier. L'avantage est double : on réduit la densité d'états du système, ce qui facilite la diagonalisation de B du point de vue numérique. En plus, des méthodes comme la diagonalisation de Lanczos sont sensiblement plus rapides pour l'état fondamental d'un spectre que pour les autres états. Pour la première excitation d'une chaîne de spins on va alors considérer plutôt l'état fondamental dans l'espace $S^z_{total} = \pm 1$ que la première excitation dans l'espace $S^z_{total} = 0$. De plus, au moment de la construction de l'Hamiltonien on peut exclure un grand nombre d'éléments de matrice qui correspondent à des transitions interdites qui ne conservent pas le nombre quantique, ce qui réduit le temps de calcul pour le produit de l'Hamiltonien avec un vecteur d'état. Ce calcul domine la performance de l'algorithme. Typiquement, l'algorithme est accéléré d'un facteur entre 10 et 100, si l'on utilise

état	énergie
$S = 0, S^z_{total} = 0$	-96.447030
$S = 1, S^z_{total} = 1$	-96.163422
$S = 1, S^z_{total} = 0$	-96.163199
1. exc. (sans Q)	-96.163199

TAB. 1.1: *Comparaison entre les énergies de l'état fondamental et de la première excitation obtenues par des méthodes différents. Chaîne de spin 2 isotrope ;* $L = 22$; $M = 50$.

une loi de conservation pour S^z_{total}.

On pourrait aussi imaginer une amélioration de la description du système (et alors la précision) pour des états dégénérés (comme l'excitation triplet d'une chaîne des spins), dont la dégénérescence est levée dans un tel sous-espace, parce que les M états retenus servent à la description d'un seul état au lieu d'un ensemble. Ceci n'est pas le cas : l'algorithme commence par choisir un état $|\psi\rangle$ pour le système le plus court au début. Les choix suivants des états de base $|\alpha\rangle$ pour la description du système seront optimisés (par construction) pour la représentation de cet état ; les autres états dégénérés orthogonaux ne seront décrits qu'indirectement par $M_{eff} < M$ états. Nous allons voir plus bas que le DMRG est *variationnel* dans les sens que les énergies obtenues baissent de manière monotone vers la valeur exacte quand $M \to \infty$. La dégénéréscence sera alors levée : ces autres états montent en énergie par rapport à l'état choisi, ce qui renforce l'effet que nous venons de décrire.

Pour l'état triplet mentionné ci-dessus, on peut démontrer que la différence que l'on trouve entre l'énergie de l'état le plus bas avec $S^z_{total} = 1$ (la première excitation) et le premier état excité trouvé sans utilisation du nombre quantique (un deuxième état) est la même que celle entre l'état $S = 1, S^z_{total} = 1$ (un premier état) et $S = 1, S^z_{total} = 0$ (un deuxième état) et alors entièrement due au fait qu'on calcule dans l'un cas l'état le plus bas dans un sous-espace ($S^z_{total} = 1$), dans les autres un deuxième état (résultats dans le tableau 1.1 pour une chaîne de spin 2 isotrope de longueur $L = 22$ avec $M = 50$).

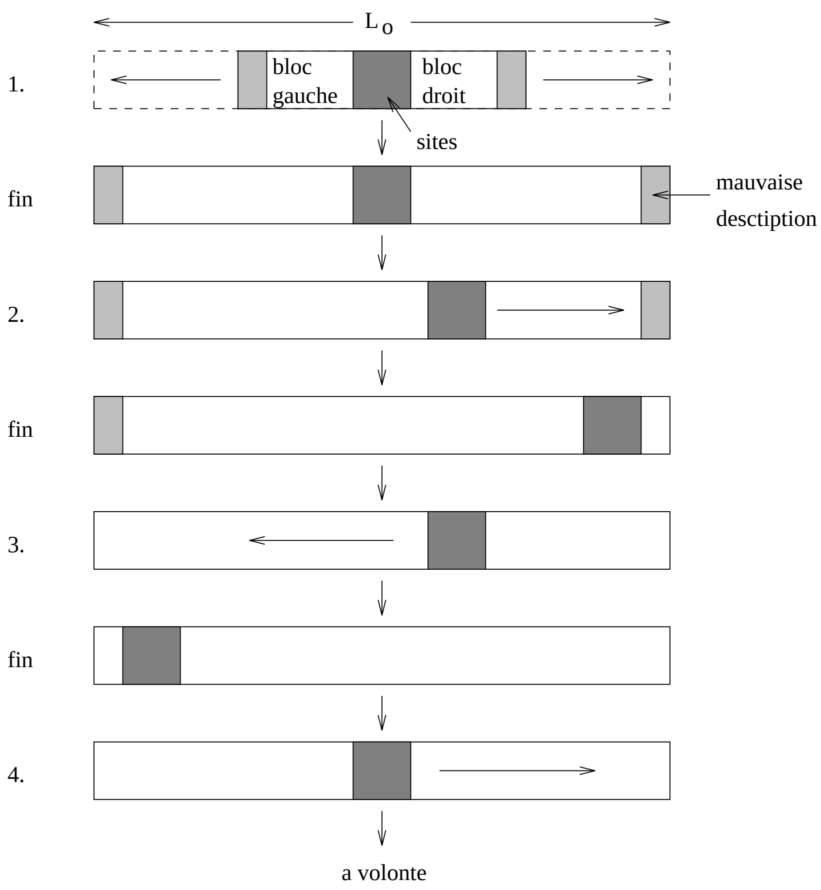

FIG. 1.1: *Représentation graphique des étapes de l'algorithme de taille finie. La partie grise foncée représente les nouveaux sites ; la partie grise indique la description mal adaptée aux bouts, si elle a lieu.*

1.2.4 Algorithme de taille finie

Avec le noyau de l'algorithme décrit ci-dessus on peut calculer des propriétés des chaînes de taille infinie : on augmente L à volonté. Or, il est évident que cet algorithme dit de *taille infinie* a une défaillance : aux premières étapes avec des petits systèmes, la troncation ne va pas nécessairement choisir les meilleurs états, parce que la projection des états visés sur les sous-systèmes varie encore sensiblement avec L (typiquement, jusqu'à ce que $L \approx \xi$) ; l'hypothèse fondamentale du DMRG n'est pas bien vérifiée. Comme les premières étapes de l'algorithme calculent les bords du système, on obtient une bonne description du centre, mais pas des bords. Si l'on s'intéresse alors à des propriétés globales d'un système comme l'énergie totale du système (par exemple, afin de calculer le gap du spectre), l'algorithme de taille infinie va introduire des erreurs systématiques dans les extrapolations.

White a proposé[White 92b, White 93b] un algorithme dit de *taille finie* pour améliorer la troncation aux bords : on recalcule la troncation pour les sous-systèmes petits en utilisant l'information approximative que l'on a obtenue pour le système de longueur maximale. Maintenant, le sous-système petit se trouve au bord d'un système beaucoup plus grand que pendant la première troncation, et l'hypothèse est mieux vérifiée. On peut, pour une longueur finale du système L_0, formaliser cette approche ainsi (voir fig. 1.1) :

1. *Algorithme de taille infinie :* Croissance du système jusqu'à la taille maximale L_0. Il faut garder en plus toute l'information sur la structure des blocs A intermédiaires : Si H_A est l'Hamiltonien du bloc A, et $\{|m\rangle\}$ la base de A, il faut garder $\langle m|H_A|m'\rangle$, les bons nombres quantiques $Q(|m\rangle)$ et aussi $\langle m|O_i|m'\rangle$, où O_i sont tous les opérateurs qui interviennent dans la construction de l'interaction de A avec le reste du système. A la fin de cette partie de l'algorithme, nous avons des blocs gauche et droit de longueur $L_0/2$.

2. On continue à augmenter la taille du bloc gauche tout en gardant la longueur totale du système L_0. Le bloc droit va diminuer ; pour construire l'Hamiltonien du système asymétrique, on utilise l'information gardée dans (1.). On garde l'information sur le bloc gauche, et continue jusqu'à ce que le bloc droit soit tellement petit que l'information sur lui vient d'une diagonalisation exacte. Jusqu'ici on n'a pas gagné de précision, on en perd même un peu à cause des erreurs de calcul numériques.

0. itération	-277.190606
1. itération	-277.201845
2. itération	-277.201878

TAB. 1.2: *Energies de la première excitation d'une chaîne de spin 2 ouverte de longueur $L = 60$ avec $M = 50$ en dépendence du nombre d'itérations.*

3. Maintenant, on augmente la taille du bloc droit, et réduit la taille du bloc gauche pour garder L_0 de la même façon que dans (2.). Le bloc droit est alors couplé à un système beaucoup plus grand que pendant sa construction en (1.), et la troncation va s'améliorer, et donner une description plus précise du système. Pour la construction de l'Hamiltonien on utilise l'information sur le bloc gauche, jusqu'à ce que le bloc droit ait atteint la taille $L_0/2$. Dans un système symétrique, le choix optimal pour les états est le même pour un bloc gauche que pour un bloc droit. On va alors remplacer l'information du bloc gauche par l'information améliorée sur le bloc droit. On continue, jusqu'à ce que le bloc gauche soit devenu exactement soluble.

4. On recommence par (2.) et on augmente la taille du bloc gauche ...

Si l'on mesure l'énergie totale du système, on observe une baisse, ce qui correspond à une description améliorée (tableau 1.2). On peut s'arrêter chaque fois où on a deux blocs de taille égale et utiliser l'information obtenue sur un bout de la chaîne pour décrire l'autre bout ; ainsi, on améliore les deux bouts en même temps. Typiquement, les améliorations saturent après deux où trois "balayages" et sont submergées par des erreurs numériques. La saturation est rapide, car l'effet de correction vient surtout de la grande taille du système total et pas de la description un peu améliorée du système total après un ou plusieurs "balayages".

Pour des systèmes très grands, on trouve que l'algorithme de taille finie n'améliore pas seulement la représentation des bouts, mais aussi celle du centre ; pour une chaîne longue les petites corrections en énergie qui en découlent excèdent dans leur somme les corrections des bouts et on observe une dépendence linéaire de la baisse en énergie de la longueur du système, parce que les petites corrections à chaque site du centre deviennent (approximativement) constantes.

Pour une longueur croissante du bloc (disons, gauche) les corrections diminuent, parce que la représentation originale était déjà mieux. Or, pour un sous-système grand, la troncation à chaque étape devient approximativement indépendante de la longueur du sous-système, car l'hypothèse fondamentale est de mieux en mieux vérifiée. Il y a alors un minimum non-nul des corrections à l'énergie, qui est ajouté à chaque étape au milieu d'un système très grand. La linéarité devient d'autant plus claire que M est grand : Pour des M grands les erreurs de troncation au début de l'algorithme sont plus petites par rapport à l'erreur de troncation au milieu du système.

1.3 Calcul des observables physiques

Dans sa version primitive, le DMRG ne donne d'information que sur l'énergie locale et totale du système. Il est possible de calculer à partir de l'état du système, $|\psi\rangle$, des valeurs moyennes pour des observables, des fonctions de corrélation etc. Ce calcul est un tout petit peu plus astucieux que dans d'autres algorithmes, car la base tronquée de l'espace de Hilbert change à chaque étape. Il faut procéder en trois temps, que je vais appeler *construction*, *transformation* et *évaluation*. Il faut faire distinction entre valeurs moyennes à un point et valeurs moyennes à plusieurs points. Pour les valeurs moyennes à plusieurs points, il faut considérer séparément les contributions qui viennent de la moitiè gauche et de la moitié droite de la chaîne.

Nous considérons un opérateur O de la forme $O = O_1 O_2 \dots O_{n-1} O_n$, et supposons que tous les O_i commutent et que les O_i sont des opérateurs locaux agissant sur un seul site (les corrélations standards que l'on regarde rentrent dans ce cas-là). On se propose de calculer

$$\langle\psi|O_1 \dots O_n|\psi\rangle \equiv \langle\psi|O_L O_R|\psi\rangle, \tag{1.16}$$

où $|\psi\rangle$ est un état du système total (état fondamental, première excitation). Dans O_L et O_R nous avons regroupé tous les opérateurs agissant sur la moitié gauche (droite). On calcule alors :

1. *Construction :* $O_k(1 \leq k \leq n)$ est localisé sur le site i. Quand le site i est ajouté au bloc A nous connaissons

$$\langle n|O_k|n'\rangle \tag{1.17}$$

   pour tous les états $|n\rangle$ du site i. Il faut maintenant distinguer deux cas :

   - O_k est le premier ou le seul opérateur dans O_L (on procède en analogie pour le bloc droit). Si $|\tilde{m}\rangle$ sont tous les états retenus pour le bloc

$A' = A + \bullet$ et $|m\rangle$ ceux pour A, on obtient

$$\langle \tilde{m}|O_k|\tilde{m}'\rangle = \sum_{mnn'} \langle \tilde{m}|mn\rangle\langle n|O_k|n'\rangle\langle mn'|\tilde{m}'\rangle, \tag{1.18}$$

où $\langle \tilde{m}|mn\rangle$ est donné par les vecteurs propres de la matrice de densité réduite pour A'.

- O_k est précédé par $O_1 \ldots O_{k-1}$ (ou $O_{k+1} \ldots O_n$ pour la moitié droite). Supposons que l'on connaisse $\langle m|O_1 \ldots O_{k-1}|m'\rangle$ (avec les mêmes définitions qu'avant). Alors on calcule

$$\langle \tilde{m}|O_1 \ldots O_k|\tilde{m}'\rangle = \sum_{mm'nn'} \langle \tilde{m}|mn\rangle\langle m|O_1 \ldots O_{k-1}|m'\rangle\langle n|O_k|n'\rangle\langle m'n'|\tilde{m}'\rangle. \tag{1.19}$$

2. *Transformation :* A chaque étape de l'algorithme les états $|m\rangle$ changent. On transforme *approximativement* dans la nouvelle base en insérant deux fois la décomposition de l'identité :

$$\begin{aligned} \langle \tilde{m}|O_1 \ldots O_k|\tilde{m}'\rangle &= \sum_{mm'nn'} \langle \tilde{m}|mn\rangle\langle mn|O_1 \ldots O_k|m'n'\rangle\langle m'n'|\tilde{m}'\rangle \\ &= \sum_{mm'n} \langle \tilde{m}|mn\rangle\langle m|O_1 \ldots O_k|m'\rangle\langle m'n|\tilde{m}'\rangle, \end{aligned} \tag{1.20}$$

car $O_1 \ldots O_k$ ne dépend pas des états $|n\rangle$ du nouveau site (s'il y a un O_i agissant dessus, on procéde comme en 1.). L'approximation vient du fait qu'en passant de $|mn\rangle$ à $|\tilde{m}\rangle$ on divise le nombre d'états par un facteur N.

3. *Evaluation :* Quand la chaîne a atteint sa taille finale, il y aura les états $\{|m_L\rangle\}$ afin de décrire la moitié gauche et $\{|m_R\rangle\}$ pour la moitié droite. Nous connaissons maintenant $\langle m_L|O_L|m'_L\rangle$ et $\langle m_R|O_R|m'_R\rangle$ (ou l'un des deux pour un opérateur agissant seulement sur une moitié de la chaîne). On insert deux fois la décomposition de l'identité :

$$\begin{aligned} &\langle \psi|O|\psi\rangle \\ =& \sum_{m_L m_R m'_L m'_R} \langle \psi|m_L m_R\rangle\langle m_L m_R|O_L O_R|m'_L m'_R\rangle\langle m'_L m'_R|\psi\rangle \qquad (1.21) \\ =& \sum_{m_L m_R m'_L m'_R} \langle \psi|m_L m_R\rangle\langle m_L|O_L|m'_L\rangle\langle m_R|O_R|m'_R\rangle\langle m'_L m'_R|\psi\rangle \end{aligned}$$

Dans le cas où $O \equiv O_L$, on obtient (et de façon analogue pour $O \equiv O_R$)

$$\langle \psi|O|\psi\rangle = \sum_{m_L m_R m'_L} \langle \psi|m_L m_R\rangle\langle m_L|O_L|m'_L\rangle\langle m'_L m_R|\psi\rangle. \tag{1.22}$$

Remarquons que si l'opérateur n'agit que sur une moitié, on *ne calcule pas* $\langle m_L|O_i|m'_L\rangle$ séparément pour chaque i et alors

$$\langle\psi|O|\psi\rangle = \sum_{m_L m_R m'_L} \langle\psi|m_L m_R\rangle\langle m_L|O_1|m'_L\rangle \ldots \langle m_L|O_n|m'_L\rangle\langle m'_L m_R|\psi\rangle. \tag{1.23}$$

Cette expression est en général fausse : Elle ne tient pas compte du fait que l'opérateur O_L factorise dans l'espace de produit des espaces d'états pour chaque site, mais en général pas dans la base $\{|m_L\rangle\}$. Par contre, notre approche calcule le produit des opérateurs utilisant la factorisation dans un espace de produit où elle est vérifiée.

1.4 Contrôles de précision et de faisabilité

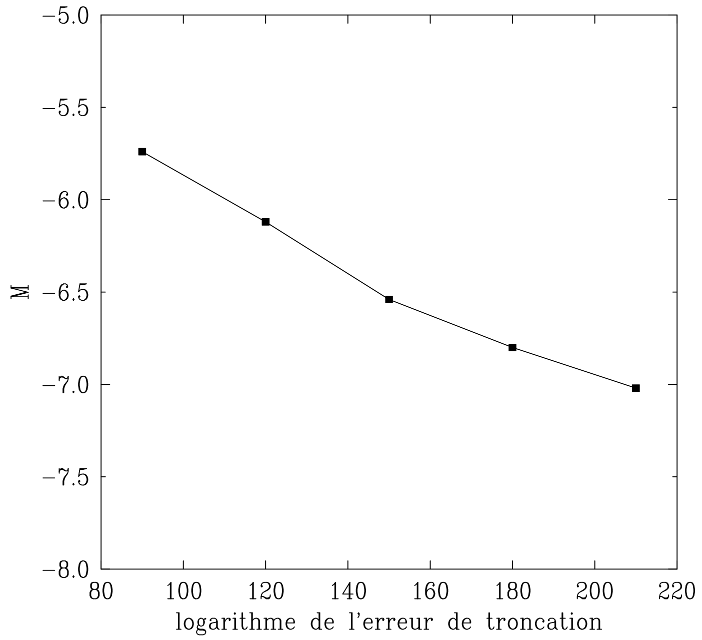

FIG. 1.2: *Logarithme (base 10) de l'erreur de troncation $\rho_1(M)$ en fonction de M pour le fondamental d'un système de spin 2 avec gap.*

Les approximations du DMRG interviennent à un seul endroit : La troncation d'états mène à un espace de Hilbert très réduit. Il y a deux aspects à cela : L'un, souvent discuté, est la perte d'information à cause de la réduction de l'espace des états *pour la chaîne actuellement sous considération.* L'autre, plus subtil, est dû *à la perte de pertinence de l'information retenue* : Les états considérés comme importants ne le sont peut-être pas pour la chaîne de l'étape prochaine. Nous allons essayer de donner un critère utile qui permet d'estimer l'influence de cet effet, pas encore discuté dans la littérature.

1.4.1 L'erreur de troncation ρ_1

Le premier aspect est mesuré par *l'erreur de troncation*[White 92b, White 93b]

$$\rho_1(M) = 1 - \sum_{\alpha=1}^{M} \lambda_\alpha \to 0 \qquad (M \to \infty), \tag{1.24}$$

la somme des valeurs propres des états propres de la matrice de densité *non* retenus pour l'étape suivante. Nous allons la trouver normalement entre 10^{-5} et 10^{-12} ; elle donne la fraction de la projection de l'état visé que l'on néglige à chaque étape. Sa valeur très petite explique probablement le succès du DMRG. Elle a les propriétés suivantes :

1. ρ_1 décroit presque exponentiellement avec M pour des systèmes avec gap (figure 1.2), en loi de puissance pour des systèmes critiques[Bursill 95]. Cette loi semble dépendre de la densité d'états à basse énergie. Aucun résultat exact n'est connu.

2. Dans une application de l'algorithme ρ_1 croît avec L pour atteindre une valeur limite. Pour un système court, peu d'états suffisent pour donner une bonne approximation. Pour des systèmes très grands, on rencontre un effet de saturation : les systèmes de longueurs différentes deviennent approximativement identiques, on opère la même troncation. La valeur caractéristique (donnée pour tous les calculs par suite) est alors l'erreur de la dernière troncation.

3. Il y a une dépendence linéaire pour des grands systèmes de l'erreur dans l'énergie par site de l'erreur de troncation : le facteur de proportionalité est, dans nos calculs, très approximativement de l'ordre 10 pour l'état fondamental et entre environ 1 et 2.5 fois plus grand pour la première excitation. Encore une fois, ces observations sont empiriques.

   En général, pour les corrélations et valeurs moyennes, nous retrouvons toujours une dépendence monotone de la précision de l'erreur de troncation, donc de M. Il y a eu un rapport[Nishiyama 95] qui implique des déviations de ce comportement "variationnel" du DMRG. Nous ne pouvons pas le confirmer à partir de nos résultats ; il n'est pas clair s'il s'agit d'une erreur de programmation ou d'une application où le DMRG est mal adapté. En tout cas, aucune preuve n'existe sur le caractère variationnel de la méthode, bien qu'il soit observé.

Notons qu'il y a, sans modifications majeures, une précision maximale pour toutes les valeurs moyennes à l'exception de l'énergie : L'énergie apparaît comme la valeur propre d'une diagonalisation, alors que toutes les autres quantités sont dérivées du vecteur propre, qui est connu seulement avec une précision de l'ordre de la racine de la précision de la machine (typiquement 10^{-13}), car il est calculé à partir des racines des valeurs connues à la précision de la machine[Numerical Recipes 86]. Effectivement, nous trouvons, indépendant de M, des valeurs moyennes aléatoires $|\langle S_i^z \rangle| \approx 10^{-6}$ à 10^{-7} au lieu de 0 pour l'état fondamental d'une chaîne de spins desordonnée.

1.4.2 L'erreur de pertinence ρ_2

La seconde source d'erreurs est beaucoup plus difficile à estimer : une fois que des états ont été jetés, on ne peut plus juger la contribution de ces états aux étapes suivantes. Nous avons alors introduit une *estimation de cohérence* : Soit B le système que l'on vient de diagonaliser, et B' le système plus grand suivant, et A et A' les sous-systèmes respectifs. La matrice de densité a été construite pour $A + \bullet = A'$. Si nous projetons l'état visé de B' sur A' après la prochaine étape, on obtient en plus de la matrice de densité pour $A' + \bullet$ (que l'on utilise pour la prochaine troncation) une matrice de densité ρ' pour A' de taille $M \times M$. Dans la base tronquée, l'ancienne matrice de densité ρ est aussi de taille $M \times M$ et diagonale avec les valeurs propres λ_α des vecteurs propres retenus sur la diagonale. Idéalement, les deux matrices devraient être (presque) égales, si l'hypothèse fondamentale est bien vérifiée, où l'on suppose que les sous-systèmes deviennent indépendants de la longueur totale du système. Nous considérons donc l'expression

$$\rho_2 = \sum_{i,j=1}^{M} |\rho'_{ij} - \rho_{ij}|. \tag{1.25}$$

Si l'hypothèse est parfaitement vérifiée, cette expression va devenir $1 - \sum_{\alpha=1}^{M} \lambda_\alpha = \rho_1$, parce que tous les états contribuent comme prévu, avec seulement un poids

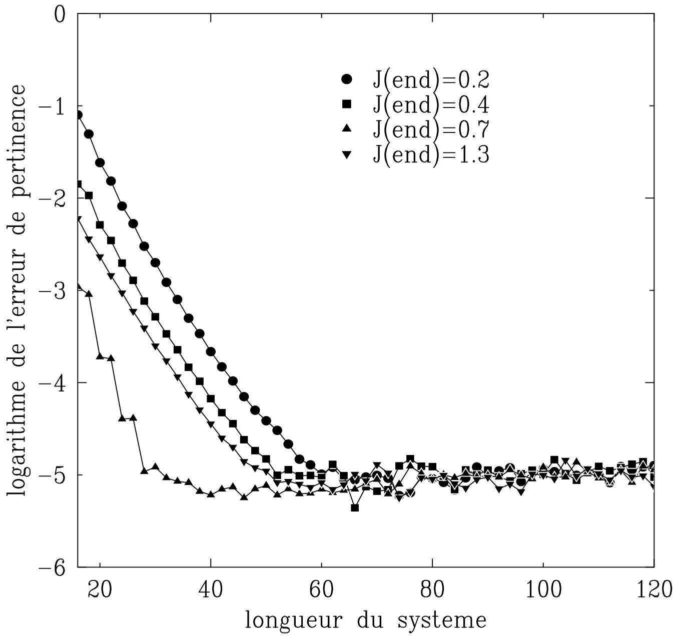

FIG. 1.3: *Décroissance de ρ_2 en fonction de la longueur du système pour une chaîne de spin 1 isotrope antiferromagnétique pour différents couplages de bord J_{end}. Base du logarithme : 10*

total augmenté de $\sum \lambda_\alpha$ à 1. C'est pourquoi nous choisissons cette expression bien qu'elle ne soit pas invariante sous des transformations unitaires comme $\sum_{ij}(\rho'_{ij} - \rho_{ij})^2$ le serait. Comme les deux expressions ne sont pas directement liées à la précision, mais indiquent un comportement général seulement, la différence est peu importante. Les deux "mesurent" des "rotations" dans l'espace des états conservés : nous interprétons une grande valeur de ρ_2 comme indication d'une mauvaise vérification de l'hypothèse fondamentale, et concluons que l'importance des états jetés a été mal estimée.

Nous observons le comportement général suivant de ρ_2 :

1. Pour un état non dégénéré, ρ_2 diminue si l'on augmente L. La vitesse de diminution donne une bonne indication des effets de bord. White et Huse ont étudié[White 93a] dans la chaîne de spin 1 ouverte avec des spins 1/2 aux bords la dépendence des propriétés de "volume" pour différents couplages aux bords et trouvé que pour un couplage de bord entre les deux premiers (derniers) spins $J_{end} \approx 0.7$, l'énergie par site s'approche le plus

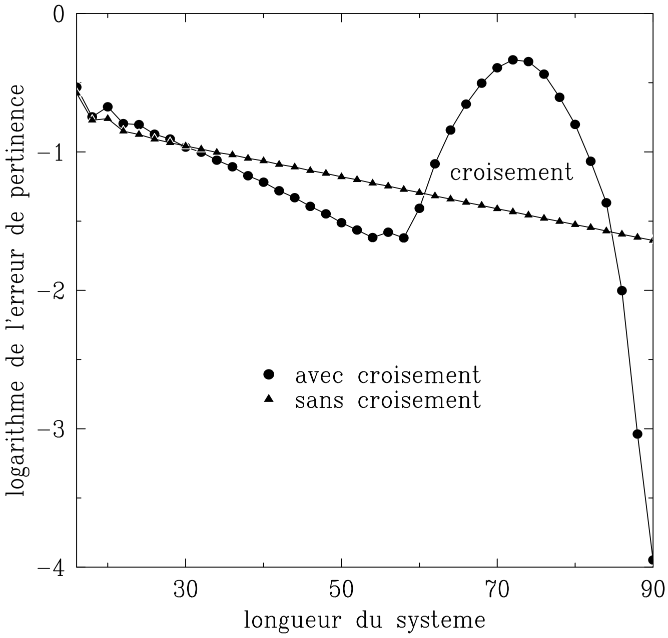

FIG. 1.4: *Comportement de ρ_2 en fonction de la longueur du système pour une chaîne de spin 1 isotrope antiferromagnétique ouverte pour un couplage de bord $J_{end} = 0.3$ et $S^z_{total} = 0$ (cercles) : un changement d'état visé (à cause de la quadruple dégénérescence dans ce cas-là, voir chap. 4 et 5) est visible à travers une remontée intermédiaire de ρ_2. Nous donnons aussi le comportement pour un état non-dégénéré (triangles).*

rapidement de la valeur du volume (voir chap. 5.1) et que ce choix est optimal pour l'étude du volume. Dans le langage de ρ_2, ce choix correspond à la décroissance la plus rapide de ρ_2 (figure 1.3). Nous avons alors introduit un autre indicateur plus étroitement lié à la structure de l'algorithme pour choisir des conditions de bord qui donnent les propriétés du volume pour les chaînes les plus courtes.

2. Il y a des systèmes où certains états dégénèrent dans la limite de taille infinie : Considérons par exemple la chaîne de spin 1 : il est bien connu[Kennedy 90, Hagiwara 90, Glarum 91] que dans une chaîne de spin 1 quantique antiferromagnétique *ouverte* l'état fondamental de la chaîne est un quadruplet dégénéré à cause de deux spin-1/2 effectivement libres aux bords, qui forment un singlet ou triplet. Cette dégénérescence est levée pour des tailles

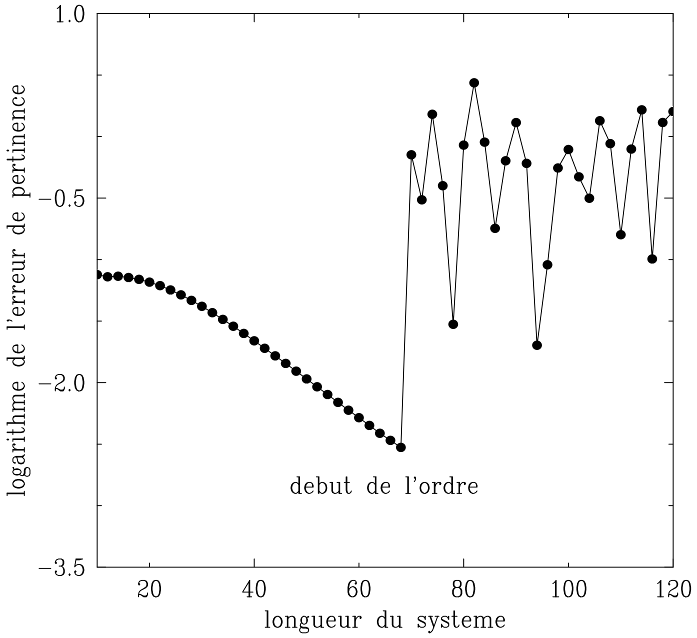

FIG. 1.5: *Comportement de ρ_2 en fonction de la longueur du système pour des chaînes de spin 1/2 ouvertes couplées dans la région d'ordre ferromagnétique : le système bascule dans l'ordre à partir d'une longueur minimale, qui est indiquée par le changement abrupt de comportement de ρ_2.*

finies ; la différence en énergie va typiquement comme[Kennedy 90, Qin 95]

$$E_t - E_s \propto e^{-L/\xi} \tag{1.26}$$

Cette dégénérescence n'est pas complètement levée dans les sous-espaces de S^z_{total} invariant ; dans notre exemple, l'état fondamental comprend deux états avec $S^z_{total} = 0$, l'un avec $S_{total} = 0$, l'autre avec $S_{total} = 1$. Ce qui peut arriver à l'algorithme dans un tel cas est qu'il change d'état visé : Supposons un algorithme *exact* et considérons deux états dégénérés dans la limite thermodynamique, dont, pour des systèmes courts, l'état 2 est le plus élevé en énergie ; l'algorithme va choisir l'état 1 et le retenir. A cause de leur dégénérescence dans la limite thermodynamique, l'énergie ajoutée par étape à l'état 2 sera plus petite que celle ajoutée à l'état 1. Si l'on considère maintenant la précision finie de l'algorithme, on trouve dans certains cas que l'erreur de troncation pour l'état 2 devient plus petite que celle pour l'état 1. Ceci peut mener à une différence dans les énergies ajoutées au milieu par rapport aux celles ajoutées au début de telle façon qu'il y a une surcompensation de la différence en énergie pour les chaînes courtes. Dans un tel cas, l'algorithme va passer de l'état 1 à l'état 2. Remarquons qu'il s'agit d'un effet mineur dans les énergies (différence relative des énergies par site de l'ordre 10^{-3} ou inférieure), qui est quand même suffisant pour provoquer ce changement d'état visé. Dans un tel cas, on observe (figure 1.4) un comportement anormal de ρ_2 : après une décroissance normale, ρ_2 augmente : le poids des états change graduellement avec la longueur du système ; une fois que le nouvel état est bien choisi, ρ_2 chute comme avant.

3. Dans des chaînes ouvertes qui, dans la limite infinie, montrent de l'ordre, on observe que pour L petit, le paramètre d'ordre est encore 0, jusqu'à une longueur critique L_c, où la chaîne bascule dans l'ordre (il coûte de plus en plus cher en énergie de "renverser" toute la chaîne ordonnée, car l'effet désordonnant des bords devient de plus en plus faible). On peut trouver L_c (et arrêter l'algorithme, si l'on s'intéresse seulement à la nature de la phase - une fois ordonnée, la chaîne reste ordonnée pour L plus grand) en calculant le paramètre d'ordre ; ceci consomme beaucoup de temps de calcul et aussi de mémoire.

   Dans plusieurs phases ordonnées nous observons (figure 1.5) que ρ_2 change dramatiquement de comportement quand le système s'ordonne : alors que dans le système désordonné ρ_2 diminue et est typiquement de l'ordre de 10^{-1} à 10^{-5} (dépendant de L et des paramètres du système), ρ_2 saute à une valeur de l'ordre 1 qui ne diminue plus, mais montre des fluctuations aléatoires autour de cette valeur. Les phases avec ordre d'Ising montrent ce comportement. Ceci donne un moyen très simple d'identifier les phases qui ne demande pas de ressources additionnelles ; et nous pouvons facilement engendrer un diagramme de phase approximatif.

   Pour l'ordre d'Ising, l'état ordonné est dégénéré. Quelques-uns de ces états sont décrits très simplement (par un seul vecteur) dans la base de produit originale : prenons par exemple les états ferromagnétiques avec $S^z = \pm S$ sur chaque site. Parmi les M états retenus, on trouve plusieurs de ces états : numériquement, le DMRG ne fait pas de choix absolument pur. A chaque étape, le choix peut aléatoirement changer, ce qui entraine un changement abrupt des poids des états, visible dans les grandes valeurs aléatoires de ρ_2.

1.5 Quelques remarques sur la faisabilité de l'algorithme DMRG

Un sujet peu abordé dans la littérature est celui de la faisabilité de l'algorithme dans des situations physiques différents. Après les succès étonnants du DMRG rapportés dans la littérature, je vais plutôt essayer de discuter les limitations du DMRG. Rappelons d'abord les succès, sans rentrer ici dans les détails ; ceci sera fait plus tard pour 1., 2. et 3. :

1. Etudes des chaînes de spin entier avec des grandes longueurs de chaîne et précisions des résultats jusqu'alors impossibles ([White 92b, White 93a, Sørensen 93, Nishiyama 95, Qin 95]).
2. Chaîne de spin 1 bilinéaire-biquadratique : Clarification partielle du diagramme de phase ([Fath 95, Bursill 95]).
3. Chaînes de spin couplées : études sur le gap et la longueur de corrélation. Démonstration du comportement différent d'un nombre pair ou impair de chaînes couplées ([White 94]).
4. Chaînes de Hubbard couplées : études sur le gap et la longueur de corrélation en fonction du remplissage ([Noack 94a, Noack 94b]).
5. Chaîne de spin 1/2 frustrée et dimérisée : étude de quelques régions du diagramme de phase ([Chitra 95]).
6. Chaîne de spin 1 dimérisée : étude de la transition de phase entre le régime non-dimérisé et le régime dimérisé ([Kato 94]).

Rentrons maintenant aux limitations de l'algorithme :

1. *Dimensionnalité :* Le DMRG est fortement restreint à une dimension (spatiale) ; des essais de l'appliquer à des problèmes bidimensionnels ont plus ou moins échoué[Liang 94]. Il y a deux raisons majeures pour cela : D'abord, la taille des systèmes est fortement restreinte : à une chaîne de longueur 100 correspond un carré de longueur 10. Le grand avantage du DMRG de pouvoir traiter des systèmes quelquefois beaucoup plus grands que la longueur de corrélation est perdu. Plus important, la nature de l'algorithme impose une décomposition unidimensionnelle du système : on monte et descend le long d'une axe[Noack 94b]. Ceci implique qu'il faut construire des interactions entre des sites qui sont typiquement séparés par une distance L dans la décomposition unidimensionnelle, correspondant à L troncations. Pendant les troncations successives, les valeurs moyennes des opérateurs

sur les sites perdent vite de la précision (voir, par exemple, le problème du calcul de longueurs de corrélation (chap. 5.2)), et les interactions entre les sites sont donc construites avec une précision insuffisante.

2. *Température :* Le DMRG est limité à température zéro. Il est possible de généraliser l'algorithme à des températures finies de la façon suivante : En diagonalisant, on cherche outre le fondamental tous les n_{etats} états du système total qui sont séparés de l'état fondamental par des énergies telles que leurs poids de Boltzmann $e^{-\beta E_k}$ ne soient pas négligeables par rapport à $e^{-\beta E_0}$, avec E_k et E_0 les énergies de l'état visé et de l'état fondamental. Ce calcul implique plusieurs diagonalisations, si l'on travaille dans des sous-espaces utilisant un bon nombre quantique. On construit maintenant les matrices de densité pour chacun de ces états, $\rho(|\psi_k\rangle)$. La matrice de densité du système à température finie est alors donnée par
$$\rho_{ij} = \mathcal{N} \sum_{k=0}^{n_{etats}} \rho_{ij}(|\psi_k\rangle) e^{-\beta E(|\psi_k\rangle)} \tag{1.27}$$
avec une normalisation $\mathcal{N} = \sum_{k=0}^{n_{etats}} e^{-\beta E(|\psi_k\rangle)}$ et est traitée de la manière conventionnelle. La précision de cette approche est limitée par l'énergie maximale des états que l'on considère. Le temps de calcul sera proportionnel au nombre d'états n_{etats} ; en plus, il faut sensiblement augmenter M : d'abord, si l'on considère *un seul* état, la précision de l'algorithme baisse rapidement pour les états plus élevés en énergie, ce qui doit être compensé par une augmentation de M. En plus, les états de base servent à une description d'un grand nombre d'états orthogonaux, ce qui implique un très grand M pour maintenir une précision raisonnable.
Il est évident que l'augmentation de M et du nombre des diagonalisations interdit cette approche pour toute température qui n'est pas extrêmement proche de zéro (où une quantification de cette phrase dépendrait sensiblement du système en considération).

3. *Spectre du système étudié :* Les applications du DMRG dépendent aussi sensiblement du spectre du système étudié. Ceci est assez banal ; chaque algorithme de diagonalisation trouve plus facilement des états qui ne sont pas dégénérés et séparés des autres états par une différence non-négligeable dans l'énergie (la valeur propre). Il faut quand même être plus précis : il n'est pas correct de dire que le DMRG marche bien pour des systèmes avec gap et mal pour des systèmes critiques - les résultats excellents pour la chaîne de spin-1/2 quantique isotrope antiferromagnétique[White 92b] sont en contradiction évidente. Il faut regarder de plus près les excitations. Nos résultats

montrent que le DMRG fonctionne bien, dans les chaînes de spin S entier, pour l'état fondamental ainsi que pour la première excitation qui se trouve au bas d'un spectre continu ou aussi la phase critique que nous trouvons pour la chaîne de spin 2 pour certaines anisotropies (voir chap. 5.3), mais rencontre des difficultés sérieuses dans la phase dite XY du diagramme de phase de deux chaînes de spin 1/2 quantiques couplées (chap. 7), qui est critique en présence d'excitations ferromagnétiques. Ces difficultés, discutées dans chap. 7.2.3, consistent dans une explosion du nombre d'itérations pour la diagonalisation avec la longueur du système. La densité d'état proportionnelle à $(\partial E/\partial k)^{-1}$ est finie pour la chaîne spin-1/2 ($E = (\pi/2)\sin k$), mais elle diverge pour les excitations antiferromagnétiques à basse énergie pour S entier ($E = \sqrt{c^2(k-\pi)^2 + \Delta^2}$) et pour les excitations ferromagnétiques à basse énergie ($E = ck^2$). Une densité d'états divergente seule ne semble donc pas arrêter le DMRG. A notre avis, l'explication est donnée par le fait que le spectre de basse énergie des chaînes de spin est donné par une *bande* d'excitations seulement[des Cloizeaux 62, Parkinson 85], alors que le spectre XY des chaînes couplées semble lié à un *continuum* d'excitations, qui sont alors beaucoup plus nombreuses.

4. *Transitions de phase :* Pour les transitions de phase continues, l'utilité du DMRG est assez limitée : elles sont caractérisées par un grand nombre de fluctuations sur toutes les échelles. Bien que le DMRG puisse étudier des systèmes très longs et alors fournir des résultats qui se prêtent bien à une analyse de la transition, le grand nombre de fluctuations (quelques cas particuliers à part, comme ils sont discutés dans chapitre 7) nécessite un M très grand pour une description suffisamment bonne : alors que l'erreur de troncation baisse presque exponentiellement avec M dans une phase avec gap, il ne baisse qu'en loi de puissance pour les points critiques[Bursill 95].

Chapitre 2

Implémentation de l'algorithme

Dans ce chapitre *très technique et destiné essentiellement au lecteur, qui veut appliquer la méthode lui-même*, nous nous proposons de discuter l'implémentation de l'algorithme que nous avons développé pendant cette thèse. Une attention particulière a été portée à une formulation efficace en temps de calcul et mémoire vive. Signalons que Bursill, Xiang et Gehring font mention que leur implémentation prend pour un certain Hamiltonien, un système de longueur $L = 100$ et $M = 40$, 14 heures de temps de calcul[Bursill 95]. Ayant recalculé le même problème, je trouve un temps de calcul de 2 *minutes* sur un ordinateur qui est à peu près 10 fois plus rapide, ce qui donne un facteur 40 dû à l'implémentation.

2.1 Structure générale de l'algorithme

Dans une implémentation pratique, on peut diviser l'algorithme en trois parties : (i) *Initialisation* : Calcul des petits systèmes qui peuvent encore être traités exactement ; (ii) *Croissance :* En fonction de l'utilisation de la version "taille finie" ou "infinie" du DMRG, la chaîne croît en taille jusqu'à la taille finale, où on s'arrête, ou la description est encore améliorée itérativement ; (iii) *Evaluation* : Evaluation des valeurs moyennes des opérateurs, si elle a lieu.

Initialisation : Pour les deux bords de la chaîne, on construit des systèmes encore exactement solubles, et on calcule leur spectre complet. Ces résultats serviront comme la description des blocs gauche et droit dans la première étape de la phase de croissance (décrit dans la section 2.2.1).

Croissance (taille infinie) : La croissance se déroule de la façon suivante : On commence par le système qui a comme blocs le système que l'on vient de résoudre exactement. En augmentant la taille des blocs par 1, on procède dans l'ordre suivant, jusqu'à la taille finale :

- Construction de l'Hamiltonien formé par les deux blocs et les nouveaux spins (voir la section 2.2.2).
- Diagonalisation de l'Hamiltonien par une méthode itérative afin de déterminer les états les plus bas (sections 2.2.3, 2.2.4)
- Construction des matrices de densité et détermination des états à retenir, qui forment une nouvelle base (section 2.2.5).
- Vérification de la qualité de l'hypothèse fondamentale (section 2.2.6)
- Initialisation des opérateurs à n points qui ont leur première contribution sur les sites que l'on vient d'ajouter (section 2.2.7)
- Construction des opérateurs à n points qui ont une contribution provenant du site que l'on vient d'ajouter (section 2.2.7)
- Transformation des opérateurs déjà calculés dans les nouvelles bases (section 2.2.7).

Croissance (taille finie) : On procède de la même façon que pour l'algorithme de taille infinie avec les modifications décrites dans la section 1.2.4 ; la différence algorithmique consiste dans les deux points suivants :

- Si la taille d'un des blocs est tellement réduite, qu'il devient exactement soluble, on utilise pour ce bloc l'algorithme d'initialisation ; c'est à ce moment-là que l'algorithme change de direction de croissance.
- On ne construit pas le nouveau bloc qui se situe dans la direction de croissance : à l'étape prochaine, on va utiliser les résultats retenus plus tôt.

Evaluation : L'état visé donné dans une base de produit des bases du bloc gauche, du site gauche, du site droit, et du bloc droit, est transformé dans une base de produit d'une base de la moitié gauche et de la moitié droite et les valeurs moyennes des opérateurs, qui agissent seulement sur une moitié de la chaîne, évaluées (exemple : $\langle S_i^z \rangle$; section 2.2.8). De suite, on évalue les valeurs moyennes des opérateurs qui agissent sur les deux moitiés (exemple : $\langle S_i^+ S_j^- \rangle$, où on centre i et j symétriquement autour du milieu de la chaîne pour minimiser les effets des bords ; section 2.2.9).

2.2 Structure des modules de l'algorithme

2.2.1 Calcul exact de la sous-chaîne initiale

Supposons qu'il y a N_L^0 états sur le premier site d'une chaîne et N sur les autres à gauche (et de même N_R^0 et N à droite). On admet alors que le premier (dernier) site est différent des sites du volume, une propriété que nous allons amplement utiliser plus tard. L'algorithme commence par la diagonalisation complète de sous-chaînes de longueur n_L et n_R, où $n_{L(R)}$ est choisi de telle sorte que le nombre d'états de ce système $N_L^0 N^{n_L-1}$ soit inférieur à M_L, mais que $N_L^0 N^{n_L}$ soit plus grand ou égal à M_L (et en analogie pour la sous-chaîne à droite). Ainsi, dans la première étape, ces sous-systèmes serviront comme premier bloc ; la taille est choisie pour que l'algorithme de troncation soit opérant. On a alors les calculs suivants (décrit seulement pour le sous-système gauche) :

Données :

1. Paramètres d'interaction.
2. Longueur n_L du sous-système, nombre d'états par site N_L^0 et N (modifications pour les sites aux bords).

Calculs :

1. Nous construisons l'Hamiltonien du sous-système H_L dans l'espace de produit des bases locales $\{|\sigma_i\rangle\}$:

$$\langle \sigma_1 \dots \sigma_{n_L} | H_L | \sigma'_1 \dots \sigma'_{n_L} \rangle \tag{2.1}$$

   et gardons le nombre quantique[1] Q pour chaque état $|\sigma_1 \dots \sigma_{n_L}\rangle$.

2. Dans chaque sous-espace $\{|\sigma_1 \dots \sigma_{n_L}\rangle\}$ à Q fixe, nous diagonalisons H_L et gardons les valeurs propres (énergies) et les vecteurs propres

$$|m_L\rangle = \sum_{\{|\sigma_1 \dots \sigma_n\rangle\}} \langle \sigma_1 \dots \sigma_n | m_L \rangle |\sigma_1 \dots \sigma_n\rangle \tag{2.2}$$

   ainsi que les nombres quantiques Q associés.

[1]Nous supposons que nous utilisons seulement *un* opérateur qui donne un bon nombre quantique. La généralisation à plusieurs est simple, mais la notation devient très lourde.

3. Il reste à calculer les valeurs moyennes des opérateurs $\langle\sigma_1 \dots \sigma_n|O|\sigma'_1 \dots \sigma'_n\rangle$, où nous prenons de chaque opérateur la partie agissant sur le sous-système (en supposant une propriété de décomposition en produit pour les opérateurs : $O = O_{p_1} \dots O_{p_N}$, où l'indice donne le site sur lequel l'opérateur agit). Ces valeurs moyennes sont alors transformées dans la base donnée par les états propres :

$$\begin{aligned} & \langle m_L|O_{p_1\dots}|m'_L\rangle = \\ \sum_{\{|\sigma_1\dots\sigma_n\rangle\}} \sum_{\{|\sigma'_1\dots\sigma'_n\rangle\}} \langle\sigma_1 \dots \sigma_n|O_{p_1\dots}|\sigma'_1 \dots \sigma'_n\rangle \quad & \langle\sigma'_1 \dots \sigma'_n|m'_L\rangle\langle m_L|\sigma_1 \dots \sigma_n\rangle \end{aligned} \tag{2.3}$$

Résultats :

1. Pour le sous-système de longueur n_L, tous les états propres de l'Hamiltonien et les énergies, ainsi que les nombres quantiques conservés Q.
2. Valeurs moyennes des opérateurs dans la base des états propres.

2.2.2 Construction de l'Hamiltonien du système total

Dans la construction de l'Hamiltonien H du système total, l'accent est mis sur une description explicite de tous les éléments de matrice : de façon générale, les tailles des matrices à conserver sont relativement petites par rapport aux matrices des valeurs moyennes et aux vecteurs de base dans la diagonalisation de Lanczos (section 2.2.3), mais l'information doit être rapidement accessible : l'algorithme consomme environ 90 pour cent du temps à calculer des produits $H|v\rangle$.

Il y a deux calculs à effectuer : il faut construire les Hamiltoniens des interactions dans les blocs et entre blocs et nouveaux sites, et l'Hamiltonien des interactions entre les nouveaux sites. De façon générale, on peut partitionner l'Hamiltonien comme[2]

$$H = H_L + H_{L\bullet} + H_{\bullet\bullet} + H_{\bullet R} + H_R, \tag{2.4}$$

où $H_{L(R)}$ contient toutes les interactions à l'intérieur du bloc gauche (droit), $H_{L\bullet}$ celles entre le bloc gauche et les sites à ajouter au bloc gauche, $H_{R\bullet}$ celles entre le bloc et le nouveau site droits et $H_{\bullet\bullet}$ les interactions entre les nouveaux sites. Nous ne discutons pas, par simplicité, les cas où des sites à ajouter au bloc gauche interagissent avec le bloc droit.

[2]Dans tout ce qui suit nous supposons que nous n'ajoutons qu'un seul site à chaque bloc, ce qui facilite la notation. La généralisation est conceptionellement triviale, mais mène à une notation lourde.

système	états de base
bloc actuel A	$\vert m_{L(R)}\rangle$
bloc précédent $A \setminus \bullet$	$\vert \hat{m}_{(L)R}\rangle$
nouveau bloc généré $A' = A + \bullet$	$\vert \tilde{m}_{L(R)}\rangle$
dernier site de A	$\vert \sigma_{L(R)}\rangle$
dernier site du bloc précédent	$\vert \tau_{L(R)}\rangle$

TAB. 2.1: *Notations utilisées pour les bases des différents sites et blocs pendant une étape du DMRG. L'indice L ou R denote le bloc.*

Pour calculer les interactions entre un bloc donné et un nouveau site, il faut connaître dans ce bloc les états du site qui interagit avec le nouveau site (Par simplicité, nous ne considèrons que des interactions entre plus proches voisins. La généralisation est évidente.). Typiquement, on a besoin (pour des spins) de connaître $\langle m_L|S_i^z|m'_L\rangle$ et de $\langle m_L|S_i^{\pm}|m'_L\rangle$ (si nous prenons le bloc gauche) où i est l'indice du site interagissant. Si l'on calcule aussi des valeurs moyennes, cette information est immédiatement accessible car elle doit être calculée pour obtenir les valeurs moyennes (voir ci-dessous).

Les calculs des valeurs moyennes consomment énormement de mémoire et aussi du temps de calcul. Dans les calculs des énergies et des gaps cette information peut être oubliée afin de permettre le calcul de systèmes plus grands avec une base plus élargie (un M plus grand). Dans ces cas-là, il faut retenir cette information d'une façon différente. Nous choississons la forme

$$\langle m_L|\hat{m}_L\tau_L\rangle,$$

où $|m_L\rangle$ sont les états du bloc, dont le site interagissant avec le nouveau site est décrit par $|\tau_L\rangle$. Les $|\hat{m}_L\rangle$ sont les $\hat{M}_L$ états du bloc de l'étape précédente (voir le tableau 2.1). Le bloc que nous considérons est la somme de ce bloc ancien et le site interagissant.

Nous cherchons

$$H_{L\bullet} = \sum_{m_L;m'_L;\sigma_L;\sigma'_L} \epsilon_{m_L\sigma_L;m'_L\sigma'_L} |m_L\rangle|\sigma_L\rangle\langle m'_L|\langle\sigma'_L|. \tag{2.5}$$

Nous écrivons, avec l'énergie d'une simple interaction entre deux sites, $\tilde{\epsilon}_{\tau_L;\sigma_L;\tau'_L\sigma'_L}$

$$H_{L\bullet} = \sum_{\tau_L;\tau'_L;\sigma_L;\sigma'_L} \sum_{i=1}^{\hat{M}_L} \tilde{\epsilon}_{\tau_L;\sigma_L;\tau'_L\sigma'_L} |\hat{m}_L\rangle|\tau_L\rangle|\sigma_L\rangle\langle\hat{m}'_L|\langle\tau'_L|\langle\sigma'_L|. \tag{2.6}$$

Maintenant nous insérons deux fois la décomposition de l'*unité approximative* donnée par l'étape précedente de la DMRG : $\sum |m_L\rangle\langle m_L| = 1 - \rho_1 \approx 1$ et obtenons comme interaction approximative

$$H_{L\bullet} = \sum_{m_L;m'_L;\sigma_L;\sigma'_L} (\sum_{i=1}^{\hat{M}_L} \sum_{\tau_L;\tau'_L} \tilde{\epsilon}_{\tau_L;\sigma_L;\tau'_L\sigma'_L} \langle \hat{m}'_L \tau'_L | m'_L \rangle \langle m_L | \hat{m}'_L \tau'_L \rangle) |m_L\rangle |\sigma_L\rangle \langle m'_L| \langle \sigma'_L|. \tag{2.7}$$

en fonction de quantités connues. Signalons la perte de précision à cause du traitement approximatif de l'interaction.

Données :

1. Nombre d'états dans le bloc gauche M_L ; nombre d'états dans le bloc droit M_R ; positions p_L et p_R du dernier (premier) spin du bloc gauche (droit) ; nombre d'états des nouveaux sites N ; nombre d'états dans le bloc gauche de l'étape précédente $\hat{M}_L$; nombre d'états dans le bloc droit de l'étape précédente $\hat{M}_R$.
2. Liste des valeurs des bons nombres quantiques pour les états du bloc gauche de longueur p_L et du bloc droit de longueur $L_0 + 1 - p_R$ (L_0 est la longueur du système final).
$$Q(|m_L\rangle); Q(|m_R\rangle)$$
3. Hamiltonien des interactions à l'intérieur des blocs
$$\langle m_L | H_L | m'_L \rangle$$
$$\langle m_R | H_R | m'_R \rangle$$

Calculs :

1. $\langle \sigma_L \sigma_R | H_{\bullet\bullet} | \sigma'_L \sigma'_R \rangle = \langle m_L \sigma_L | H_{L\bullet} | m'_L \sigma'_L \rangle = \langle m_R \sigma_R | H_{\bullet R} | m'_R \sigma'_R \rangle = 0$
2. Pour tous les $|\sigma_L\rangle$, $|\sigma_R\rangle$, $|\sigma'_L\rangle$ et $|\sigma'_R\rangle$, on calcule $\langle \sigma_L \sigma_R | H_{\bullet\bullet} | \sigma'_L \sigma'_R \rangle$
3. Pour tous les $|\sigma_L\rangle$ et $|\tau_L\rangle$, on calcule tous les $|\sigma'_L\rangle$ et $|\tau'_L\rangle$ pour lesquels
$$\langle \sigma_L \tau_L | \hat{H} | \sigma'_L \tau'_L \rangle \neq 0.$$
$\hat{H}$ contient toutes les interactions entre les sites avec les états $|\sigma_L\rangle$ et $|\tau_L\rangle$, qui, par définition, comprennent toutes les interactions entre le bloc gauche et le nouveau site gauche.

Maintenant, pour toutes les paires $(|m_L\rangle; |m'_L\rangle)$ où $Q(|m_L\rangle) + Q(|\sigma_L\rangle) = Q(|m'_L\rangle) + Q(|\sigma'_L\rangle)$, nous calculons $H_{L\bullet}$:

$$\langle m_L \sigma_L | H_{L\bullet} | m'_L \sigma'_L \rangle = \sum_{\tau_L, \tau'_L} \langle \sigma_L \tau_L | \hat{H} | \sigma'_L \tau'_L \rangle \sum_{\hat{m}_L=1}^{\hat{M}_L} \langle m_L | \hat{m}_L \sigma_L \rangle \langle \hat{m}_L \sigma'_L | m'_L \rangle \tag{2.8}$$

4. De la même façon, nous procédons pour $H_{\bullet R}$.
5. Enfin, il faut tenir compte des interactions au sein des blocs. Elles ont été calculées aux étapes précédentes et sont diagonales dans les nouveaux sites et dans le bloc qui n'est pas concerné par l'interaction. Techniquement, nous les ajoutons à $H_{L\bullet}$ pour chaque élément de matrice où $|\sigma_L\rangle = |\sigma'_L\rangle$ et également pour le bloc droit.

Résultats :

1. Hamiltonien des interactions entre nouveaux sites

$$\langle \sigma_L \sigma_R | H_{\bullet\bullet} | \sigma'_L \sigma'_R \rangle$$

2. Hamiltonien des interactions entre blocs et sites et des interactions au sein des blocs

$$\langle m_L \sigma_L | H_{L\bullet} | m'_L \sigma'_L \rangle$$
$$\langle m_R \sigma_R | H_{\bullet R} | m'_R \sigma'_R \rangle$$

2.2.3 Diagonalisation de l'Hamiltonien du système total

On se propose ici de trouver un état propre et sa valeur propre pour une matrice de taille $M_L M_R N^2$, ce qui sera typiquement de l'ordre 10^5 à 10^6. Comme la matrice est creuse, et l'état visé est un état propre près du bord du spectre, on peut utiliser une des méthodes pour la diagonalisation itérative de grandes matrices creuses. L'une des plus courantes, que nous utilisons ici, est l'algorithme de Lanczos introduit par C. Lanczos[Lanczos 50] et mise au point par Paige[Paige 72]. Nous nous limitons ici à une discussion très courte de cet algorithme ; pour plus de détails, je réfère à [Cullum 85].

Supposons une matrice hamiltonienne creuse de taille $N_0 \times N_0$, avec N_0 très grand. On cherche des matrices orthonormales U et $U^T = U^{-1}$ de taille $N_0 \times N_0$, qui transforment la matrice hamiltonienne H dans une matrice tridiagonale T ($T_{ij} = 0$ si $|i-j| > 1$) de dimension $N_0 \times N_0$:

$$T = U^T H U \tag{2.9}$$

Cette construction sera faite de façon itérative : on construit des matrices U de taille $N_0 \times M$, commençant par $M = 1$ et mettant $M \to M+1$ à chaque itération. *On trouvera que les valeurs propres extrêmes (proches des bords du spectre) de T sont une approximation excellente de celles de H déjà pour $M \ll N_0$.* Ainsi, il reste à diagonaliser une petite matrice tridiagonale, qui est par ailleurs beaucoup plus facile à diagonaliser qu'une matrice symétrique avec des algorithmes très courants (voir, pour des exemples, [Numerical Recipes 86]). L'algorithme dans sa forme détaillée est :

Données :

1. La longueur N_0 de la matrice (dans le DMRG, le produit $M_L M_R N^2$).
2. Une procédure qui calcule le produit de la matrice H avec un vecteur d'état $|v\rangle$ (décrit ci-dessous).
3. La matrice de H.

Calculs :

1. On se propose un vecteur initial et *aléatoire* $|v_1\rangle$ de longueur N_0 avec $\langle v_1|v_1\rangle = 1$ et pose $\beta_1 = 0$ et $|v_0\rangle = 0$. Il est essentiel de prendre un vecteur aléatoire ; sinon on court le risque que le vecteur d'essai $|v_1\rangle$ soit orthogonal à l'état recherché que l'on ne trouverait jamais (en principe ; en réalité, des petites erreurs numériques vont *normalement* assurer qu'il y a une contribution minuscule de l'état cherché à un état d'essai quelconque).
2. En commençant par $i = 1$, on calcule

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \langle v_i|H|v_i\rangle \\ \beta_{i+1}|v_{i+1}\rangle &= H|v_i\rangle - \alpha_i|v_i\rangle - \beta_i|v_{i-1}\rangle, \end{aligned}$$

   et choisit β_{i+1} réel tel que $\langle v_{i+1}|v_{i+1}\rangle = 1$.
3. On diagonalise la matrice tridiagonale symétrique T de taille $i \times i$, qui a $\alpha_1, \ldots, \alpha_i$ comme éléments diagonaux et $\beta_2, \ldots, \beta_i$ comme éléments sous-diagonaux : $T_{ii} = \alpha_i$ et $T_{i-1,i} = T_{i,i-1} = \beta_i$.
4. On repète 2. and 3., jusqu'à ce que la valeur propre la plus basse λ_0 (où une autre valeur propre désirée, voir la discussion ci-dessous) soit stable (typiquement, à une précision relative de 10^{-13}). Soit $|a\rangle$ le vecteur propre de T associé à λ_0.

5. Dans la base de H, le vecteur propre de λ_0 est donné par $|u\rangle = \sum_{n=1}^{i} a_i |v_i\rangle$.

Résultats : $|u\rangle$, l'état propre de H visé et la valeur propre (énergie) associée : $H|u\rangle = \lambda_0 |u\rangle$.

Pour démontrer que cet algorithme a bien les propriétés implicitement supposées ci-dessus il faudrait démontrer que la matrice $\langle v_i|T|v_j\rangle$ est tridiagonale, que les valeurs propres de T et H deviennent identiques pour $i \to N$ et la convergence systématique des valeurs propres de T vers les valeurs propres extrêmes de H. Ces démonstrations sont données dans la littérature[Cullum 85] ; on trouve essentiellement que l'algorithme de Lanczos est équivalent à une orthogonalisation itérative de Gram et Schmidt dans l'espace de Krylov $\{|v\rangle, H|v\rangle, H^2|v\rangle, \ldots\}$; celle-ci est équivalent à une recherche des valeurs propres extrêmes avec la méthode du gradient maximal : celle-ci consiste en considérant le coefficient de Rayleigh-Ritz $r(|\psi\rangle) = \langle\psi|H|\psi\rangle / \langle\psi|\psi\rangle$, qui devient stationnaire pour des vecteurs propres et égal à la valeur propre correspondante. Après chaque itération et diagonalisation de la matrice tridiagonale, on cherche le gradient maximal pour les deux $r(|\psi\rangle)$ associés aux valeurs propres extrêmes dans l'espace total, autrement dit, l'extension de l'espace d'essai qui minimisera (maximisera) la plus petite (grande) valeur propre. On peut démontrer que dans les deux cas la composante du gradient maximal perpendiculaire à l'espace de Krylov actuel est la même et exactement le vecteur que l'on ajoute à l'itération prochaine dans l'algorithme de Lanczos.

Notre discussion s'est limitée jusqu'ici à des vecteurs propres extrêmes, en particulier l'état le plus bas de la chaîne dans un sous-espace de l'espace de Hilbert (typiquement, avec $S^z_{total} = const.$). Ceci suffit pour calculer des gaps, qui sont, dans les chaînes de spin, donnés[3] par les différences en énergie des états fondamentaux dans les sous-espaces avec $S^z_{total} = 0$ et $S^z_{total} = 1$. Afin d'explorer tout le spectre à basse énergie, il faut calculer aussi des vecteurs propres qui sont seulement proches des bords du spectre. Comme tous les vecteurs de Lanczos $|v_i\rangle$ sont par construction orthogonaux, on attend que, en continuant l'itération, les nouveaux vecteurs de Lanczos seront en particulier orthogonaux au vecteur propre le plus bas en énergie, et l'algorithme va converger vers la deuxième valeur propre, et ainsi de suite.Or, la précision limitée de l'ordinateur, qui empêche les vecteurs d'être parfaitement orthogonaux, introduit des petites mélanges du vecteur propre le plus bas dans les nouveaux vecteurs. La vitesse de convergence vers les valeurs propres extrêmes très grande suffit souvent à faire converger l'algorithme

[3] La situation devient plus complexe si l'on introduit des anisotropies ; voir plus bas.

de Lanczos encore une fois vers la valeur propre la plus basse. Pour empêcher ça, nous redemarrons l'algorithme après sa première convergence, prenons l'approximation actuelle du deuxième vecteur propre comme premier vecteur d'essai et orthogonalise *chaque* nouveau vecteur de Lanczos par rapport au vecteur propre de l'état propre le plus bas $|u\rangle$:

$$\beta_{i+1}|v_{i+1}\rangle = H|v_i\rangle - \alpha_i|v_i\rangle - \beta_i|v_{i-1}\rangle - \xi_i|u\rangle \tag{2.10}$$

avec $\xi_i = (\langle v_i|H - \alpha_i\langle v_i|)|u\rangle$. Ceci se généralise à un groupe des vecteurs propres, mais devient inutile pour des vecteurs au milieu du spectre. Ceux-ci sont effectivement incalculables par cet algorithme.

2.2.4 Construction du produit de l'Hamiltonien par le vecteur d'état

Etant donné un vecteur d'état $|v\rangle$ et un Hamiltonien H, on se propose de calculer $|u\rangle = H|v\rangle$. C'est dans cette partie de l'algorithme que le plupart du temps de calcul est consommé. Nous utilisons la répartition de l'Hamiltonien donnée par (2.4). Dans cette représentation, chaque partie de l'Hamiltonien est diagonal dans au moins un bloc, ce qui réduit le coût du calcul.

Données :

1. nombre d'états dans le bloc gauche M_L ; nombre d'états dans le bloc droit M_R ; valeur totale du bon nombre quantique Q_{total} pour l'état visé ; positions p_L et p_R du dernier (premier) spin du bloc gauche (droit) ; nombre d'états des nouveaux sites N.
2. Vecteur d'état
$$|v\rangle = \sum_{m_L=1}^{M_L} \sum_{m_R=1}^{M_R} \sum_{\sigma_L=1}^{N} \sum_{\sigma_R=1}^{N} \langle m_L\sigma_L\sigma_R m_R|v\rangle |m_L\sigma_L\sigma_R m_R\rangle$$
3. Hamiltonien des interactions entre nouveaux sites
$$\langle\sigma_L\sigma_R|H_{\bullet\bullet}|\sigma'_L\sigma'_R\rangle$$
4. Hamiltonien des interactions entre blocs et sites et au sein des blocs
$$\langle m_L\sigma_L|H_{L\bullet}|m'_L\sigma'_L\rangle$$
$$\langle m_R\sigma_R|H_{\bullet R}|m'_R\sigma'_R\rangle$$

où la taille effective de chaque matrice est $\propto M^2_{L(R)}N$ seulement : dans les cas où seulement un spin (particule) est ajouté au bloc et caractérisé par un bon nombre quantique unique pour chacun de ses états $Q(|\sigma'_L\rangle)$, $|\sigma'_L\rangle$ est implicitement donné par $Q(|\sigma'_L\rangle) = Q(|\sigma_L\rangle) + Q(|M_L\rangle) - Q(|M'_L\rangle)$. Pour des spins, on utilise S^z, pour des électrons, S^z et n_i, le nombre d'occupation du site ; si l'on ajoute plusieurs spins, comme dans le problème des chaînes couplées, il faut fournir de l'information additionnelle sur le spin en interaction afin d'établir un lien entre Q et les états de spin.

5. Liste des valeurs des bons nombres quantiques pour les états du bloc gauche de longueur p_L et du bloc droit de longueur $L_0 + 1 - p_R$

$$Q(|m_L\rangle); Q(|m_R\rangle)$$

Calcul :

1. $|u\rangle = 0$
2. Calcul de $H_{L\bullet}|v\rangle$: Pour chaque valeur de $Q \equiv Q(|m_L\rangle)$ auquel correspond au moins un état $|m_L\rangle$, on forme l'ensemble $\{|m_L\rangle\}$ non-vide d'états correspondants.

   Pour chaque $|\sigma_L\rangle$ et chaque $|\sigma_R\rangle$ on cherche l'ensemble $\{|m_R\rangle\}$ avec

$$Q_{total} = Q + Q(|m_R\rangle) + Q(|\sigma_L\rangle) + Q(|\sigma_R\rangle). \tag{2.11}$$

   On calcule tous les $|\sigma'_L\rangle$ liés par un élément de matrice non-nul de $H_{L\bullet}$ à $|\sigma_L\rangle$. Si $Q(|\sigma_L\rangle) \neq Q(|\sigma'_L\rangle)$, on cherche l'ensemble $\{|m'_L\rangle\}$ avec

$$Q_{total} = Q(|m'_L\rangle) + Q(|m_R\rangle) + Q(|\sigma'_L\rangle) + Q(|\sigma_R\rangle). \tag{2.12}$$

   Sinon, on a simplement $\{|m_L\rangle\} = \{|m'_L\rangle\}$.

   Dans les cas où $\{|m'_L\rangle\}$ est non-vide, on calcule

$$\begin{aligned}\langle m'_L\sigma'_L\sigma_R m_R|u\rangle \quad \leftarrow \quad & \langle m'_L\sigma'_L\sigma_R m_R|u\rangle + \\ & \sum_{\{|m_L\rangle\},|\sigma_L\rangle} \langle m'_L\sigma'_L|H_{L\bullet}|m_L\sigma_L\rangle\langle m_L\sigma_L\sigma_R m_R|v\rangle\end{aligned} \tag{2.13}$$

   pour chaque élément de $\{|m'_L\rangle\}$, $|\sigma_R\rangle$, $|m_R\rangle$.
3. Calcul de $H_{\bullet R}|v\rangle$: comme ci-dessus après échange $L \leftrightarrow R$.
4. Calcul de $H_{\bullet\bullet}|v\rangle$: Pour chaque valeur de $Q \equiv Q(|m_L\rangle)$ à laquelle correspond au moins un état $|m_L\rangle$, on forme l'ensemble $\{|m_L\rangle\}$ non-vide d'états correspondants.

Pour chaque $|\sigma_L\rangle$ et chaque $|\sigma_R\rangle$ on cherche l'ensemble $\{|m_R\rangle\}$ avec

$$Q_{total} = Q + Q(|m_R\rangle) + Q(|\sigma_L\rangle) + Q(|\sigma_R\rangle).$$

Les interactions entre les nouveaux sites laissent invariant les nombres quantiques des blocs et de l'ensemble des nouveaux sites. On cherche alors tous les $|\sigma'_L\sigma'_R\rangle$ avec $Q(|\sigma_L\rangle)+Q(|\sigma_R\rangle) = Q(|\sigma'_L\rangle)+Q(|\sigma'_R\rangle)$. Si $\langle\sigma_L\sigma_R|H_{\bullet\bullet}|\sigma'_L\sigma'_R\rangle \neq 0$ on calcule pour eux

$$\begin{aligned}\langle m_L\sigma'_L\sigma'_R m_R|u\rangle \quad \leftarrow \quad & \langle m_L\sigma'_L\sigma'_R m_R|u\rangle + \\ & \sum_{|\sigma_L\rangle,|\sigma_R\rangle} \langle\sigma'_L\sigma'_R|H_{\bullet\bullet}|\sigma_L\sigma_R\rangle\langle m_L\sigma_L\sigma_R m_R|v\rangle\end{aligned} \tag{2.14}$$

pour chaque pair d'éléments de $\{|m_L\rangle\}$ et $\{|m_R\rangle\}$.

Résultat : Vecteur d'état $|u\rangle = H|v\rangle$.

2.2.5 Calcul et analyse de la matrice de densité réduite

Cette partie de l'algorithme effectue le choix des vecteurs d'état à retenir et a déjà été décrite ci-dessus. Je donne les détails pour la troncation du bloc gauche ; elle doit être repetée pour le bloc droit.

Il est utile de séparer dans la matrice de densité les $|m_L\sigma_L\rangle$ dans des groupes avec le même nombre quantique Q ; il n'y a pas d'élément de matrice non-nul entre des états qui diffèrent dans Q ; on peut alors se limiter à une diagonalisation des sous-matrices : on évite des erreurs numériques, des petits mélanges d'états à différent Q, et on gagne beaucoup de temps : la diagonalisation complète d'une matrice pleine de taille N_0 avec calcul des vecteurs propres est un algorithme d'ordre N_0^3 ; pour $M_L = 200$ et $N_L = 5$, $N_0 = 1000$, ce qui mène à un calcul important.

Données :

1. nombre d'états dans le bloc gauche M_L ; nombre d'états dans le bloc droit M_R ; nombre d'états du nouveau site N ; nombre quantique des états du bloc $Q(|m_L\rangle)$.
2. Etat visé pour le système qu'on vient de diagonaliser :

$$|\Psi\rangle = \sum_{m_L,m_R=1}^{M_L,M_R} \sum_{\sigma_L,\sigma_R=1}^{N} \langle m_L\sigma_L\sigma_R m_R|\Psi\rangle|m_L\sigma_L\sigma_R m_R\rangle$$

3. Hamiltonien du bloc gauche plus le nouveau site à gauche et des interactions au sein du bloc :
$$\langle m_L \sigma_L | H_{L\bullet} | m'_L \sigma'_L \rangle$$

Calculs :

1. Construction de la matrice de densité réduite ρ_L :
$$\langle m_L \sigma_L | \rho | m'_L \sigma'_L \rangle = \sum_{m_R=1}^{M_R} \sum_{\sigma_R=1}^{N_R} \langle m_L \sigma_L \sigma_R m_R | \Psi \rangle \langle \Psi | m'_L \sigma'_L \sigma_R m_R \rangle \tag{2.15}$$
2. On cherche tous les $Q(|m_L\sigma_L\rangle) = Q(|m_L\rangle) + Q(|\sigma_L\rangle)$ et regroupe les états dans des groupes des états à même Q. Ceci donne la matrice de densité bloc-diagonale. On diagonalise tous les blocs, et retient les vecteurs et valeurs propres.
3. Parmi les $M_L N$ valeurs propres λ_i, on cherche les M_L plus grands. On retient les vecteurs propres associés (voir tableau 2.1)
$$|\tilde{m}_L\rangle = \sum_{m_L;\sigma_L} \langle m_L \sigma_L | \tilde{m}_L \rangle | m_L \sigma_L \rangle. \tag{2.16}$$
comme nouveaux vecteurs de base du bloc de l'étape prochaine $A' = A + \bullet$. Cette information sera aussi utile à l'étape prochaine afin de construire l'interaction entre le bloc A' et le nouveau site.
4. On calcule l'erreur de troncation $\rho_{1L} = 1 - \sum \lambda_i$, où la somme est sur les $\tilde{M}_L$ valeurs propres retenues.
5. Le choix des nouveaux états de base correspond à une transformation de base tronquée (avec perte d'information). On exprime l'Hamiltonien du bloc gauche et du nouveau site gauche dans cette base :
$$\langle \tilde{m}_L | H_{L\bullet} | \tilde{m}'_L \rangle = \sum_{m_L m'_L \sigma_L \sigma'_L} \langle \tilde{m}_L | m_L \sigma_L \rangle \langle m_L \sigma_L | H_{L\bullet} | m'_L \sigma'_L \rangle \langle m'_L \sigma'_L | \tilde{m}'_L \rangle \tag{2.17}$$
Cette transformation, un calcul d'ordre M_L^4 dans la version donnée ici, est mieux implementée comme deux multiplications d'ordre M_L^3 (voir le calcul des valeurs moyennes pour un état visé pour une discussion de ce problème récurrent).

Résultats :

1. erreur de troncation ρ_{1L} (celle pour le bloc droit est pour des systèmes symétriques à des effets numériques près identique à celle-ci ; on peut donc omettre l'indice L).

2. Hamiltonien du bloc de l'étape prochaine

$$\langle \tilde{m}_L | H_{L\bullet} | \tilde{m}'_L \rangle$$

3. Nouveaux états de base pour A'

$$|\tilde{m}_L\rangle = \sum_{m_L;\sigma_L} \langle m_L \sigma_L | \tilde{m}_L \rangle | m_L \sigma_L \rangle.$$

avec leur bon nombre quantique associé $Q(|\tilde{m}_L\rangle)$.

4. Valeurs propres associées aux nouveaux états de base

$$\lambda(|\tilde{m}_L\rangle)$$

2.2.6 Calcul de l'erreur de pertinence ρ_2

On calcule une matrice de densité réduite pour un bloc (nous prenons ici le bloc gauche). Cette matrice de densité avec longueur M_L pour A est alors comparée élément par élément avec la matrice de densité réduite construite à l'étape précédente dans la base actuelle (le bloc A était alors A'), La matrice de densité de l'étape précédente est alors diagonale avec les valeurs propres associés aux vecteurs de base comme éléments diagonaux.

Données :

1. nombre d'états dans le bloc gauche M_L ; nombre d'états dans le bloc droit M_R ; nombre d'états du nouveau site à gauche N.
2. Etat visé pour le système que l'on vient de diagonaliser :

$$|\Psi\rangle = \sum_{m_L,m_R=1}^{M_L,M_R} \sum_{\sigma_L,\sigma_R=1}^{N} \langle m_L \sigma_L \sigma_R m_R | \Psi \rangle | m_L \sigma_L \sigma_R m_R \rangle$$

3. Valeurs propres associées aux états de base construits *à l'étape précédente :*

$$\lambda(|m_L\rangle)$$

Calculs :

1. Construction de la matrice de densité réduite pour le bloc gauche :

$$\langle m_L | \rho' | m'_L \rangle = \sum_{m_R=1}^{M_R} \sum_{\sigma_R=1}^{N} \sum_{\sigma_L=1}^{N} \langle m_L \sigma_L \sigma_R m_R | \Psi \rangle \langle \Psi | m'_L \sigma_L \sigma_R m_R \rangle \qquad (2.18)$$

2. Sommation de la différence entre les éléments des matrices de densité :

$$\rho_{2L} = \sum_{m_L=1}^{M_L} \sum_{m'_L=1}^{M_L} |\lambda(|m_L\rangle)\delta_{m_L,m'_L} - \langle m_L|\rho'|m'_L\rangle| \qquad (2.19)$$

Résultat : La somme des différences absolues entre les éléments des deux matrices de densité, l'erreur de pertinence ρ_{2L} (identique à ρ_{2R}, sauf pour des systèmes asymétriques).

2.2.7 Initialisation et mise à jour des valeurs moyennes

Initialisation des valeurs moyennes

Nous supposons que les opérateurs que nous allons calculer sont tous séparables, dans le sens qu'un opérateur $O_{p_1p_2\ldots p_P}$ agissant sur P sites factorise dans des opérateurs qui chacun agissent sur un site seulement : $O_{p_1p_2\ldots p_P} = O_{p_1}O_{p_2}\ldots O_{p_P}$ et commutent entre eux. La procédure consiste en ajoutant l'opérateur O_p dans l'étape où le site p est le nouveau site ajouté.

Il faut faire une distinction entre les opérateurs O_{p_1} qui sont seuls dans leur moitié de la chaîne ou la contribution O_{p_1} à un produit d'opérateurs (si encore une fois nous ne considérons que la moitié gauche), et tous les autres. Pour ceux-là, on combine la nouvelle valeur moyenne avec les résultats déjà obtenus.

Il est essentiel d'utiliser l'information du nombre quantique afin d'éviter des calculs d'éléments de matrice strictement nuls, et de partitionner le calcul de telle façon que l'on évite des calculs de l'ordre M^4, qui peuvent toujours être écrits comme plusieurs calculs de l'ordre M^3.

Données :

1. nombre d'états dans le bloc gauche M_L ; nombre d'états dans le nouveau bloc gauche $\tilde{M}_L$; nombre d'états des nouveaux sites à gauche N_L.
2. Nouveaux états de base

$$|\tilde{m}_L\rangle = \sum_{m_L;\sigma_L} \langle m_L\sigma_L|\tilde{m}_L\rangle|m_L\sigma_L\rangle.$$

avec leur bon nombre quantique associé $Q(|\tilde{m}_L\rangle)$ et les nombres quantiques $Q(|m_L\rangle)$.

3. Valeurs moyennes déjà calculées pour des opérateurs agissant sur la moitié gauche :
$$\langle m_L | O_{p_1 p_2 \ldots} | m'_L \rangle$$

Calculs :

1. On groupe les opérateurs O_{p_L} auxquels on s'intéresse par leur comportement regardant le nombre quantique Q. Supposons un opérateur qui ajoute une quantité Δ : Si $O_{p_L}|\sigma'_L\rangle = o_{p_L}|\sigma_L\rangle \neq 0$, $Q(|\sigma_L\rangle) = Q(|\sigma'_L\rangle) + \Delta$. Des opérateurs comme S^z, S^+ et S^- rentrent dans ce cadre ; ceci n'est pas le cas, par exemple, pour S^x.
2. Pour des opérateurs, qui agissent seulement sur un site dans une moitié de la chaîne, on calcule les valeurs moyennes dans la base $\{|\tilde{m}_L\rangle\}$. Pour chaque Q' permis, on trouve $Q = Q' + \Delta$ et les deux ensembles d'états $\{|\tilde{m}_L\rangle\}$ et $\{|\tilde{m}'_L\rangle\}$ qui ont les nombres quantiques Q et Q'. Si les deux ne sont pas vides, on cherche, pour chaque $|\sigma'_L\rangle$, l'ensemble $\{|m'_L\rangle\}$ où $Q' = Q(|\sigma'_L\rangle) + Q(|m'_L\rangle)$ et l'ensemble $\{|m_L\rangle\}$ où $Q = Q(|\sigma_L\rangle) + Q(|m_L\rangle)$. Alors on calcule
$$\langle \tilde{m}_L | O_{p_L} | \tilde{m}'_L \rangle = \sum_{|\sigma_L\rangle} \sum_{\{|m_L\rangle\}, \{|m'_L\rangle\}} \langle \tilde{m}_L | m_L \sigma_L \rangle \langle \sigma_L | O_{p_L} | \sigma'_L \rangle \langle m'_L \sigma'_L | \tilde{m}'_L \rangle, \tag{2.20}$$
où $|\sigma_L\rangle$ est donné par l'action de O_{p_L} sur $|\sigma'_L\rangle$.
3. Pour un opérateur qui agit sur plusieurs sites d'une moitié de la chaîne, il faut prendre en compte qu'on connaît déjà $\langle m_L | O_{p_1 p_2 \ldots} | m'_L \rangle$, où $O_{p_1 p_2 \ldots}$ est la partie de l'opérateur agissant sur des sites plus à gauche. Nous calculons donc
$$\langle m_L \sigma_L | O_{p_1 \ldots p_L} | m'_L \sigma'_L \rangle = \langle m_L | O_{p_1 p_2 \ldots} | m'_L \rangle \langle \sigma_L | O_{p_L} | \sigma'_L \rangle \tag{2.21}$$
et transformons dans la nouvelle base,
$$\langle m_L \sigma_L | O_{p_1 \ldots p_L} | \tilde{m}'_L \rangle = \sum_{m'_L \sigma'_L} \langle m_L \sigma_L | O_{p_1 \ldots p_L} | m'_L \sigma'_L \rangle \langle m'_L \sigma'_L | \tilde{m}'_L \rangle \tag{2.22}$$
et
$$\langle \tilde{m}_L | O_{p_1 \ldots p_L} | \tilde{m}'_L \rangle = \sum_{m_L \sigma_L} \langle \tilde{m}_L | m_L \sigma_L \rangle \langle m_L \sigma_L | O_{p_1 \ldots p_L} | \tilde{m}'_L \rangle, \tag{2.23}$$
où nous regroupons les états dans des ensembles qui obéissent $Q(|m_L\rangle) + Q(|\sigma_L\rangle) = Q(|\tilde{m}_L\rangle)$ et où l'opérateur n'a pas une valeur moyenne égal à 0, ce qui impose une condition différente selon la nature de l'opérateur. Ici nous avons partitionné un calcul de l'ordre M^4 en deux calculs de l'ordre

M^3. Cette réduction de temps de calcul devient très important pour la mise à jour des valeurs moyennes (ci-dessous), qui implique un très grand nombre de telles transformations.

Résultats : Les valeurs moyennes des opérateurs dans chaque moitié de la chaîne qui agissent (aussi) sur le site qu'on vient d'ajouter, p_L, dans la base la plus récente : $\langle \tilde{m}_L | O_{p_1 \dots p_L} | \tilde{m}'_L \rangle$.

Mise à jour des valeurs moyennes

Chaque opérateur est, à chaque étape, représenté dans la base $\{|m_{L(R)}\rangle\}$. S'il n'est pas automatiquement mis à jour (transformé dans la nouvelle base $\{|\tilde{m}_{L(R)}\rangle\}$), parce qu'il fait part d'un produit d'opérateurs qui agit aussi sur le site que l'on vient d'ajouter, il faut faire cette transformation explicitement.

Elle est en principe identique à la transformation que je viens de décrire ; dans tous les cas pratiques, cette transformation est la partie la plus coûteuse en temps de calcul dans le calcul des valeurs moyennes. Il est alors essentiel de réduire le temps de calcul avec les mesures décrites ci-dessus. Les données sont identiques au calcul précédent ; on remplace dans (2.21) O_{p_L} par l'identité et repète le calcul de (2.22) et (2.23).

2.2.8 Calcul final des valeurs moyennes avec tous les points dans une moitié de la chaîne

On se trouve à la fin de la dernière étape de croissance ou d'itération. L'état visé est donné dans une base de produit des états des blocs et des nouveaux sites. Or, toutes les valeurs moyennes sont données dans les nouvelles bases qui décrivent le bloc gauche plus le nouveau site gauche et le bloc droit plus le nouveau site droit. Il faut alors d'abord exprimer l'état visé dans les nouvelles bases. Il est important de réduire ce problème aux sous-espaces de l'espace d'Hilbert qui sont compatible avec la valeur totale du bon nombre quantique pour la chaîne Q_{total} pour réduire le temps de calcul. C'est aussi vrai pour le calcul des valeurs moyennes, qui devient important comme il est répété typiquement L_0 fois (L_0 étant la longueur totale).

Données :

1. nombre d'états dans le bloc gauche M_L ; nombre d'états dans le bloc droit M_R ; le même pour les nouveaux blocs, qui comportent une moitié de la chaîne chacun : $\tilde{M}_L$ et $\tilde{M}_R$; nombre d'états des nouveaux sites à gauche et droite N ; Q_{total} pour la chaîne complète.
2. Etat visé pour le système que l'on vient de diagonaliser :

$$|\Psi\rangle = \sum_{m_L,m_R=1}^{M_L,M_R} \sum_{\sigma_L,\sigma_R=1}^{N} \langle m_L\sigma_L\sigma_R m_R|\Psi\rangle |m_L\sigma_L\sigma_R m_R\rangle$$

3. Nombres quantiques associées aux états de base construits à l'étape précédente et à l'étape actuelle : $Q(|m_{L(R)}\rangle)$ et $Q(|\tilde{m}_{L(R)}\rangle)$.
4. Eléments de matrice pour les opérateurs que l'on veut calculer (considérons seulement la moitié gauche) :

$$\langle \tilde{m}_L|O_L|\tilde{m}'_L\rangle$$

5. Nouveaux états de base

$$|\tilde{m}_L\rangle = \sum_{m_L;\sigma_L} \langle m_L\sigma_L|\tilde{m}_L\rangle |m_L\sigma_L\rangle.$$

Calculs :

1. Transformation de l'état visé dans les nouvelles bases : D'abord, on met $\langle \tilde{m}_L\tilde{m}_R|\Psi\rangle = 0$. Pour chaque valeur du bon nombre quantique Q permise, on groupe tous les $|m_L\rangle$ avec $Q = Q(|m_L\rangle)$. Pour chaque $|\sigma_L\rangle$ et $|\sigma_R\rangle$, on cherche l'ensemble des $|m_R\rangle$ qui vérifient

$$Q_{total} = Q(|m_L\rangle) + Q(|\sigma_L\rangle) + Q(|\sigma_R\rangle) + Q(|m_R\rangle). \tag{2.24}$$

On calcule maintenant la représentation dans les nouvelles bases :

$$\langle \tilde{m}_L\tilde{m}_R|\Psi\rangle \leftarrow \langle \tilde{m}_L\tilde{m}_R|\Psi\rangle + \sum_{\{|m_L\rangle\}} \sum_{\{|m_R\rangle\}} \langle m_L\sigma_L\sigma_R m_R|\Psi\rangle \langle \tilde{m}_L|m_L\sigma_L\rangle \langle \tilde{m}_R|m_R\sigma_R\rangle \tag{2.25}$$

2. Calcul final des valeurs moyennes avec tous les points dans une moitié de la chaîne : considérons seulement le cas de la moitié gauche, l'autre est analogue. Mettons $\langle\Psi|O_L|\Psi\rangle = 0$. Pour chaque Q, on cherche l'ensemble $\{|m_L\rangle\}$ et l'ensemble $\{|m_R\rangle\}$ tel que $Q = Q(|m_L\rangle)$ et $Q_{total} = Q(|m_L\rangle) + Q(|m_R\rangle)$ et calcule

$$\langle\Psi|O_L|\Psi\rangle \leftarrow \langle\Psi|O_L|\Psi\rangle + \sum_{\{|m_L\rangle\}} \sum_{\{|m_R\rangle\}} \langle\Psi|\tilde{m}_L\tilde{m}_R\rangle \langle\tilde{m}_L|O_L|\tilde{m}'_L\rangle \langle\tilde{m}'_L\tilde{m}_R|\Psi\rangle \tag{2.26}$$

Résultats :

1. Etat visé $|\Psi\rangle$ dans les nouvelles bases des derniers blocs, qui chacun représentent une moitié de la chaîne :
$$\langle \tilde{m}_L \tilde{m}_R | \Psi \rangle.$$
2. Pour tous les opérateurs O_L (O_R) qui agissent seulement sur la moitié gauche (droite) de la chaîne,
$$\langle \Psi | O_{L(R)} | \Psi \rangle.$$

2.2.9 Calcul final des valeurs moyennes avec des points dans les deux moitiés de la chaîne

Ce calcul est presque identique au calcul précédent. Il présuppose l'expression de l'état $|\Psi\rangle$ dans les bases finales des blocs (voir ci-dessus). Une différence vient du fait que les opérateurs limités à une partie de la chaîne ne peuvent pas avoir des valeurs moyennes sauf s'ils ne changent pas le bon nombre quantique dans cette partie. Ici, seulement Q_{total} doit être conservée ce qui permet des changements de Q dans chaque moitié. Il faut séparement considérer le comportement des opérateurs qui mènent à des changements différents de Q.

Nous supposons que chaque opérateur O_{LR} qui agit sur les deux moitiés peut être écrit comme produit de deux opérateurs qui n'agissent que sur une moitié : $O_{LR} = O_L O_R$. Ceci est le cas pour tous les opérateurs que l'on considère normalement. Il est essentiel, pour accélérer les calculs, d'exprimer le calcul suivant, qui est de l'ordre M^4, sous la forme de deux calculs de M^3.

Données :

1. nombre d'états pour les nouveaux blocs, qui comportent une moitié de la chaîne chacun : $\tilde{M}_L$ et $\tilde{M}_R$ nombre d'états des nouveaux sites à gauche et droite N ; nombre quantique de la chaîne totale Q_{total}.
2. Etat visé $|\Psi\rangle$ dans les nouvelles bases des derniers blocs, qui chacun représente une moitié de la chaîne :
$$\langle \tilde{m}_L \tilde{m}_R | \Psi \rangle.$$
3. Nombres quantiques associés aux états de base construits à l'étape actuelle : $Q(|\tilde{m}_{L(R)}\rangle)$.

4. Eléments de matrice pour les opérateurs que l'on veut calculer :
$$\begin{array}{c}\langle\tilde{m}_L|O_L|\tilde{m}'_L\rangle\\ \langle\tilde{m}_R|O_R|\tilde{m}'_R\rangle\end{array}\qquad,$$
où $O_{LR} = O_L O_R$.

Calculs :

1. On groupe les opérateurs O_L et O_R selon leur action sur le bon nombre quantique : si O_L donne $Q_L = Q'_L + \Delta$ pour la moitié gauche, O_R donne dans sa moitié $Q_R = Q'_R - \Delta$. Concentrons dans le suivant sur le cas où $\Delta \neq 0$, ce qui est le plus difficile (exemple : S^+, S^-).
2. On groupe les états $|\tilde{m}_L\rangle$ selon leur nombre quantique Q_L et trouve l'ensemble des états $\{|\tilde{m}_R\rangle\}$ ainsi que $Q_{total} = Q_L + Q(|\tilde{m}_R\rangle)$.
3. On trouve les ensembles $\{|\tilde{m}'_L\rangle\}$ et $\{|\tilde{m}'_R\rangle\}$ ainsi que $Q(|\tilde{m}_L\rangle) = Q(|\tilde{m}'_L\rangle)+\Delta$ et $Q(|\tilde{m}_R\rangle) = Q(|\tilde{m}'_R\rangle) - \Delta$.
4. Dans le cas où les quatres ensembles sont non vides, on calcule d'abord (en prenant l'expression suivante comme définition ; la notation n'est pas tout à fait standard ici)
$$\langle\tilde{m}'_L\tilde{m}_R|O_R|\Psi\rangle = \sum_{\{|\tilde{m}'_R\rangle\}}\langle\tilde{m}'_L\tilde{m}'_R|\Psi\rangle\langle\tilde{m}'_R|O_R|\tilde{m}_R\rangle \tag{2.27}$$
et dans un deuxième temps
$$\langle\tilde{m}_L\tilde{m}_R|O_LO_R|\Psi\rangle = \sum_{\{|\tilde{m}'_L\rangle\}}\langle\tilde{m}_L|O_L|\tilde{m}'_L\rangle\langle\tilde{m}'_L\tilde{m}_R|O_R|\Psi\rangle \tag{2.28}$$
et alors
$$\langle\Psi|O_{LR}|\Psi\rangle = \sum_{\{\tilde{m}_L\}}\sum_{\{\tilde{m}_R\}}\langle\Psi|\tilde{m}_L\tilde{m}_R\rangle\langle\tilde{m}_L\tilde{m}_R|O_LO_R|\Psi\rangle, \tag{2.29}$$
ce qui est le résultat recherché.

Résultat : $\langle\Psi|O_{LR}|\Psi\rangle$ pour tous les opérateurs désirés.

2.3 Discussion des moyens informatiques nécessités par le DMRG

2.3.1 Temps de calcul

La discussion du *temps de calcul* se résume assez facilement. L'algorithme est un algorithme de l'ordre M^3 ; nous avons vu que toutes les contributions de

M	t[sec]	v[MFlops]	t*v [MFlops*sec]	6.4 $(M/90)^3$
90	575	111	6.4 $\times 10^4$	6.4
120	1226	126	15.5 $\times 10^4$	15.4
150	1786	161	28.8 $\times 10^4$	29.4

TAB. 2.2: *Temps de calcul de l'état fondamental d'une chaîne de spin 2 ouverte de longueur $L = 150$ en fonction de M, avec la vitesse de l'ordinateur v, comparé à une dépendance théorique de M^3.*

l'ordre M^4 peuvent être exprimées comme deux calculs de l'ordre M^3 chacun. L'utilisation de symétries internes de l'Hamiltonien qui permet d'exclure la plus grande partie d'éléments de matrice accélère l'algorithme par un facteur global. Considérons les valeurs que nous avons obtenues pour les calculs d'une chaîne de spin 2, dans le tableau 2.2. Les temps (en secondes) sont nécessaires pour calculer l'état fondamental d'une chaîne de spin antiferromagnétique isotrope de longueur $L = 150$. Comme pour des M plus grands les boucles du logiciel deviennent plus longues, un ordinateur vectoriel sera plus rapide. Pour éliminer cet effet (bien utile) nous comparons tv (v étant le nombre des millions d'opérations de calcul par seconde) à la valeur attendue si la croissance du temps de calcul serait en $6.4(M/90)^3$. Il est clair que la croissance est très bien donnée par cette loi, le nombre d'itérations de Lanczos étant peu dépendants de M.

Nous nous sommes limités à utiliser las conservation de l'aimantation totale afin d'accélérer le programme ; l'utilisation de symétries additionnelles réduit encore une fois le temps de calcul, au prix d'un programme de plus en plus complexe, ce qui augmente énormement le travail de vérification du code. Pour les travaux décrits dans ce mémoire, le temps de calcul n'était pas le premier souci, la réduction du temps de calcul à cause de l'utilisation de S^z_{total} comme bon nombre quantique étant déjà de l'ordre 20 à 100.

On s'aperçoit que pour des calculs lourds c'est plutôt le besoin de *mémoire*, qui limite cet algorithme. Evidemment, on peut toujour avoir recours à la mémoire de disques ; mais une particularité du DMRG est que le nombre d'opérations de calcul par rapport aux opérations de lecture et écriture de mémoire est petit et typiquement inférieur à 1. L'utilisation de disques aurait alors pour conséquence une telle augmentation du temps de calcul qu'elle n'est pas faisable.

2.3.2 Utilisation de la mémoire vive

La mémoire utilisé se répartit dans trois parties :

1. Mémoire pour retenir l'information essentielle sur le déroulement de l'algorithme et surtout l'Hamiltonien. Le besoin est de l'ordre M^2N mots (voir sect. 2.2.2, avec N le nombre d'états par site. C'est le besoin minimum de l'algorithme pour un calcul d'énergies dans la version de taille infinie. Pour la version de taille finie, il faut encore retenir l'information sur les blocs engendrés dans les étapes precédentes. Le besoin additionel est, avec L_0 la longueur totale, de l'ordre de L_0M^2N mots, une taille critique par rapport aux tailles de mémoire vive typiquement disponibles.
2. Mémoire pour retenir l'information sur les opérateurs et leurs valeurs moyennes ; de l'ordre OL_0M^2, avec L_0 la longueur totale du sysème et O le nombre des types d'opérateur que l'on veut calculer (de l'ordre 3 à 7 dans nos applications). Cette mémoire est indispensable pour un calcul des valeurs moyennes et d'une taille critique.
3. Mémoire pour retenir les vecteurs de Lanczos en provenance de la diagonalisation. Dans l'algorithme de Lanczos il faut construire le vecteur propre après la convergence de la valeur propre à l'aide des vecteurs de Lanczos. Si l'on ne les garde pas, il faut répéter l'algorithme pour les reconstruire ; comme du point de vue de temps de calcul c'est la partie dominante du DMRG, le temps de calcul total double effectivement. Nous gardons un nombre de vecteurs qui est de l'ordre du nombre d'itérations de Lanczos que l'on trouve normalement (dans toutes les applications, à part de quelques cas pathologiques, inférieur à 100), et recalculons le reste des vecteurs, si ce nombre ne suffit pas. Le besoin est alors de l'ordre de $100M^2N^2$ mots de mémoire et aussi de taille critique ; mais au prix du temps de calcul on peut éviter ce besoin.

Pour donner des chiffres, pour les calculs pour la chaîne de spin 2, le besoin de mémoire était *sans valeurs moyennes* avec 80 vecteurs de Lanczos retenus dans la version taille finie pour $L = 270$ et $M = 150$ de l'ordre d'un gigaoctet. Pour des M plus grands, c'était nécessaire de réduire le nombre des vecteurs de Lanczos retenus.

Il est possible, en principe, de réduire de plus d'un ordre de grandeur la mémoire utilisée, si l'on utilise l'information sur la structure des sous-espaces et on ne garde pas des matrices d'une taille proportionnelle à M^2, où beaucoup d'éléments sont forcément zéro, mais seulement les sous-blocs qui sont définis par les nombres quantiques. Le problème est que leur taille change dynamiquement avec la longueur de la chaîne. Ce processus doit être suivi par le logiciel, qui devient encore plus complexe (et difficile à vérifier). En tout cas, sur les ordinateurs de performance suffisante on aura seulement le choix de FORTRAN et C pour implémenter cet algortihme. FORTRAN se prête très mal à cette modification, on est alors forcé d'utiliser C. Il semble que Noack, White, et Scalapino utilisent cette modification[Noack 94b], sans par ailleurs avoir publié des détails.

Deuxième partie

Application : Chaînes de spin quantiques

Dans cette partie de la thèse, nous allons, dans un premier temps, étudier la physique des chaînes de spin antiferromagnétiques quantiques. D'abord, nous allons exposer quelques résultats connus depuis longtemps pour les chaînes de spin quantiques de spin 1/2, que l'on considérait longtemps comme généralisables à tout spin S. Ensuite, nous allons discuter la conjecture de Haldane, qui, par une correspondance avec le modèle σ non-linéaire quantique, exacte dans la limite classique $S \to \infty$, montre une différence fondamentale entre les chaînes de spin quantiques isotropes à spin entier et demi-entier, les deux désordonnées à $T = 0$, mais les unes avec un spectre avec gap et alors des corrélations spin-spin exponentielles, et les autres avec un spectre critique sans gap et des lois de puissance pour les corrélations spin-spin.

Bien que le modèle σ non-linéaire ait le mérite d'exposer clairement une différence entre les deux groupes des chaînes de spin, il ne donne pas d'information approfondie sur la nature de l'état fondamental et des excitations pour les chaînes à spin entier. Or, Affleck, Kennedy, Lieb et Tasaki ont donné une solution exacte et assez intuitive pour une certaine classe d'Hamiltoniens pour les chaînes à spin entier, que nous allons appeler des Hamiltoniens AKLT. Ces Hamiltoniens sont assez spéciaux ; le cas le plus simple d'une interaction isotrope bilinéaire $J\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1}$ entre les voisins les plus proches ne figure pas parmi eux. Leur intérêt est qu'ils semblent avoir la propriété d'être des "Hamiltoniens cousins" des Hamiltoniens discutés par Haldane. Ceci veut dire que les propriétés calculés pour eux décrivent, non pas quantitativement, mais *génériquement*, la physique des chaînes de spin dans la phase dite de Haldane. Il est maintenant bien établi que c'est le cas au moins pour $S = 1$, mais la question reste ouverte pour $S > 1$.

Le cas $S = 1$ est encore une fois spécial, parce que Kennedy et Tasaki ont découvert pour lui une symétrie cachée brisée à laquelle ils proposent d'attribuer la présence du gap de Haldane pour $S = 1$. Il y a aussi un paramètre d'ordre (dit paramètre d'ordre string) associé introduit par den Nijs et Rommelse. La généralisation de la symétrie et du paramètre d'ordre à des spins plus grands est un sujet de recherche actuel et aucun consensus n'a été établi pour l'instant. Il a même été conjecturé[Oshikawa 92] qu'il y a encore une fois une différence entre les spin entiers pairs et impairs, et qu'on pourrait alors s'attendre à des surprises pour $S = 2$.

Après un exposé de ces idées, nous allons donner, pour la première fois, des estimations sérieuses pour le gap de Haldane pour $S = 2$ et la longueur de corrélation associée, ainsi que la vitesse des ondes de spin, et établir que la conjecture de Haldane est vérifiée aussi pour $S = 2$, en utilisant le DMRG. Nous calculons aussi la valeur du paramètre d'ordre proposé pour $S = 2$ et établissons qu'il a une valeur moyenne non-nulle à grande distance, et faisons la comparaison avec les prédictions du modèle AKLT. Tous ces résultats sont en accord avec l'hypothèse que, pour $S = 2$ aussi, le modèle AKLT est générique pour la phase de Haldane. Des interactions anisotropes peuvent briser l'ordre caché de la phase de Haldane. Ceci a été étudié en détail pour la chaîne $S = 1$. Nous présentons des résultats sur le comportement de la chaîne de spin 2 en présence d'une anisotropie $D(S_i^z)^2$. Les résultats sont surprenants : au lieu d'une transition de phase à un seul point, on trouve toute une région critique pour des D intermédiaires. Il n'y a aucune indication du comportement attendu dans la présence d'un effet pair-impair en S, et le mécanisme semble indiquer que le comportement observé est générique pour tout S entier plus grand que 1. La différence serait alors entre $S = 1$ et $S > 1$. Nos résultats nous permettent de présenter le diagramme de phase générique pour $S > 1$ entier, qui est bien différent de celui pour $S = 1$. Ici s'ouvre un sujet pour des recherches suivantes, car les symétries sous-jacentes ne sont pas encore connues.

Ensuite, nous arrivons à la question du lien du modèle AKLT avec les chaînes de spin isotropes, et nous considérons, pour $S = 1$, dans le contexte des chaînes de spin bilinéaires-biquadratiques, une généralisation qui contient les deux modèles. Nous allons exposer les différentes phases auxquelles on s'attend. Ensuite, nous allons étudier en détail la phase de Haldane dans ce modèle et démontrer que le modéle AKLT peut être aussi compris d'un point de vue complètement différent : il est, dans le diagramme de phase généralisé, un *point de désordre*, associé à un point de Lifshitz, lié à une transition entre une phase commensurable et une phase incommensurable. A notre connaissance, ceci est la première explication physique du comportement du modèle AKLT.

Nous terminons cette partie de la thèse avec une étude sur quelques aspects du diagramme de phase de deux chaînes de spin quantiques couplées, qui en plus de son intérêt propre est aussi lié, dans certains limites à différents modèles qui montrent un comportement tout à fait différent, comme les chaînes de spin 1/2 et de spin 1. Le modèle des chaînes couplées permet d'aborder quelques questions sur la nature de la “transition” entre ces modèles incompatibles.

Chapitre 3

La conjecture de Haldane

3.1 Exposé du problème des chaînes de spin quantiques

Commençons par un modèle "simple", le modèle de Heisenberg quantique pour S quelconque avec des interactions isotropes entre plus proches voisins :

$$H = J \sum_{<i,j>} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j = J \sum_{<i,j>} \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \tag{3.1}$$

Le couplage J est ferromagnétique pour $J < 0$ et antiferromagnétique pour $J > 0$; $< i, j >$ représente une somme sur des paires de voisins sur sites i et j, et les spins obéissent à des relations de commutation $[S_i^\alpha, S_j^\beta] = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma}\delta_{ij}S_i^\gamma$ (nous avons mis $\hbar = 1$). La dimension spatiale du modèle D est encore libre ; nous choisissons des conditions de bord *périodiques*.

Prenons pour l'instant un couplage *ferromagnétique* ; dans ce cas-là, l'état fondamental est connu, l'état avec le spin total maximal. Pour des spins S, le spin total maximal du système sera $N_{site}S$, avec N_{site} le nombre de sites, et l'état fondamental est alors $2N_{site}S + 1$ fois dégénéré. Nous définissons l'état fondamental $|0\rangle$ par son aimantation $S_i^z = +S$ sur tous les sites i, et son énergie par E_0. Comme l'Hamiltonien conserve l'aimantation totale $\sum_i M_i$, les états propres de l'Hamiltonien sont caractérisés par l'aimantation totale, ou une déviation de l'aimantation de $N_{site}S$. Nous appelons *particule* une déviation de l'aimantation sur un site de 1. On a alors un maximum de $2S$ particules sur un site, et on peut partitionner tout l'espace de Hilbert dans des ensembles d'états à un nombre de particules fixe. Pour un couplage *antiferromagnétique*, $|0\rangle$ n'est pas l'état fondamental, mais il reste un état propre que nous prenons comme point de départ de la construction de l'espace de Hilbert.

Un état à une particule a la forme $S_n^-|0\rangle$. Pour un état propre, nous faisons l'ansatz suivant (sans normalisation)

$$|\Psi_1(\mathbf{k})\rangle = \sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_n} S_n^-|0\rangle \tag{3.2}$$

à cause de l'invariance translationnelle. L'ansatz est un état propre exact avec une énergie

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + J[\frac{z}{2} - (\cos k_1 + \ldots + \cos k_D)], \tag{3.3}$$

pour un cube de dimension D comme réseau, z est le nombre de coordination, le nombre des voisins les plus proches sur le réseau.

Un *état à N particules* est comme un problème à N corps, compliqué et sans solution exacte en général. Les particules ne sont pas indépendantes ; il y a une *interaction* entre particules sur des sites voisins, et il y a un nombre maximal de $2S$ particules par site. Cette condition est dite *condition de cœur dur* pour $S = \frac{1}{2}$, où il y a au maximum un particule par site.

Pour $D = 3$ on peut supposer, pour des raisons topologiques, que la probabilité des particules d'occuper le même site où d'interagir est assez petite, et qu'en général elles agissent indépendamment. On fait alors l'ansatz suivant de produit non-normalisé pour l'état à N particules

$$|\Psi_N(\mathbf{k}_1, \ldots, \mathbf{k}_N\rangle = \prod_{j=1}^{N} \left(\sum_n e^{i\mathbf{k}_j\mathbf{r}_n} S_n^- \right) |0\rangle. \tag{3.4}$$

Si l'on ignore les interactions des particules, on trouve que cet état est un état propre (approximatif) de H avec l'énergie

$$E = E_0 + JN\frac{z}{2} - J\sum_{j=1}^{N}(\cos k_{j_1} + \ldots + \cos k_{j_D}). \tag{3.5}$$

ce qui est simplement la somme des contributions des états à un particule. Nous retrouvons ainsi l'ordre le plus bas de la théorie des *ondes de spin*, qui donne des résultats très satisfaisants pour $D = 3$.

Dans le cas, qui nous intéresse ici, $D = 1$, les particules interagissent fortement et forment des états liés. On voit facilement qu'une excitation (une particule) qui se propage le long de la chaîne dans une direction et une autre excitation qui se propage dans l'autre direction doivent forcément interagir.

Ce problème "dur" peut quand même être résolu exactement dans quelques cas spéciaux par l'ansatz de Bethe[Bethe 31] introduit par Hans Bethe en 1931 pour la chaîne de spin 1/2 quantique isotrope *antiferromagnétique* ($J > 0$). Il trouve l'état fondamental ; Hulthén[Hulthén 38] donne l'énergie fondamentale ; l'approche est généralisée à des chaînes anisotropes par Orbach[Orbach 58]. Des Cloizeaux et Pearson[des Cloizeaux 62] étudient les premiers le spectre des excitations à basse énergie, dont la nature exacte est enfin comprise par Fadeev[Fadeev 81]. L'ansatz de Bethe n'étant pas le sujet de cette thèse, je renvoie le lecteur à la littérature, par exemple [Les Houches 82, Gaudin 83]. L'idée centrale est de poursuivre la classification des états dans des états à N particules, mais de faire un ansatz de produit généralisé : afin d'exprimer les diffusions des états à un particule, on considère dans le produit toutes les permutations des positions des particules x_n et des impulsions k_j et introduit des phases de diffusion (*ansatz de Bethe*). L'application de l'Hamiltonien à cet ansatz donne des équations qui lient les phases aux impulsions, énergies et aussi aux valeurs propres de l'opérateur de translation par un site, qui restent à résoudre.

Récapitulons seulement les résultats. L'état fondamental pour la chaîne $S = 1/2$ antiferromagnétique est un *singlet* avec aimantation totale 0. Ceci est un cas spécial de deux théorèmes assez généraux de Marshall[Marshall 55] et de Lieb et Mattis[Lieb 62] qui prédisent des singlets avec aimantation totale 0 pour des Hamiltoniens antiferromagnétiques sur réseaux bipartites. L'énergie fondamentale par site est donnée par[Hulthén 38]

$$E_0 = \frac{1}{4} - \ln 2. \tag{3.6}$$

Le spectre des excitations est[des Cloizeaux 62] :

$$E(k) = \frac{\pi}{2}|\sin k|, \tag{3.7}$$

les corrélations spin-spin décroissent suivant une loi de puissance

$$\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle \propto (-1)^{i-j}|i-j|^{-1}(\ln|i-j|)^{1/2}. \tag{3.8}$$

La longueur de corrélation est alors infinie, mais le système n'a pas d'ordre à grande portée (à cause de la longueur de corrélation infinie, on parle aussi de *quasi-ordre à grande portée*). On dit que le système est critique.

Ces résultats sont valables en $D = 1$ pour $S = \frac{1}{2}$. L'ansatz de Bethe n'est pas généralisable à $D > 1$. Pour des S plus grands, on a trouvé quelques Hamiltoniens assez spéciaux qui peuvent être résolus par l'ansatz de Bethe, par exemple la classe suivante :

$$H = \sum_i \sum_{j=1}^{2S} a_j P^{(j)}(\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}) \tag{3.9}$$

avec $a_j = \sum_{k=1}^{j} k^{-1}$ et $P^{(j)}$ un projecteur sur le sous-espace de spin j, trouvé par Babudjian[Babudjian 82]. Le modèle de Heisenberg isotrope pour $S \geq 1$ (3.1) ne figure pas parmi eux. Le problème pour l'ansatz de Bethe est que pour $S > \frac{1}{2}$ on peut placer plus qu'une seule particule sur un site, ce qui donne des interactions beaucoup plus complexes, pour lesquelles l'ansatz ne marche pas ; en général, seulement dans quelques cas, les termes problématiques s'annulent exactement.

On pensait quand même que les résultats pour $S = \frac{1}{2}$ étaient générique pour des S plus grands en $D = 1$: à $T = 0$ on s'attendait à des chaînes critiques pour tout S.

Or, en 1983, Haldane a montré[Haldane 83a, Haldane 83b] avec un mapping sur le modèle σ non-linéaire quantique qu'il y a une différence fondamentale entre les spins entiers et demi-entiers, au moins dans la limite classique $S \to \infty$, où son mapping devient exact. Il a conjecturé que pour tous les spins demi-entiers, on retrouve bien le comportement critique de la chaîne de spin-1/2, alors que pour les spins entiers, la chaîne est désordonnée avec des corrélations exponentielles à courte portée et un gap entre l'énergie fondamentale et l'énergie de la première excitation.

3.2 Le mapping des chaînes de spin sur le modèle σ non-linéaire

Le mapping de Haldane est possible en $D + 1$ dimensions. Nous considérons seulement le cas de $1 + 1$ dimensions pour le modèle le plus simple, une chaîne de Heisenberg quantique isotrope antiferromagnétique ($J > 0$) de spins S :

$$H = J \sum_i \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \tag{3.10}$$

On fait l'hypothèse[1] que, peu importe le comportement de la chaîne à grande distance, il y a de l'ordre de Néel à courte portée, l'ordre trouvé pour le modèle classique associé. Cette hypothèse est assez faible. On écrit alors les spins approximativement comme

$$\mathbf{S}_i \cong \pm S\boldsymbol{\phi}_i + \mathbf{l}_i, \tag{3.11}$$

avec le signe alternant pour i pair et impair. L'hypothèse d'ordre antiferromagnétique de courte portée implique que $\boldsymbol{\phi}$ et $\mathbf{l}$ varient très lentement sur l'échelle du réseau : $\boldsymbol{\phi}$ donne l'orientation locale de l'aimantation ; les fluctuations rapides autour de $k = \pi$ ont été éliminées (signe !), il reste des fluctuations lentes autour de $k = 0$. Le vecteur $\mathbf{l}$ contient des fluctuations lentes ($k \approx 0$) orthogonales à l'orientation locale de l'aimantation.

Pour être plus rigoureux, on apparie *arbitrairement* chaque site pair $2i$ avec le site impair $2i + 1$ à droite. Ce choix arbitraire brise l'invariance sous une transformation de parité de l'Hamiltonien, ce que l'on ignore pour l'instant. Les champs vectoriels ci-dessus sont maintenant définis comme

$$\boldsymbol{\phi}(2i+1/2) \equiv \frac{1}{2S}(\mathbf{S}_{2i+1} - \mathbf{S}_{2i}) \tag{3.12}$$

$$\mathbf{l}(2i+1/2) \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{S}_{2i+1} + \mathbf{S}_{2i}) \tag{3.13}$$

En utilisant les relations $[S^a(x), S^b(y)] = i\epsilon^{abc}S^c(x)\delta(x-y)$ et $\frac{\delta_{x,y}}{2} \to \delta(x-y)$ pour la limite continue (la cellule unité a maintenant une constante de réseau égal à 2), on trouve

$$[l^a(x), l^b(y)] = i\epsilon^{abc}l^c(x)\delta(x-y) \tag{3.14}$$

$$[l^a(x), \phi^b(y)] = i\epsilon^{abc}\phi^c(x)\delta(x-y) \tag{3.15}$$

$$[\phi^a(x), \phi^b(y)] = i\epsilon^{abc}l^c(x)\frac{\delta(x-y)}{S^2} \to 0 \quad (S \to \infty) \tag{3.16}$$

Dans la limite classique $S \to \infty$, le dernier commutateur s'annule, et on obtient des commutateurs bien connus, ceux d'une théorie des champs d'un champ vectoriel $\boldsymbol{\phi}$, son impulsion $\Pi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{\phi}}}$, et le moment cinétique $\mathbf{l} = \boldsymbol{\phi} \times \Pi$.

De ces définitions on obtient en plus

$$\boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{l} = 0 \tag{3.17}$$

$$\boldsymbol{\phi}^2 = 1 + \frac{1}{S} - \frac{\mathbf{l}^2}{S^2} \to 1 \quad \text{pour} \quad S \to \infty \tag{3.18}$$

[1]Nous suivons ici en grande partie [Affleck 89].

L'hypothèse que les champs $\boldsymbol{\phi}$ et $\mathbf{l}$ varient lentement permet d'exprimer les interactions entre spins dans un développement de gradient où on garde des contributions jusqu'à l'ordre $O(\nabla\boldsymbol{\phi})^2)$ et $O(\mathbf{l}^2)$. Ceci est cohérent comme le moment cinétique $\mathbf{l}$ contient effectivement une dérivée du temps ; on développe alors jusqu'aux mêmes ordres dans les dérivées. On obtient

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_{2i}\mathbf{S}_{2i+1} &= \mathbf{l}^2 - cst. && (3.19)\\
\mathbf{S}_{2i-1}\mathbf{S}_{2i} &= 2S^2(\nabla\boldsymbol{\phi})^2 + 2\mathbf{l}^2 - 2S(\mathbf{l}\nabla\boldsymbol{\phi} + \nabla\boldsymbol{\phi}\mathbf{l}) && (3.20)
\end{aligned}$$

On rassemble les parts et prend la limite continue ($\sum_{2i} \to \int \frac{dx}{2}$; constante du réseau 2 !), et trouve l'Hamiltonien suivant

$$H = J\int \frac{dx}{2}[4\mathbf{l} + 2S^2(\nabla\boldsymbol{\phi})^2 - 2S(\mathbf{l}\nabla\boldsymbol{\phi} + \nabla\boldsymbol{\phi}'\mathbf{l})] \qquad (3.21)$$

qui peut être écrit sous la forme suivante d'une densité Hamiltonienne

$$\mathcal{H} = \frac{c}{2}[g(\mathbf{l}^2 - \frac{\Theta}{4\pi}\boldsymbol{\phi}')^2 + \frac{(\boldsymbol{\phi}')^2}{g}], \qquad (3.22)$$

introduisant les quantités suivantes :

$$\begin{aligned}
c &= 2JS && (3.23)\\
g &= \frac{2}{S} && (3.24)\\
\Theta &= 2\pi S && (3.25)
\end{aligned}$$

c est la *vitesse des ondes de spin* (comme dans la théorie des ondes de spin), g la constante de couplage, et Θ *l'angle topologique.*

On peut maintenant démontrer que cette densité Hamiltonienne suit de la densité Lagrangienne

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2g}\partial_\mu\boldsymbol{\phi}\partial^\mu\boldsymbol{\phi} + \frac{\Theta}{8\pi}\epsilon^{\mu\nu}\boldsymbol{\phi}(\partial_\mu\boldsymbol{\phi}\times\partial_\nu\boldsymbol{\phi}) \qquad (3.26)$$

avec la contrainte $|\boldsymbol{\phi}|^2 = 1$. La densité doit être intégrée sur espace et temps, que nous dénotons par $\int d^2x$. Pour simplifier les notations, nous avons mis $c = 1$. Cette densité se sépare dans deux termes

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{NL} + \mathcal{L}_{TOP}, \qquad (3.27)$$

Le premier terme n'est rien d'autre que le modèle σ non-linéaire, et le deuxième un terme topologique (une dérivée totale qui n'intervient pas dans les équations de mouvement et par suite dans un développement perturbatif). Jusqu'à présent, nous avons considéré une théorie avec une métrique Minkowskienne, espace et temps réel. Avec une rotation de Wick on introduit le temps imaginaire ou la réciproque de la température : $\tau = it$. La métrique est maintenant Euclidienne, et la densité Lagrangienne s'écrit

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{NL} + i\mathcal{L}_{TOP}. \tag{3.28}$$

Avec les méthodes de la géométrie différentielle on peut démontrer que le terme $\frac{1}{\Theta}\int d^2x\mathcal{L}_{TOP}$ acquiert une valeur entière pour toutes les configurations des champs continues qui mènent à une action finie ; il représente l'indice de Pontryagine d'un mapping d'une sphère S_2 sur elle-même[Fradkin 91]. Le Lagrangien s'écrit alors

$$L = \int d^2x\mathcal{L}_{NL} + i\Theta Q. \tag{3.29}$$

Q est un nombre entier et $\Theta = 0, \pi, 2\pi, \ldots$ pour $S = 0, 1/2, 1, \ldots$. La fonction de partition est donnée par

$$Z = \int \mathcal{D}[\boldsymbol{\phi}]e^{-\int d^2x\mathcal{L}_{NL}}e^{-i\Theta Q[\boldsymbol{\phi}]}\delta(\boldsymbol{\phi}^2 - 1) \tag{3.30}$$

La valeur de Q dépend de la configuration des champs sur laquelle on intègre. On trouve deux cas :

- *S entier :* $e^{-i\Theta Q} = 1$. On retrouve le modèle σ non-linéaire.
- *S demi-entier :* $e^{-i\Theta Q} = \pm 1$. La fonction de partition est une composition des fonctions de partition du modèle σ non-linéaire pour des secteurs de Q différents.

3.3 La conjecture de Haldane

Nous allons maintenant exposer la conjecture de Haldane, et d'abord considérer le cas des spins entiers. Le modéle σ non-linéaire est effectivement le modéle le plus simple pour décrire une brisure de symétrie $O(N) \rightarrow O(N-1)$, la brisure typique de la transition d'une phase paramagnétique vers une phase (anti)ferromagnétique. Pour l'analyse du modéle σ nonlinéaire dans $D = 1 + 1$ dimensions, on dérive les équations de flot du groupe de renormalisation. Dans $D = 1 + 1$, l'action

$$S = \int d^2x \frac{1}{2g}\partial_\mu\boldsymbol{\phi}\partial^\mu\boldsymbol{\phi} \tag{3.31}$$

est invariante sous $(x^1, x^2) \to \lambda(x^1, x^2)$. Il n'y a donc pas de point fixe non-trivial ; les seuls points fixes sont $g = 0$ (correspondant à $S = \infty$, la limite classique ordonnée à $T = 0$) et $g = \infty$. Pour effectuer une analyse autour de $g = 0$, la limite de S grand, pour lequel le mapping a été défini, on choisit D arbitraire, mais près de $D = 1 + 1$, et écrit l'action avec un couplage u sans dimension :

$$S = \frac{1}{2ua^{D-2}} \int d^D x (\partial_\mu \boldsymbol{\phi})^2 \tag{3.32}$$

Dans cette notation, la fonction β est donnée par

$$\beta(u) = a\frac{du}{da} \tag{3.33}$$

Elle peut être calculée en intégrant sur les modes qui oscillent rapidement. Ce calcul est donnée dans la littérature et d'une forme assez standard[Fradkin 91] ; je cite seulement le résultat : la fonction β est obtenue perturbativement avec un petit paramètre $\epsilon = D - 2$. Dans le cas $\epsilon \to 0$ on trouve

$$\beta(u) = a\frac{du}{da} = -\epsilon u + \frac{u^2}{2\pi} + O(u^2) \tag{3.34}$$

Pour $D = 1 + 1$ la fonction β a un seul zéro à $u = 0$ et est toujours positive. Sous une croissance de a le couplage effectif augmente alors indépendamment du couplage original $u_0 = 2/S$. On s'attend alors à un comportement qualitativement identique de toutes les chaînes de spin entier. Cette situation est différente de celle pour $D > 2$, où il y a un second zéro à $u_\epsilon = 2\pi\epsilon$ et la fonction β négative pour $u < u_\epsilon$. Le couplage effectif montrera alors un flot vers zéro pour un couplage original $u_0 < u_\epsilon$ ou un spin $S > \frac{1}{\pi\epsilon}$. Pour $D = 2+1$, ceci inclut tous spins physiques $S \geq 1/2$, et le système possède de l'ordre antiferromagnétique[Chakravarty 88], car $g = 0$ est le cas classique ordonné.

Revenons au cas $D = 1+1$. Pour des couplages forts, le modèle σ non-linéaire est désordonné, les corrélations décroissent exponentiellement avec une longueur de corrélation ξ ; il y a un gap dans le spectre, mais pas de brisure de symétrie spontanée. Ceci peut être démontré en utilisant l'équivalence entre ce modèle et le modèle de Heisenberg classique avec une dimension spatiale en plus. En plus, on peut calculer une estimation pour le comportement de l'énergie du gap Δ et la longueur de corrélation en fonction de S[Haldane 83a, Haldane 83b] :

$$\Delta(S) \propto S^2 e^{-\pi S} \tag{3.35}$$

$$\xi(S) \propto S^{-1} e^{\pi S} \tag{3.36}$$

Gap et longueur de corrélation sont liés par la vitesse des ondes de spin semi-classique $\Delta(S)\xi(S) = c(S) = 2JS$. La loi des corrélations spin-spin est donnée, dans la limite $|i-j| \gg \xi$, par

$$\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle \propto (-1)^{|i-j|} \frac{\exp -|i-j|/\xi}{\sqrt{|i-j|}}, \tag{3.37}$$

la transformée de Fourier en espace réel pour $D = 1+1$ du propagateur massif du modèle σ non-linéaire $(k^2 + c^2\xi^{-2})^{-1}$.

Haldane a alors conjecturé que toutes les chaînes isotropes antiferromagnétiques à spin entier possèdent un état fondamental désordonné avec des corrélations spin-spin exponentielles et un spectre d'excitations séparé de l'énergie fondamentale par un gap.

Pour les chaînes à spin demi-entier l'analyse est plus compliquée. Haldane a conjecturé que l'analyse du modéle σ nonlinéaire reste intacte et que l'on trouve le même comportement du flot vers un couplage fort. Il y a ainsi un comportement qualitativement identique des chaînes à spin demi-entier, génériquement donné par le comportement critique de la chaîne de spin 1/2.

Chapitre 4

Le modèle de Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki

Dans ce chapitre, nous serons guidés par l'idée d'un Hamiltonien "cousin"[Auerbach 94] : par cela nous entendons un Hamiltonien pour lequel une fonction d'onde particulière connue est l'état fondamental exact - ce qui permet d'évaluer les corrélations, étudier les brisures de symétrie etc. - et qui en même temps décrit génériquement le comportement du modèle physique que l'on est en train d'étudier. Pour l'Hamiltonien de Heisenberg quantique antiferromagnétique isotrope il existe un tel Hamiltonien au moins pour $S = 1$; un des buts du prochain chapitre sera de démontrer que cette relation tient aussi pour $S = 2$. Nous allons d'abord définir ces Hamiltoniens, discuter leurs états fondamentaux et leurs propriétés, et enfin parler des excitations.

4.1 Définition des Hamiltoniens AKLT

L'Hamiltonien que nous allons discuter dans ce chapitre (à la suite *Hamiltonien AKLT*) a été défini par Affleck, Kennedy, Lieb et Tasaki[Affleck 87a, Affleck 88] comme

$$H^{AKLT} = \sum_{<i,j>} \sum_{J=2S-M+1}^{2S} K_J(ij) P_J(ij), \tag{4.1}$$

sur un réseau quelconque où le nombre de coordination (nombre de plus proches voisins) z est lié au spin par site S comme

$$M = \frac{2S}{z} \tag{4.2}$$

avec M entier. La somme $< i, j >$ est sur des liens entre plus proches voisins, les constantes $K_J(ij)$ positives (nous allons seulement considérer des constantes sans dépendance de ij) et $P_J(ij)$ les projecteurs qui projetent la somme $\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_j$ sur le sous-espace de spin total $0 \leq J \leq 2S$. Sur une chaîne, (4.2) permet pour S les valeurs 1, 2, 3, ...

Pour exprimer H^{AKLT} dans des produits d'opérateurs de spin plus familiers, on utilise $(1 \leq m \leq 2S)$[Arovas 88b]

$$(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j)^m = \sum_{J=0}^{2S}[\frac{1}{2}J(J+1) - S(S+1)]^m P_J(ij), \tag{4.3}$$

qui suit de $(\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_j)^2 = 2S(S+1) + 2\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j$ et $1 = \sum_{J=0}^{2S} P_J(ij)$ et après inversion de cette relation. On obtient l'expression suivante qui projette sur zéro si le spin total de la somme $\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_j$ n'est pas égal à J :

$$P_J(ij) = \frac{\prod_{J'=0,J'\neq J}^{J'=2S}(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j + S(S+1) - J'(J'+1)/2)}{\prod_{J'=0,J'\neq J}^{J'=2S}(J(J+1)/2 + S(S+1) - J'(J'+1)/2)} \tag{4.4}$$

Les Hamiltoniens AKLT s'écrivent alors pour $S = 1$ et $S = 2$ comme

$$H_{S=1}^{AKLT}(K_2) = K_2 \sum_{i=1}^{L-1}[(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1}) + \frac{1}{3}(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1})^2 + \frac{2}{3}] \tag{4.5}$$

et

$$\begin{aligned} H_{S=2}^{AKLT}(K_3, K_4) &= \sum_{i=1}^{L-1}[(K_3 + K_4)(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1})^4 + (10K_3 + 14K_4)(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1})^3 \\ &+ (7K_3 + 63K_4)(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1})^2 + (-162K_3 + 90K_4)(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1}) - 360K_3] \end{aligned} \tag{4.6}$$

Pour $S = 1$ l'Hamiltonien semble assez proche de l'Hamiltonien de Heisenberg : on peut imaginer que le terme quadratique n'est qu'une petite perturbation qui ne change pas l'essentiel du comportement physique ; ceci est effectivement le cas, comme nous allons voir. Pour $S = 2$ la situation semble beaucoup plus complexe.

4.2 L'état fondamental des Hamiltoniens AKLT

Pour construire l'état fondamental, on introduit d'abord les états *valence bond* pour un réseau quelconque et un spin S sur chaque site comme[Auerbach 94]

$$|c_\alpha, S\rangle = \sum_\alpha c_\alpha |\alpha\rangle, \tag{4.7}$$

où les c_α sont des quantités variationnelles libres. On somme sur toutes les configurations $|\alpha\rangle$ données par

$$|\alpha\rangle = \prod_{(ij)\in\Lambda_\alpha} (a_i^\dagger b_j^\dagger - b_i^\dagger a_j^\dagger)|0\rangle. \tag{4.8}$$

Λ_α est une configuration de liens (ij) entre des sites i et j pour laquelle $2S$ liens se terminent à chaque site. $|0\rangle$ est le vide bosonique et a_i, b_j des bosons de Schwinger[Schwinger 52, Arovas 88a] : sur chaque site on introduit deux opérateurs bosoniques, qui vérifient $a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i = 2S$. Les opérateurs de spin peuvent être exprimés par

$$\begin{aligned} S_i^+ &= a_i^\dagger b_i & (4.9)\\ S_i^- &= b_i^\dagger a_i & (4.10)\\ S_i^z &= \frac{1}{2}(a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i) & (4.11) \end{aligned}$$

et les états du spin S avec aimantation m sur site i par

$$|S, m\rangle = \frac{(a_i^\dagger)^{S+m}}{\sqrt{(S+m)!}} \frac{(b_i^\dagger)^{S-m}}{\sqrt{(S-m)!}} |0\rangle. \tag{4.12}$$

Les états $|c_\alpha, S\rangle$ sont invariants par rotations globales et ainsi des singlets de spin total 0.

On restreint alors la liberté variationelle pour ces états et ne regarde que des états VBS (*valence bond solid*) donnés par

$$|\Psi^{VBS}\rangle = \prod_{<i,j>} (a_i^\dagger b_j^\dagger - b_i^\dagger a_j^\dagger)^M |0\rangle. \tag{4.13}$$

Le produit porte sur les paires des voisins les plus proches. On crée M liens entre deux voisins, ce qui impose sur M la condition déja connue

$$M = \frac{2S}{z}. \tag{4.14}$$

Les états VBS sont composés de *dimères*, des liens singlets entre plus proches voisins.

Comme H^{AKLT} est une somme de projecteurs, il suit de

$$H^{AKLT}|\Psi^{VBS}\rangle = 0 \tag{4.15}$$

que $|\Psi^{VBS}\rangle$ est un état fondamental de H^{AKLT}. Cette identié est vérifiée si sur aucun lien on ne trouve un spin total $J > 2S - M$. La composante J^z est donnée par $\frac{1}{2}(a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j - b_i^\dagger b_i + b_j^\dagger b_j)$. On considère[Arovas 88b] alors l'état suivant avec la composante J^z maximale sur le lien :

$$(a_i^\dagger)^{2S-M}(a_i^\dagger b_j^\dagger - b_i^\dagger a_j^\dagger)^M (a_j^\dagger)^{2S-M} \tag{4.16}$$

En comptant les puissances, on trouve $J^z_{max} = 2S - M$. Une rotation globale donnerait un $(J^z)' = J$ si $J > J^z_{max}$. Comme $|\Psi^{VBS}\rangle$ est invariant par rotations, $J^{max} = 2S - M$, ce qui était à démontrer.

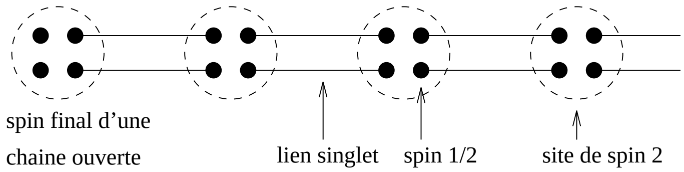

FIG. 4.1: *Etat fondamental du modèle AKLT pour la chaîne de spin 2. Les cercles représentent un site de spin 2, les points des spins 1/2 symétrisés sur un site. Les liens sont des singlets. On observe l'existence de S spins 1/2 symétrisés libres au bout de la chaîne.*

On peut visualiser cet état fondamental comme sur la figure 4.1. Sur chaque site il y a $2S$ spins 1/2, qui sont symétrisés pour faire un spin S ; $\downarrow$ donne un boson b, $\uparrow$ un boson a. Chaque spin 1/2 est lié à un autre sur un autre site par un lien antisymétrique. Comme les liens sont fixes, on parle du *valence bond solid.*

La figure montre déja que, sur une chaîne *ouverte*, il y a à chaque bord S spins 1/2 libres, qui, à cause de la symétrisation, agissent comme des spins $S/2$

libres. L'état fondamental s'écrit dans ce cas comme

$$|\Psi^{VBS}(p,q)\rangle = (a_1^\dagger)^p (b_1^\dagger)^{(S-p)} \prod_{i=1}^{L-1} (a_i^\dagger b_{i+1}^\dagger - b_i^\dagger a_{i+1}^\dagger)^S (a_L^\dagger)^q (b_L^\dagger)^{(S-q)} |0\rangle \tag{4.17}$$

avec $0 \leq p, q \leq S$. Pour $S = 1$, les quatre états ainsi construits se repartissent dans un état singlet (où les deux spins 1/2 libres forment un singlet, l'état fondamental pour un système fini fermé de longueur paire) et un état triplet (où les spins 1/2 libres forment un triplet, l'état fondamental pour un système fini fermé de longueur impaire) trois fois dégénéré[Affleck 87a, Affleck 88]. En général, l'état fondamental de la chaîne ouverte de spin S est $(S+1)^2$ fois dégénéré.

Pour la chaîne de Heisenberg de $S = 1$, il y a une interaction effective entre les deux spins 1/2 libres à travers la chaîne. La différence entre les deux énergies décroît exponentiellement comme $\exp -L/\xi$ pour $L \to \infty$[Kennedy 90]. Ce comportement a été trouvé numériquement[Kennedy 90] avec la longueur de corrélation de $S = 1$ et expérimentalement[Hagiwara 90, Glarum 91].

L'état fondamental de H^{AKLT} peut encore être écrit de deux façons différentes, qui montrent d'autres propriétés de l'état fondamental assez explicitement. Si l'on introduit $\psi_{1,2} = \uparrow, \downarrow$ pour un spin-1/2, on peut construire, sur chaque site, des états symétriques pour $S = 1$

$$\psi_{\alpha\beta} = \frac{\psi_\alpha \otimes \psi_\beta + \psi_\beta \otimes \psi_\alpha}{\sqrt{2}} \tag{4.18}$$

et pour $S = 2$

$$\psi_{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{\psi_\alpha \otimes \psi_\beta \otimes \psi_\gamma \otimes \psi_\delta + \text{toutes les permutations}}{\sqrt{24}} \tag{4.19}$$

L'état fondamental d'une chaîne périodique (de longueur paire) avec $S = 1$ s'écrit alors[Affleck 87a, Affleck 88] $\Omega = \Omega_{\alpha\alpha}$ où

$$\Omega_{\alpha\beta} = \psi_{\alpha\beta_1} \otimes \psi_{\alpha_2\beta_2} \otimes \ldots \otimes \psi_{\alpha_{L-1}\beta_{L-1}} \otimes \psi_{\alpha_L\beta} \epsilon^{\beta_1\alpha_2} \epsilon^{\beta_2\alpha_3} \ldots \epsilon^{\beta_{L-1}\alpha_L} \tag{4.20}$$

et pour $S = 2$ $\Omega = \Omega_{\alpha\beta\alpha\beta}$ où

$$\Omega_{\alpha\beta\gamma\delta} = \psi_{\alpha\beta\gamma_1\delta_1} \otimes \psi_{\alpha_2\beta_2\gamma_2\delta_2} \otimes \ldots \otimes \psi_{\alpha_{L-1}\beta_{L-1}\gamma_{L-1}\delta_{L-1}} \otimes \psi_{\alpha_L\beta_L\gamma\delta} (\epsilon^{\gamma_1\alpha_2}\epsilon^{\delta_1\beta_2} + \epsilon^{\gamma_1\beta_2}\epsilon^{\delta_1\alpha_2}) \ldots \tag{4.21}$$

On voit tout de suite que cet état a les mêmes propriétés que l'état fondamental déjà donné. La formulation choisie ici sera utilisée plus tard pour le calcul du paramètre d'ordre caché.

Enfin, on voit explicitement le caractère de l'état fondamental pour $S = 1$ en l'écrivant comme une superposition d'états diagonaux dans la base de S_i^z. On trouve[Affleck 87a, Affleck 88] que toutes les contributions ont la forme

$$|\ldots, +1, 0, 0, -1, +1, 0, -1, 0, 0, 0, +1, 0, -1, \ldots\rangle; \tag{4.22}$$

si l'on élimine les zéros, on trouve un antiferromagnétique avec ordre d'Ising. Cet ordre est dilué par les zéros. On appelle cet ordre *ordre caché* du modèle AKLT.

Les corrélations spin-spin ont été calculées pour $S = 1$ par [Affleck 88] et pour S entier par [Arovas 88b]. On trouve

$$\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle = \begin{cases} (-1)^{i-j}(S+1)^2 \exp -\kappa|i-j| & (i \neq j) \\ S(S+1) & i = j \end{cases} \tag{4.23}$$

κ est la réciproque de la longueur de corrélation ξ :

$$\kappa^{-1} = \xi = [\ln(1 + \frac{2}{S})]^{-1} \tag{4.24}$$

On obtient alors pour des petits S des longueurs de corrélation proches de la constante du réseau : $\xi_{S=1} = 0.91$ et $\xi_{S=2} = 1.43$. On peut aussi démontrer que pour tout S la première excitation est séparée de l'état fondamentale par un gap[Affleck 87a, Affleck 88]. Le comportement de l'Hamiltonien AKLT semble alors encore une fois très proche du comportement prédit pour les chaînes de Heisenberg à spin entier : le spectre montre un gap, et les corrélations sont exponentielles, donc de courte portée ; les états fondamentaux sont désordonnées.

Arrêtons-nous quand même sur une différence importante : Si l'on considère la forme des corrélations donnée par Ornstein et Zernicke[Huang 87] pour $n \to \infty$

$$C^{OZ}(n) = (-1)^n |n|^{\frac{1-d}{2}} e^{-|n|/\xi} \tag{4.25}$$

pour un système classique de d dimensions avec des corrélations antiferromagnétiques, on trouve que les corrélations (3.37) données par le modèle σ non-linéaire pour l'Hamiltonien de Heisenberg sont celles d'un système classique en 2 dimensions spatiales (où d'un système quantique en 1 dimension), alors que les corrélations de l'Hamiltonien AKLT sont ceux d'un système quantique de 0 dimensions, donc d'un système de mécanique quantique. Formellement, cette *réduction dimensionnelle* s'explique par le fait que H^{AKLT} s'écrit comme une somme de projecteurs locaux et est alors due à sa forme très spéciale. Nous allons expliquer ce phénomène dans le chapitre 6 et démontrer que dans un espace des interactions plus grand, H^{AKLT} se situe sur un point de désordre, ce qui explique la réduction dimensionnelle d'un point de vue plus physique.

4.3 Ordre caché et paramètre d'ordre string

Si l'on examine l'état (4.22), on s'aperçoit qu'il y a un ordre caché dans la chaîne VBS pour $S = 1$: un ordre antiferromagnétique dilué. On est alors amené à introduire un paramètre d'ordre qui mesure des corrélations antiferromagnétiques en ignorant les zéros. den Nijs et Rommelse[den Nijs 89] ont proposé le *paramètre d'ordre string* (SOP) suivant $(i < j)$

$$\mathcal{O}_\pi^\alpha(i,j) = \langle S_i^\alpha \exp(i\pi \sum_{k=i+1}^{j-1} S_k^\alpha) S_j^\alpha \rangle, \tag{4.26}$$

avec $\alpha = x, y, z$, qui a évidemment les propriétés demandées : l'exponentiel contribue un facteur 1 pour $S^z = 0$, alors qu'il change le signe de la corrélation pour $S^z = \pm 1$, ce qui introduit le signe alternant des corrélations antiferromagnétiques. Pour l'Hamiltonien AKLT pour $S = 1$, il acquiert une valeur moyenne non-nulle pour $|i - j| \to \infty$: $\mathcal{O}_\pi \to \frac{4}{9}$[den Nijs 89, Girvin 89].

Kennedy et Tasaki ont proposé pour $S = 1$ que ce paramètre d'ordre non-nul à longue portée est associé à une symétrie discrète brisée du modèle AKLT. La brisure de symétrie engendrait alors le gap[Kennedy 92]. Ils ont introduit une transformation unitaire U qui expose cette symétrie discrète : On prend un état dans la représentation S_i^z. Le premier site non-zéro change de signe $\pm 1 \to \mp 1$, le seconde reste inchangé, le troisième change de signe, et cetera. A la fin, on compte le nombre des 0 sur des sites impairs. Si ce nombre est impair, on multiplie le nouveau état par -1. Cette transformation U est unitaire : $U^T = U^{-1}$.

On peut maintenant démontrer que le paramètre d'ordre O_π^α pour $\alpha = x, z$ (mais pas y : U brise la symétrie de rotation) est transformé en paramètre d'ordre ferromagnétique pour l'Hamiltonien transformé $\tilde{H} = UHU^{-1}$:

$$\mathcal{O}_\pi^\alpha(i,j)[H] = \mathcal{O}_f^\alpha(i,j)[\tilde{H}], \tag{4.27}$$

où $\mathcal{O}_f^\alpha(i,j) = \langle S_i^\alpha S_j^\alpha \rangle$. L'Hamiltonien transformé retient de ses symétries originales locales seulement la rotation autour de deux axes x et z par un angle π, soit une symétrie $Z_2 \times Z_2$. Bien sûr H et $\tilde{H}$ ont les mêmes symétries (transformation unitaire !), mais les autres symétries sont devenues fortement non-locales.

Une possible brisure des deux symétries Z_2 est indiquée par une valeur non-nulle à longue distance pour $O_f^z[\tilde{H}]$ et $O_f^x[\tilde{H}]$. On trouve trois possibilités pour un Hamiltonien

$$H = \sum_i S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + J^z S_i^z S_{i+1}^z + D(S_i^z)^2 : \tag{4.28}$$

Pour $D = 0$ et J^z grand ($\gtrapprox 1.2$[Schulz 86b]), on trouve une phase de Néel avec ordre d'Ising et il y a brisure de la symétrie Z_2 pour l'axe z ; O_f^z à une valeur moyenne non-nulle à grande portée, O_f^x va vers zéro. Pour $D \gg 0$, tous les états avec des composantes $S_i^z = \pm 1$ sont supprimés, les paramètres d'ordre sont nuls à grande portée et les symétries ne sont pas brisées (phase dite de grand D). Enfin il y a une troisième phase, où les deux symétries sont brisées et les deux paramètres d'ordre non-nuls à grande portée. On trouve que l'Hamiltonien de Heisenberg ainsi que l'Hamiltonien AKLT se trouvent dans cette phase. Pour des chaînes ouvertes, $\tilde{H}$ ainsi que H ont 4 états fondamentaux différents dans la limite thermodynamique. Il semble exister un lien étroit entre la brisure de symétrie $Z_2 \times Z_2$ et les 4 états fondamentaux dégénérés et l'existence du gap[Kennedy 92] à cause de la brisure d'une symétrie discrète. Ce dernier lien est faible à cause de la nature non-locale de U, ce qui complique la limite thermodynamique.

Il se pose la question de ce qui se passe pour $S > 1$, où le degré de dégénérescence de l'état fondamental est $(S+1)^2$ et n'est pas directement liée à une symétrie $Z_2 \times Z_2$. Oshikawa[Oshikawa 92] a examiné cette question. Il a démontré que pour S entier on peut généraliser U à une transformation unitaire non-locale

$$V = \prod_{j<k} \exp i\pi(S_j^z S_k^x) \tag{4.29}$$

qui donne, utilisant H de (4.28),

$$\tilde{H} = VHV^{-1} = \sum_i S_i^x e^{i\pi S_{i+1}^x} S_{i+1}^x + S_i^y e^{i\pi(S_i^z + S_{i+1}^x)} S_{i+1}^y + J^z S_i^z e^{i\pi S_i^z} S_{i+1}^z + D(S_i^z)^2 \tag{4.30}$$

Il reste pour S entier une symétrie $Z_2 \times Z_2$. On peut maintenant démontrer que pour l'Hamiltonien AKLT les valeurs moyennes à longue portée de O_f^x et O_f^z disparaissent pour $S = 2, 4, 6, \ldots$, mais restent finies pour $S = 1, 3, 5, \ldots$, et la symétrie $Z_2 \times Z_2$ est alors brisée pour S impair et intacte pour S pair. Ceci montre qu'il y a une différence entre les chaînes à S impair et S pair : dans le dernier cas, on ne peut pas invoquer la brisure de $Z_2 \times Z_2$ comme mécanisme de la génération du gap de Haldane (un mécanisme qui, bien entendu, n'est démontré pour le premier cas non plus).

Oshikawa a alors proposé le mécanisme suivant pour la transition de phase entre la phase de Haldane et la phase de grand D : en augmentant D, on supprime

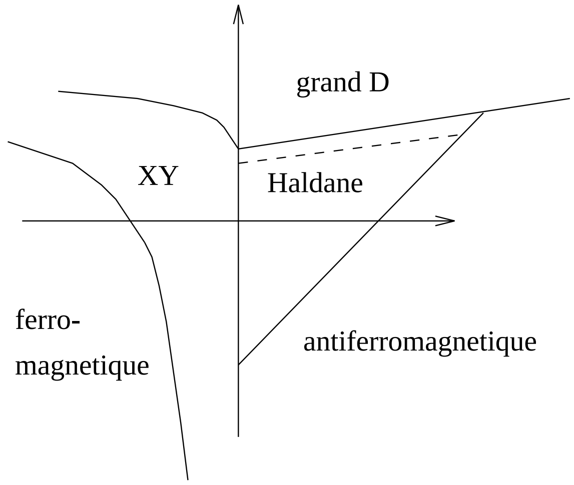

FIG. 4.2: *Diagramme de phase schématique pour $S = 1$ en fonction des anisotropies J^z et D. Pour $S > 1$, Oshikawa propose de remplacer la ligne de transition entre la phase de Haldane et la phase de grand D par une cascade de S transitions ; nous indiquons avec la ligne interrompue une telle transition additionnelle pour $S = 2$. Nous négligeons une transition entre deux types de phases XY pour $J^z < 0$ et $D \ll 0$.*

successivement les valeurs $S_i^z = \pm S$, $S_i^z = \pm(S-1)$ et cetera. Dans l'image VBS, ceci correspondrait à une dissolution successive des liens singlets avec $d/2+n = S$, avec n le nombre des liens singlet restants entre deux sites, et d le nombre des spins $1/2$ sans lien sur chaque site, qui forment des états symétriques à aimantation zéro (figure 4.3). L'état fondamental s'écrirait alors comme

$$|\Psi^{VBS}(d;n)\rangle = \prod_i (a_i^\dagger b_i^\dagger)^d (a_i^\dagger b_{i+1}^\dagger - b_i^\dagger a_{i+1}^\dagger)^n |0\rangle. \qquad (4.31)$$

dans la notation des bosons de Schwinger (en ne considérant pas les bords). On s'attendrait alors à S transitions successives avant de retrouver la phase de grand D ; chaque transition serait décrite par un changement de comportement du paramètre d'ordre string O_π^z à grande distance : pour n impair, il est non-nul, pour n pair, il est nul. Une telle cascade de transitions a déjà été proposée par Affleck et Haldane[Affleck 87b] pour la dimérisation des chaînes.

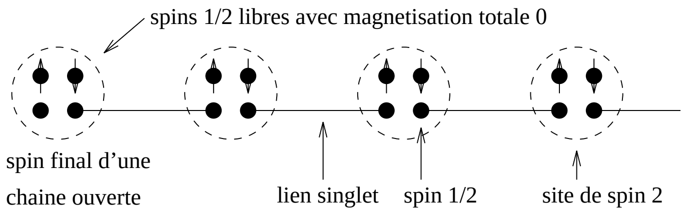

FIG. 4.3: *Etat fondamental intermédiaire du modèle AKLT proposé pour la chaîne de spin 2 en présence d'une interaction $D(S_i^z)^2$, $D > 0$. Les cercles représentent un spin, les points et flèches des spins 1/2 symétrisés sur le site. Les liens sont des singlets ; les spins sans liens (flèches) ont une aimantation totale zéro.*

Pour le cas spécial de $S = 2$, une suppression de $S_i^z = \pm 2$ (pour $J^z = 1$) menerait effectivement, à cause des éléments de matrice pour $S^{\pm}$, à un Hamiltonien avec anisotropie d'Ising pour $S = 1$:

$$H = \sum_i S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \frac{1}{3} S_i^z S_{i+1}^z + D(S_i^z)^2 \tag{4.32}$$

D'après les résultats de [den Nijs 89], cet Hamiltonien pour $S = 1$ devrait être dans la phase de Haldane, si l'on suppose que le D qui supprime $S_i^z = \pm 2$ pour la transition est suffisamment petit pour ne pas situer cet Hamiltonien déjà dans la phase de grand D pour $S = 1$, et on devrait trouver un paramètre d'ordre string O_π^z non-nul, alors qu'il disparaît pour la chaîne de spin 2 avec $D = 0$. En augmentant D, on arrive enfin dans la phase de grand D, où O_π^z est zéro.

Un autre scénario est donné par la méthode de la bosonisation abélienne (expliquée dans ses détails dans chapitre 7). Schulz a traité[Schulz 86a] la chaîne de spin S comme $2S$ chaînes de spin 1/2 couplées, où il symétrise les $2S$ spins 1/2 qui se trouvent sur le même site i sur les différentes chaînes. Il trouve un diagramme de phase, où pour tout S entier la chaîne de spin S isotrope se trouve dans la phase de Haldane, qui est liée avec la phase de grand D par *une* ligne critique intermédiaire. Pour $S = 1$, den Nijs et Rommelse retrouvent le même comportement[den Nijs 89]. Golinelli et al. [Golinelli 92b] ont démontré numériquement que pour $S = 1$ la phase de Haldane et la phase de grand D semblent directement liées par une transition continue pour $D = 0.99(2)$. Nous allons essayer de trancher cette situation dans la section 5.3.

4.4 Excitations

Nous terminons ce chapitre avec un bref exposé de la nature des états excités de l'Hamiltonien AKLT. Arovas, Auerbach et Haldane ont essayé de décrire la première excitation avec une approximation d'un seul mode à la Bijl et Feynman [Arovas 88b], qui est effectivement équivalent aux états à un particule que nous avons introduits au début du chapitre dernier. Le premier triplet d'excitations s'écrit $S_k^\alpha|\Psi^{VBS}\rangle$, avec, pour une chaîne de longueur L et conditions de bord périodiques,

$$S_k^\alpha = L^{-1/2}\sum_{n=1}^{L} e^{ikn} S_n^\alpha, \quad \alpha \in \{x, y, z\}. \tag{4.33}$$

On trouve une relation de dispersion

$$E(k) = \frac{10}{27}(5 + 3\cos k) \tag{4.34}$$

pour $S = 1$ et alors une borne supérieure du gap comme $E(\pi) = \frac{20}{27} = 0.740$ à comparer avec des résultats numériques $\Delta_{S=1}^{AKLT} = 0.700$[Fath 93b]. Cette approximation donne aux excitations le caractère des ondes de spin.

A l'heure actuelle, une autre description des excitations semble beaucoup plus convaincante. Elle leur donne un caractère solitonique, ce qui les rapproche des excitations de la chaîne $S = 1/2$[Fadeev 81]. Celle-ci a été proposée par Knabe[Knabe 88] et Fáth et Sólyom[Fath 93b] et consiste à remplacer dans l'état fondamental un des liens singlet $(a_i^\dagger b_{i+1}^\dagger - b_i^\dagger a_{i+1}^\dagger)$ par $a_i^\dagger a_{i+1}^\dagger$, $a_i^\dagger b_{i+1}^\dagger + b_i^\dagger a_{i+1}^\dagger$ ou encore $b_i^\dagger b_{i+1}^\dagger$ et à utiliser l'invariance par translation. On crée ainsi deux bords de chaînes avec un spin 1/2 libre chacun, qui forment ensemble un spin 1, ce qui donne un état triplet pour la première excitation. Ces excitations ont été étudiées par plusieurs auteurs[Kaburagi 93, Sakai 94, Scharf 95]. Scharf et Mikeska[Scharf 95] trouvent ainsi une relation de dispersion

$$E(k) = 2\frac{11\sqrt{R} - 579 + 306\cos k}{6(\sqrt{R} - 49 + 30\cos k)} \tag{4.35}$$

avec $R = 3121 - 2508\cos k + 900\cos^2 k$ et ainsi un gap $\Delta_{S=1}^{AKLT} = 0.708$. La nature de cette excitation est solitonique[Knabe 88], on peut l'imaginer comme une frontière entre deux régions d'ordre antiferromagnétique caché différentes :

$$|+1, 0, -1, 0, 0, +1 \parallel +1, 0, -1, 0, 0, +1\rangle \tag{4.36}$$

Le paramètre d'ordre string doit alors changer de signe en présence d'une excitation.

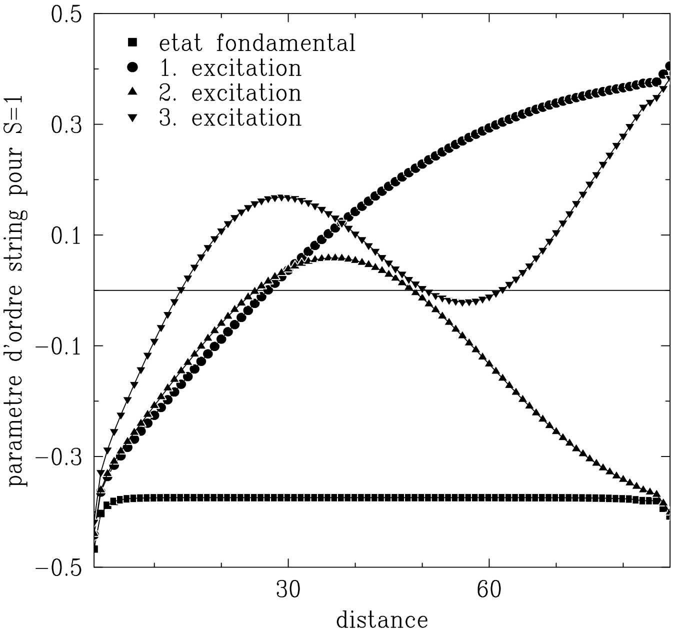

FIG. 4.4: *Paramètre d'ordre string pour une chaîne de spin 1 isotrope antiferromagnétique de longueur $L = 90$, avec $M = 80$ en fonction du nombre d'excitations présent dans le système. Conditions de bord ouvertes ; couplage du bord $J_{end} = 1.0$.*

Quel est le rapport avec la chaîne de spin 1 antiferromagnétique isotrope ? Elstner et Mikeska[Elstner 94] ont étudié le comportement du paramètre d'ordre pour des chaînes de longueur 18 avec une interaction de Heisenberg isotrope et trouvé que le paramètre d'ordre change m fois de signe pour la $m^{\text{ème}}$ excitation. Les zéros se distribuent à équidistance sur la chaîne à cause des conditions de bords périodiques et une répulsion entre les excitations typique pour des excitations solitoniques[Tsvelik 90, Affleck 91]. Or, Sørensen et Affleck ont trouvé[Sørensen 93] que les excitations de la chaîne de Heisenberg pour $S = 1$ ne sont bien découplées que pour une longueur $L \approx 5\xi m$; avec $\xi = 6.03$[White 92b], on peut donc critiquer les résultats cités ci-dessus. Nous avons recalculé le comportement du paramètre d'ordre string pour la chaîne $S = 1$ isotrope pour $L = 90$ avec des conditions de bord ouvertes et retrouvé les résultats de [Elstner 94]. Le paramètre d'ordre vaut -0.374329, ce qui est à 10^{-5} du résultat le plus précis 0.374325096(2)[White 93a]. La symétrie du paramètre d'ordre autour de la distance $L/2$ trouvée par [Elstner 94] est perdue à cause des conditions de bord ouvertes (figure 4.4). La nature des excitations de la chaîne de Heisenberg isotrope quantique antiferromagnétique $S = 1$ semble identique à celle de l'Hamiltonien AKLT.

En somme, on trouve que le modèle AKLT et le modèle de Heisenberg isotrope antiferromagnétique pour $S = 1$ ont en commun tous les caractéristiques qualitatives, ce qui permet de penser que l'Hamiltonien AKLT est générique pour toute la phase de Haldane pour $S = 1$:

- un état fondamental sans ordre magnétique avec des corrélations purement exponentielles (mais avec un facteur additionnel, la racine de la distance $1/\sqrt{r}$, voir chapitre 6)
- un ordre caché du type antiferromagnétique dilué, mesuré par un paramètre d'ordre commun, associé à la même symétrie locale $Z_2 \times Z_2$ brisée dans les deux cas
- un état fondamental 4 fois dégéneré pour la chaîne ouverte dans la limite thermodynamique à cause de la présence des spins 1/2 effectivement libres aux deux bouts de la chaîne
- un gap en énergie entre états fondamentaux et premières excitations
- une nature solitonique des excitations décrite par le comportement du paramètre d'ordre string

Nous allons étudier maintenant comment ces propriétés communes survivent pour le cas $S = 2$.

Chapitre 5

Le gap de Haldane et l'ordre caché dans une chaîne quantique antiferromagnétique de spin 2

Dans ce qui suit, nous allons d'abord démontrer que la chaîne quantique antiferromagnétique isotrope $S = 2$ a un gap en donnant pour la première fois une estimation sérieuse de sa valeur numérique. Ensuite, nous établissons la longueur de corrélation et ainsi la vitesse des ondes de spin. Ces résultats démontrent aussi la dégénérescence du fondamental de la chaîne $S = 2$ ouverte. Enfin, nous discutons le choix du bon paramètre d'ordre et donnons sa valeur numérique, qui sera comparée au résultat pour l'état VBS pour $S = 2$. Son comportement sous l'introduction d'une anisotropie uniaxiale sera également étudié. Nous concluons en donnant un diagramme de phase por $S = 2$ en présence des anisotropies J^z et D. L'étude suivante sera plus compliquée par rapport à $S = 1$ en raison du comportement plus classique de la chaîne $S = 2$; les effets quantiques, qui donnent un gap et une longueur de corrélation finis, sont alors beaucoup plus difficiles à mettre en évidence.

5.1 Le gap de Haldane pour $S = 2$

Le choix de la méthode numérique pour le calcul du gap fut dictée par la nature particulière du problème. Pour le gap de Haldane pour $S = 1$, les deux techniques les plus avancées discutent la cinquième chiffre : $\Delta = 0.41050(2)$ du

L	Δ
4	1.000000
6	0.697295
8	0.545569
10	0.453225
12	0.390696

TAB. 5.1: *Valeurs du gap Δ (dans des unités de J) pour une chaîne antiferromagnétique isotrope périodique de spin 2 en fonction de la longueur L [Lin 90].*

DMRG[White 93a] et $\Delta = 0.41049(2)$ de l'extrapolation des résultats des diagonalisations exactes par l'algorithme de Lanczos pour des longueurs jusqu'à $L = 22$[Golinelli 94]. Ces extrapolations sont permises par le fait que dans ce cas-là $L \gg \xi$, avec $\xi = 6.03(1)$[White 92b] ; pour un système périodique beaucoup plus grand que sa longueur de corrélation, le gap converge *exponentiellement* vers sa valeur dans la limite thermodynamique et peut alors être extrapolé avec des méthodes comme l'extrapolation d'Aitken-Shanks[Golinelli 94] particulièrement adaptée aux convergences exponentielles. Pour le cas $S = 2$, les seules valeurs connus du gap pour des chaînes fermées de longueur L sont données dans tableau 5.1[Lin 90]

Or, d'après la prédiction de Haldane (3.36),

$$\xi(S) \propto S^{-1} e^{\pi S}$$

et utilisant $\xi_{S=1} = 6.03$[White 92b], ξ devrait être de l'ordre 80 pour $S = 2$. La taille du système le plus grand est alors sensiblement inférieure à ξ, ce qui interdit une extrapolation sérieuse. On est alors forcé d'utiliser des algorithmes Monte-Carlo où le DMRG, que nous utilisons ici.

5.1.1 Choix du système considéré

Afin de calculer le gap, nous considérons une chaîne $S = 2$ ouverte avec un spin 1 à chaque bord ($S_1 = S_L = 1$; sinon, $S_i = 2$) :

$$H = J_{end}\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 + J\sum_{i=2}^{L-2}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1} + J_{end}\mathbf{S}_{L-1}\mathbf{S}_L \tag{5.1}$$

Dès maintenant, tous les résultats seront données en unité de J. Le gap de Haldane peut être proprement défini comme le gap en énergie entre l'état fondamental et le premier état excité d'une chaîne périodique dans la limite thermodynamique, où l'état fondamental n'est pas dégénéré. Pour l'Hamiltonien AKLT pour $S = 2$ d'une chaîne ouverte c'est le gap entre le quintuplet avec $S_{total} = 2$ et le septuplet avec $S_{total} = 3$. Le DMRG s'appuie sur des algorithmes de diagonalisation comme l'algorithme de Lanczos, qui perdent substantiellement en précision pour des états propres dont les valeurs propres sont moins proches des bords du spectre.

Dans ce qui suit nous allons être guidés en supposant que la physique essentielle de la chaîne de Heisenberg $S = 2$ est décrite par l'Hamiltonien AKLT pour $S = 2$, ce qui a été démontré pour $S = 1$; tous nos résultats seront cohérentes sous cette hypothèse. Suivant White et Huse[White 93a], nous choisissons un état parmi la variété d'états de bord créée par les spins de bord libres, en ajoutant un spin-$S/2$ à chaque bord de la chaîne et en les couplant à la chaîne avec un couplage antiferromagnétique. La dégénérescence est levée si le couplage du bord J_{end} excède une valeur critique $\approx \Delta_S/S$ avec Δ_S le gap de la chaîne S : Si le couplage est au-dessous de cette valeur, l'excitation la plus basse est obtenue en excitant un lien du bord dans son état triplet, ce qui coûte $J_{end}S$ en énergie. L'excitation est alors localisée aux bords. Afin d'obtenir l'excitation la plus basse du volume, qui coûte une énergie Δ_S, il faut défavoriser énergétiquement l'excitation du bord. Ainsi, l'excitation la plus basse du volume est donnée par la première excitation, qui est beaucoup plus précisement accessible que le septuplet de la chaîne non modifiée.

Il nous reste de choisir un J_{end} opportun dans le régime permis. Nous avons étudié $0.2 < J_{end} < 2.5$, prenant en considération des chaînes jusqu'à une longueur $L = 90$ et gardant $M = 90$ états dans la base tronquée. Nous trouvons que pour tous les J_{end} examinés les courbes du gap (défini par la différence en énergie de l'état fondamental et de la première excitation) décroissent et convergent les unes vers les autres pour $L \to \infty$; tous les J_{end} sont nettement au-dessus de la valeur attendue $J_{end} \approx 0.05$ pour le changement de l'excitation du volume dans une excitation des bords (figure 5.1). Nous aimerions remarquer ici qu'une petite inflexion de la courbe du gap vers des valeurs plus grandes pour $L \to 90$ pour $J_{end} = 0.2$ est un effet artificiel du DMRG qui vient de l'omission d'une extrapolation des résultats en M (pour une explication, voir les explications pour la figure 5.5). Pour $L = 90$, l'erreur est de l'ordre ≈ 0.02. La convergence des courbes assure que le gap que nous calculons est une propriété du volume et ne dépend pas des manipulations des bords de la chaîne. On peut comparer le diagramme correspondant pour $S = 1$ (figure 5.2), où nous avons établi la valeur $J_{end} \approx 0.51$

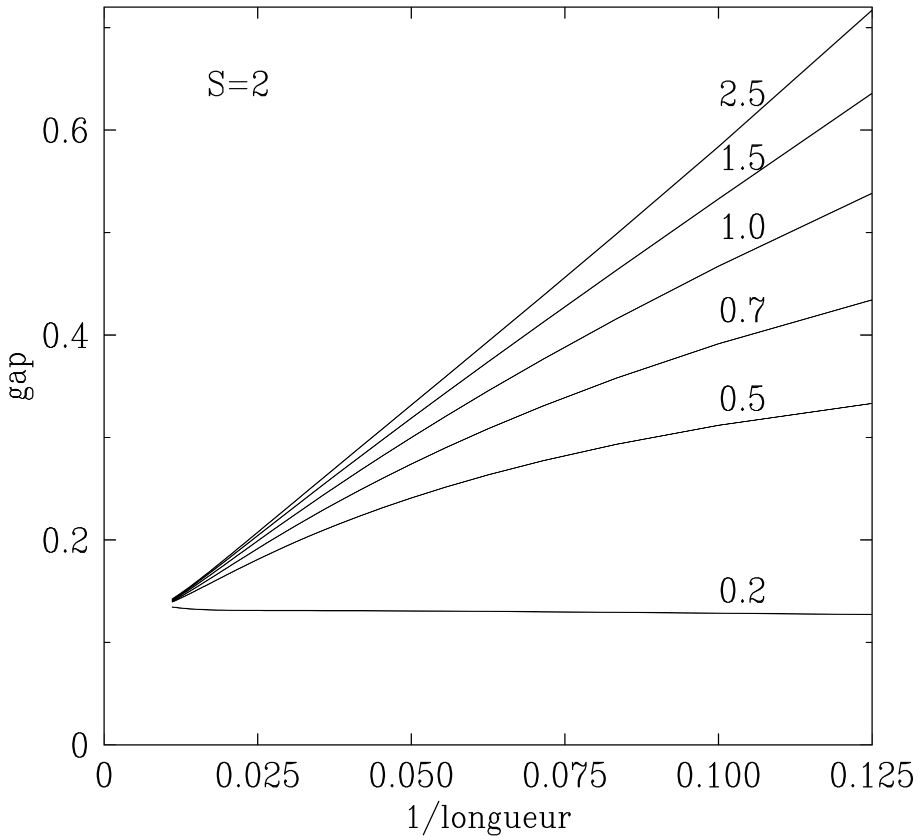

FIG. 5.1: *Gaps pour une chaîne isotrope antiferromagnétique de spin 2 ouverte calculés avec $M = 90$ en fonction de la longueur L et du couplage de bord J_{end}.*

pour le changement du type de l'excitation : Au-dessus du couplage critique, tous les courbes du gap convergent. Au-dessous du couplage critique, le gap augmente avec L et sature vers une valeur $\Delta \approx J_{end}$ comme attendu.

Notre choix de J_{end} pour les calculs à haute précision est déterminé par deux facteurs en compétition, la convergence plus rapide vers la valeur limite du gap pour $L \to \infty$ pour des petits J_{end}, et une augmentation substantielle de l'erreur de troncation $\rho_1(M)$ pour des petits J_{end}. Afin de comprendre ces effets en compétition, nous considérons le *gap local* défini comme

$$\Delta_i = J_i[\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle_{EXC} - \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle_{GS}], \tag{5.2}$$

la différence des énergies locales du lien entre sites i et $i+1$ pour l'état fondamental et le premier état excité. Evidemment $\Delta = \sum_i \Delta_i$. Dans la figure 5.3,

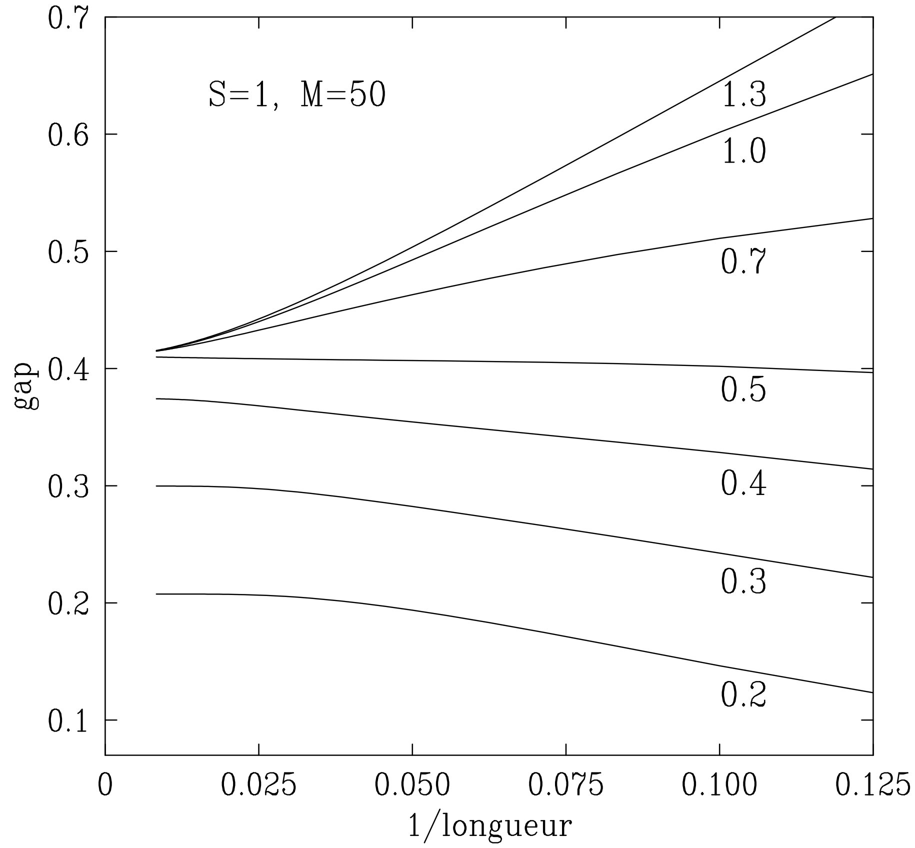

FIG. 5.2: *Gaps pour une chaîne isotrope antiferromagnétique de spin 1 ouverte calculés avec $M = 90$ en fonction de la longueur L et du couplage de bord J_{end}.*

nous montrons $\frac{\Delta_i+\Delta_{i+1}}{2}$ (afin de réduire des effets de dimérisation que nous allons discuter plus bas) pour des J_{end} différents et une chaîne de longueur 90. Dans un système périodique, la distribution de l'énergie du gap serait uniforme. Ici, pour des J_{end} plus grands l'énergie du gap est de plus en plus localisée au centre de la chaîne, parce que l'excitation des liens aux bords coûte de plus en plus cher en énergie. Cet argument n'est valable que pour des J_{end} pas trop grands : pour $J_{end} \to \infty$ les deux spins aux deux bords vont se coupler dans un singlet qui ne peut pas être excité, et on retrouve effectivement une chaîne raccourcie de 2 sites. Il y a ainsi une limite à la localisation. Nos résultats semblent indiquer que le comportement pour $J_{end} = 1$ et $J_{end} = 2.5$ est presque identique et la limite infinie alors atteinte.

Nous aimerions commenter ici la petite baisse de l'énergie locale du gap

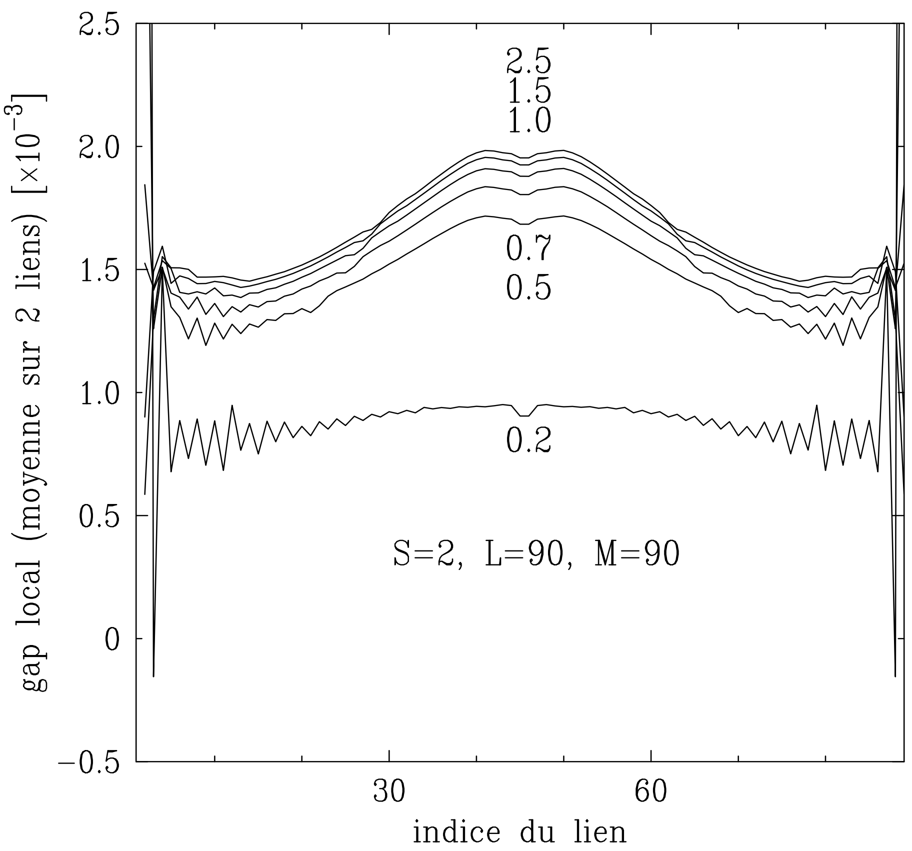

FIG. 5.3: *Gap local (différence entre les énergies d'un lien pour l'état fondamental et la première excitation) moyenné sur deux liens pour une chaîne ouverte anti-ferromagnétique isotrope de spin 2 en fonction de J_{end}. Longueur $L = 90$, avec $M = 90$.*

moyennée au centre de la chaîne : elle n'a pas d'origine physique, mais est un effet artificiel du DMRG : L'effet est de l'ordre $< 10^{-4}$ et est seulement visible dans la petite différence de deux grandes énergies, qui elles-mêmes sont surestimées par lien par $\approx 10^{-4}$, avec une erreur beaucoup plus grande (typiquement un facteur ≈ 3) pour la première excitation par rapport à l'état fondamental. Les énergies du lien au centre d'une chaîne sont calculées très précisement, car le lien est entouré par un bon modèle d'une chaîne longue et il n'y a pas de troncation. Les énergies des liens en dehors du centre accumulent l'erreur ci-dessus à cause des effets de troncation, donnant une surestimation du gap local de l'ordre de l'erreur ci-dessus. Effectivement, on voit une petite baisse de l'énergie locale du gap au centre. Pour des chaînes plus longues, elle est plus prononcée, car le gap

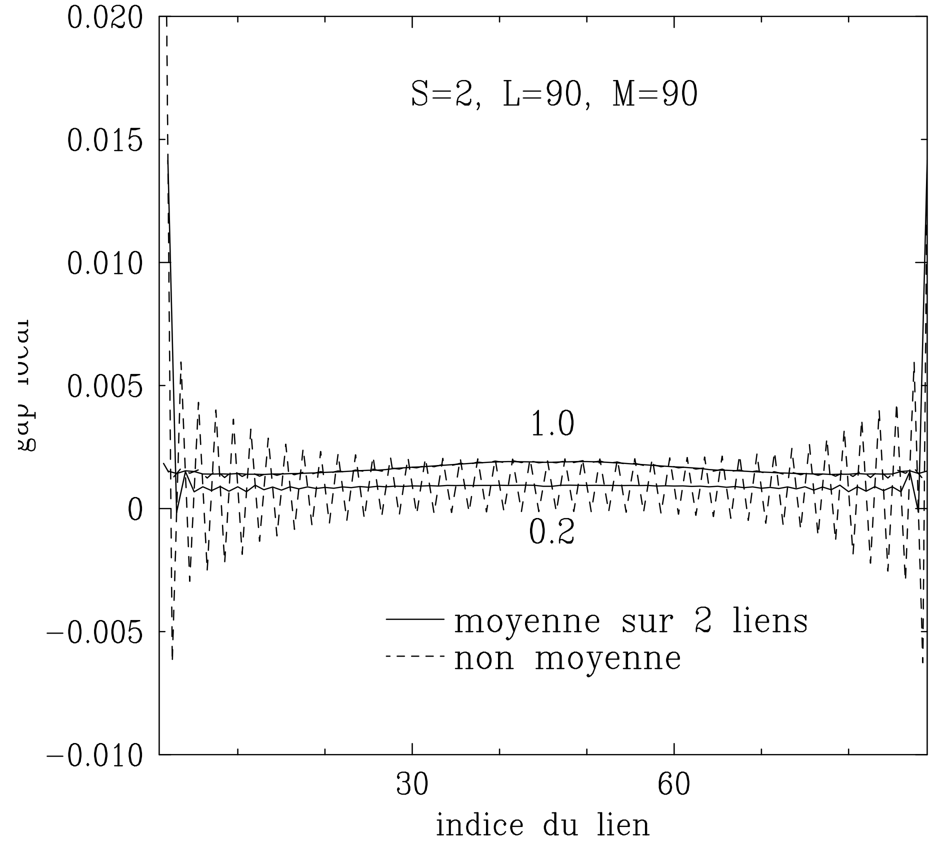

FIG. 5.4: *Gap local (voir figure ci-dessus) moyenné sur deux liens (ligne solide) et sur un seul lien (ligne interrompue), pour le système de la figure précédente avec* $J_{end} = 0.2$ *et* $J_{end} = 1.0$.

local est plus petit. On peut réduire arbitrairement cette baisse en augmentant M.

Dans des chaînes courtes, les excitations des liens aux bords sont plus importantes que pour les chaînes longues et sont la raison des grandes différences dans les valeurs du gap pour les J_{end} différents pour des chaînes courtes. Pour des couplages faibles, l'excitation sera de plus en plus localisée vers les bords de la chaîne, qui sont en effet une borne stricte (mais pas comme dans un puits d'énergie infinie : il n'y a pas de réflection parfaite). Ceci donne une dimérisation de l'énergie du gap : dans la figure 5.4, nous montrons la moyenne sur deux liens du gap local et le gap local par lien pour $J_{end} = 1.0$ et $J_{end} = 0.2$. Pour des couplages faibles, il y a une forte période de 2 dans le gap local à cause des condi-

J_{end}	$\rho_1(M)$
2.5	0.52×10^{-5}
1.5	0.53×10^{-5}
1.0	0.54×10^{-5}
0.7	0.56×10^{-5}
0.5	0.59×10^{-5}
0.2	0.84×10^{-5}

TAB. 5.2: *Erreurs de troncation pour la première excitation d'une chaîne antiferromagnétique isotrope de spin 2 ouverte de longueur $L = 90$ avec $M = 90$.*

tions de bord : pour $J_{end} = 0.2$, l'amplitude de l'oscillation est environ 4 fois le gap local moyenné, alors qu'elle est négligeable pour $J_{end} = 1$ (invisible dans la figure). Si l'on considère les énergies locales des liens, on voit que la dimérisation est beaucoup plus importante pour la première excitation que pour l'état fondamental. L'interaction forte de la première excitation (impulsion de l'ordre π) avec les bords "durs" de la chaîne mène à une diffraction et excitation d'autres excitations (impulsions de l'ordre 2π pour la deuxième excitation) qui sont en interférence. Cette interférence est caractérisée par un vecteur d'onde de l'ordre π (voir aussi [White 93a]).

Pour l'application du DMRG, la dimérisation est un problème car les liens développent un caractère alternant, ce qui implique que l'information pour la troncation obtenue en créant un lien du type 1 est utilisée dans l'étape prochaine pour construire un lien du type 2 ; la qualité de la troncation est ainsi réduite. Effectivement, on observe une forte hausse de l'erreur de troncation $\rho_1(M)$ pour la première excitation pour des petits J_{end} dans des chaînes de longueur $L = 90$ (tableau 5.2). L'effet de l'erreur de troncation pour des chaînes longues est pire, car les nombres donnés ci-dessus sont pour une longueur de chaîne où les erreurs de troncation n'ont pas encore convergées vers leur valeur pour une chaîne de longueur infinie et leur différence est encore en hausse. Un phénomène semblable, mais moins prononcé, peut être observé pour l'état fondamental.

Comme l'erreur pour l'énergie totale est proportionnelle à $L\rho_1(M)$, même de petites augmentations de l'erreur de troncation limitent sévèrement la précision des valeurs du gap obtenues pour des L grands, ce qui rend les extrapolations beaucoup plus difficiles. Etant donnée la convergence rapide des différentes courbes du gap, le choix dans une région de, disons, $0.7 \leq J_{end} \leq 1.5$ est en principe libre et nous choisissons arbitrairement $J_{end} = 1$, ce qui nous semble un compromis raisonnable. En tout cas, à part des changements dans l'estimation de l'erreur, le résultat final n'est pas affecté.

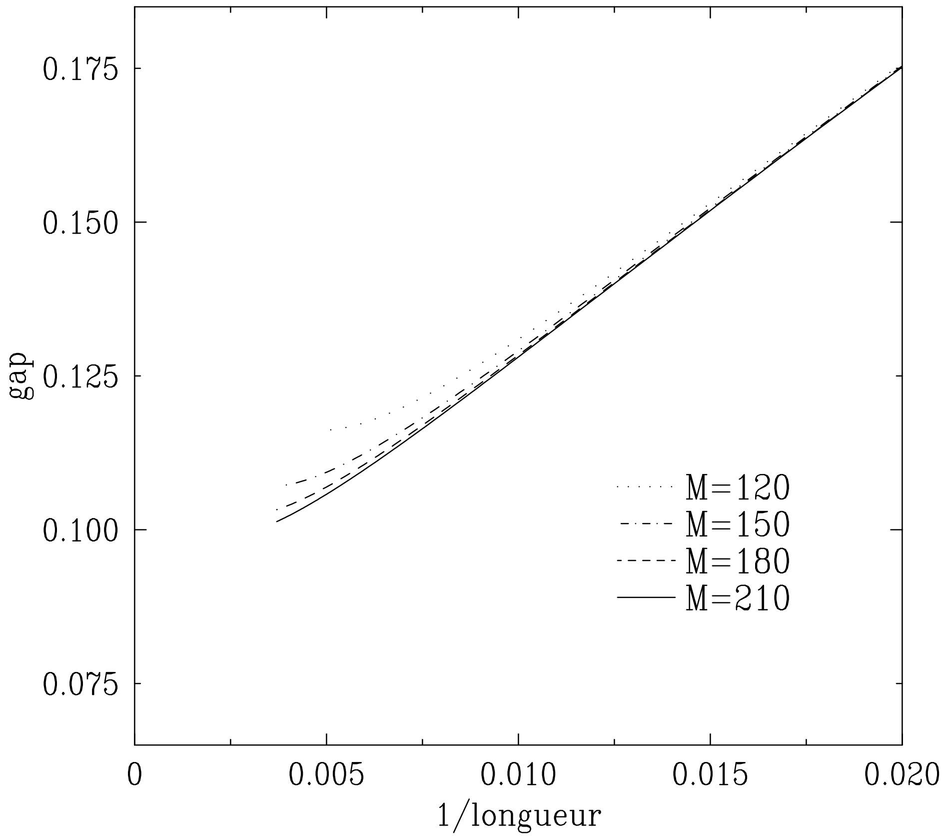

FIG. 5.5: *Gap d'une chaîne de spin 2 ouverte isotrope antiferromagnétique avec $J_{end} = 1$, en fonction de la longueur L, pour des M différents. Les valeurs ont été calculées en utilisant l'algorithme de taille infinie.*

Nous avons calculé la gap par soustraction de l'énergie de l'état propre à plus basse énergie dans le sous-espace $S^z_{tot} = 0$ (l'aimantation totale est évidemment un bon nombre quantique du système), l'état fondamental singlet, de l'énergie de l'état propre à plus basse énergie dans le sous-espace $S^z_{tot} = 1$, un des états dans le triplet de la première excitation. A cause des propriétés de l'algorithme de Lanczos, le deuxième état propre dans le sous-espace $S^z_{tot} = 0$ est seulement approximativement dégénéré avec le premier état avec $S^z_{tot} = \pm 1$, et toujours un peu plus haut en énergie ; il est alors inopportun pour le calcul du gap. Nous ne suivons *pas* la méthode de White et Huse[White 93a] pour la chaîne de spin 1, de rendre la densité d'énergie et de spin le plus uniforme possible au centre d'une chaîne longue et de calculer le gap à partir de l'énergie locale. Leurs chaînes étaient typiquement de l'ordre $L \approx 100$; comme nous allons trouver que pour $S = 2$ la longueur de corrélation augmente par un facteur d'ordre 8, ceci impliquerait le calcul des chaînes d'ordre $L \approx 800$, très au-dessus de la performance des ordinateurs actuels.

Pour le calcul du gap, il est important de réaliser que l'algorithme pour une chaîne infinie sans modifications n'est *pas* opportun pour calculer le gap de $S = 2$, à cause du problème de troncation pour des chaînes courtes ; et que des extrapolations en M doivent précéder les extrapolations en L. Considérons la figure 5.5. Elle montre le gap pour une chaîne de longueur L donné par la différence des deux énergies considérées pour un nombre fixe M des états retenus. Il est évident que pour chaque M, la courbe s'écarte d'un comportement en L^{-1}, et le gap semble alors suivre une courbe parabolique. Nous observons (encore un autre) effet artificiel du DMRG, qui est réduit pour des M plus grands (une meilleure précision). Le caractère variationnel de la méthode, qui considère des sous-espaces de l'espace de Hilbert complet, a pour conséquence une surestimation des deux énergies impliquées. Empiriquement, on trouve, que pour la première excitation l'erreur est beaucoup plus important : alors, à chaque étape, une erreur finie *positive* δ est ajouté au vrai gap. Pour des chaînes longues, δ sature (la renormalisation des blocs mène au même bloc "infini" à chaque étape pour $L \to \infty$). L'erreur du gap accumulée ralentit d'abord la baisse du gap pour $L \to \infty$ et éventuellement donne une hausse du gap, quand δ est plus grand que la baisse du vrai gap d'une étape à l'autre. Pour une chaîne $S = 1$ cet effet est d'importance mineure, car δ peut être fait extremement petit pour des M numériquement faisable (facilement 10^{-7}) et alors ignoré. La figure 5.5 montre effectivement que ce n'est pas vrai pour $S = 2$. Nous avions alors à utiliser l'algorithme de taille finie, qui consomme beaucoup plus de ressources, mais réduit itérativement les effets de l'erreur de troncation et diminue beaucoup δ. Les itérations de cet algorithme peuvent être répétées en principe indéfiniment, mais les corrections deviennent rapidement très petites et sont submergées par des erreurs numériques. En calculant la correction itérative pour l'état fondamental et la première excitation, nous avons trouvé que la contribution la plus importante vient de la première itération pour l'excitation. Toutes les autres corrections étaient typiquement plus petites par un facteur d'au moins 10 et ne justifiaient pas l'effort de calcul. Nous considérons alors dans le suivant des énergies de l'état fondamental *sans* itération et des énergies de l'excitation avec *une* itération. Nos résultats indiquent que l'erreur δ est réduit par un facteur d'ordre 3, ce qui permet, à précision fixée, de calculer des chaînes 3 fois plus longues.

Recapitulons dans quelques mots les questions abordées, car les mêmes questions se posent pour toutes les applications du DMRG :

- Si l'on veut calculer une quantité pour un système aux conditions de bord périodiques : Est-ce que, dans la limite thermodynamique, la quantité á calculer est la même pour un système aux conditions de bord périodiques et le système ouvert que l'on considère (par exemple, problèmes de dégénérescence) ? Si non, quelles modifications faut-il appliquer au système ouvert (par exemple, modification des interactions aux bords, modification des bords) ?
- Si l'on a le choix entre plusieurs modifications : Quelle modification donne la meilleure convergence vers la limite thermodynamique avec l'erreur la plus petite possible ? Souvent, ces deux exigences seront en compétition.
- Est-ce que le nomber M d'états retenus est suffisamment grand pour donner des résultats qui peuvent être extrapolés vers $L = \infty$? Il faut se méfier du caractère variationnel du DMRG, qui peut introduire des effets artificiels au caractère systématique. Si, en essayant plusieurs M, la réponse est "non", quelle loi détermine la convergence des résultats en M, afin de les extrapoler vers $M = \infty$?
- Quelle amélioration des résultats est apportée en utilisant l'algorithme de taille finie ? Est-ce qu'elle est justifiée par rapport aux moyens informatiques ?
- Quand les résultats auront été extrapolés vers $M = \infty$ pour des longueurs L donnés : Quelle loi détermine la convergence des résultats vers $L = \infty$?

5.1.2 Résultats du calcul

Nous avons calculé le gap pour $L = 60, 90, 120, 150, 210$ et 270, en retenant jusqu'à $M = 210$ états. Nos calculs ont été executés sur le CRAY C94 du CEA, avec une vitesse atteignant 180 MegaFlops pour $M = 210$. Le calcul des propriétés de l'état fondamental pour $L = 270$ et $M = 210$ nécessitait 10322 secondes de temps de CPU ; les temps de calcul sont linéaires en L et moins que cubique en M (parce que la vitesse augmente avec M), l'utilisation de mémoire (jusqu'à 1 Gigaoctet) linéaire en L et quadratique en M. Afin d'obtenir le gap dans la limite

gap	$L = 60$	$L = 90$	$L = 120$	$L = 150$	$L = 210$	$L = 270$
M=50	0.1728 0.1616					
M=70	0.1655 0.1609	0.1463 0.1372				
M=90	0.1632 0.1604	0.1412 0.1352	0.1332 0.1238	0.1314 0.1183		
M=120	0.1606 —	0.1356 0.1336	0.1244 0.1209	0.1190 0.1139	0.1162 0.1076	
M=150	0.1600 —	0.1342 —	0.1217 0.1202	0.1149 0.1127	0.1087 0.1052	0.1071 0.1020
M=180	0.1598 —	0.1336 —	0.1207 —	0.1134 —	0.1062 0.1040	0.1033 0.1002
M=210	0.1597 —	0.1334 —	0.1203 —	0.1127 —	0.1049 —	0.1013 0.0995
M=∞	0.1597(1)	0.1333(1)	0.1202(1)	0.1124(2)	0.1034(3)	0.0985(5)

TAB. 5.3: *Energie du gap en fonction de la longueur L et de M. Première ligne : résultats sans itération; deuxième ligne : résultats avec itération. Les résultats pour $M = \infty$ ont été obtenus par extrapolation.*

thermodynamique, nous avons procédé en deux étapes : (i) Pour chaque L, les résultats sont extrapolés vers $M = \infty$, le gap exact pour une longueur de chaîne L. (ii) Les résultats "exacts" pour chaque L sont extrapolés vers $L \to \infty$.

Dans le tableau 5.3, nous donnons les résultats obtenus pour le gap; la première ligne, sans itération de l'énergie de la première excitation, la seconde ligne, avec itération de l'énergie de l'excitation. L'extrapolation en M n'est pas faite pour le gap, mais pour les énergies. Nous trouvons que les énergies peuvent être bien approchées par

$$E(M) = E + \alpha L \rho_1(M), \tag{5.3}$$

avec $\rho_1(M)$ l'erreur de troncation pour la dernière étape de la croissance de la chaîne. $\rho_1(M)$ décroît de façon monotone avec M. Nous trouvons que α est presque indépendant de L pour les valeurs considérées et d'ordre 10 pour l'état fondamental et la première excitation (itérée); la coincidence des valeurs est accidentelle. Pour la première excitation sans itération, $\alpha \approx 30$. Les énergies sont données dans les tableaux 5.4 à 5.7, l'erreur de troncation est donnée dans le tableau 5.8. E est alors l'extrapolation de l'énergie pour $M \to \infty$ car $\rho_1(\infty) = 0$. Nous savons déjà que les *deux* énergies sont surestimés; la convergence du gap

E_0	$L = 60$	$L = 90$	$L = 120$
$M = 50$	-277.363431	—	—
$M = 70$	-277.370690	-420.205654	—
$M = 90$	-277.372328	-420.208818	-563.045334
$M = 120$	-277.322798	-420.209801	-563.046851
$M = 150$	-277.372958	-420.210187	-563.047487
$M = 180$	-277.372997	-420.210275	-563.047632
$M = 210$	-277.373014	-420.210320	-563.047708

TAB. 5.4: *Energie de l'état fondamental pour $L = 60, 90, 120$ en fonction de M.*

E_0	$L = 150$	$L = 210$	$L = 270$
$M = 90$	-705.881848	—	—
$M = 120$	-705.883904	-991.558009	—
$M = 150$	-705.884795	-991.559411	-1277.234028
$M = 180$	-705.884999	-991.559735	-1277.234471
$M = 210$	-705.885107	-991.559907	-1277.234707

TAB. 5.5: *Energie de l'état fondamental pour $L = 150, 210, 270$ en fonction de M.*

est alors plus rapide car les erreurs se compensent partiellement.

Les résultats pour l'état fondamental nous permettent de calculer l'énergie fondamentale par site E_0. Deux effets sont à considérer : premièrement, l'énergie par site va converger vers sa valeur de volume seulement pour $L \gg \xi$, un effet accentué par les conditions de bord ouvertes. Deuxièmement, comme toujours nous allons variationellement surestimer l'énergie pour M fini, avec plus grande précision pour M plus grand. Par conséquence, nous laissons d'abord converger en L l'énergie par lien pour un M donné ; ces résultats pour une chaîne infinie sont alors extrapolés en M. Nous trouvons que pour $L \approx 120$ et chaque $M \leq 210$ considéré l'énergie fondamentale par lien a convergé mieux que 10^{-6}. Prenant ces résultats comme ceux de la chaîne infinie, nous obtenons les résultats dans le tableau 5.9. Le résultat extrapolé a été obtenu de la dépendance linéaire des énergies de l'erreur de troncation. L'estimation de l'erreur est très génereuse. Notons que notre résultat est en désaccord avec un résultat trouvé indépendamment par Qin et al.[Qin 95] : ils donnent $E_0 = -4.7608$ (sans barre d'erreur) pour $M = 120$.

Afin d'obtenir maintenant le gap dans la limite thermodynamique, nous pouvons extrapoler nos résultats pour $90 \leq L \leq 270$ vers $L = \infty$ en utilisant une loi en L^{-1} pour le gap (figure 5.6 ; à la fin de cette section) et obtenons une

E_1	$L = 60$	$L = 90$	$L = 120$
$M = 50$	-277.190606	—	—
	-277.201845	—	—
$M = 70$	-277.205122	-420.059362	—
	-277.209792	-420.068504	—
$M = 90$	-277.209163	-420.067665	-562.912119
	-277.211962	-420.073580	-562.921505
$M = 120$	-277.212152	-420.074121	-562.922455
	—	-420.076194	-562.925939
$M = 150$	-277.212918	-420.076014	-562.925787
	—	—	-562.927308
$M = 180$	-277.213176	-420.076664	-562.926926
	—	—	—
$M = 210$	-277.213283	-420.076953	-562.927456
	—	—	—

TAB. 5.6: *Energie de la première excitation pour* $L = 60, 90, 120$ *en fonction de* M. *Première ligne : sans itération, deuxième ligne : avec itération.*

E_1	$L = 150$	$L = 210$	$L = 270$
$M = 90$	-705.750495	—	—
	—	—	—
$M = 120$	-705.764901	-991.441835	—
	-705.769971	-991.450422	—
$M = 150$	-705.769910	-991.450671	-1277.126966
	-705.772093	-991.454243	-1277.132010
$M = 180$	-705.771600	-991.453583	-1277.131213
	—	-991.455722	-1277.134216
$M = 210$	-705.772409	-991.455040	-1277.234707
	—	—	-1277.135242

TAB. 5.7: *Energie de la première excitation pour* $L = 150, 210, 270$ *en fonction de* M. *Première ligne : sans itération, deuxième ligne : avec itération.*

$\rho_1(M)$	$L = 60$	$L = 90$	$L = 120$	$L = 150$	$L = 210$	$L = 270$
$M = 50$	0.10(-4) 0.21(-4)					
$M = 70$	0.44(-5) 0.71(-5)	0.50(-5) 0.10(-4)				
$M = 90$	0.13(-5) 0.35(-5)	0.16(-5) 0.54(-5)	0.17(-5) 0.69(-5)	0.18(-5) 0.80(-5)		
$M = 120$	0.48(-6) 0.90(-6)	0.66(-6) 0.17(-5)	0.72(-6) 0.24(-5)	0.74(-6) 0.30(-5)	0.75(-6) 0.39(-5)	
$M = 150$	0.15(-6) 0.30(-6)	0.23(-6) 0.60(-6)	0.26(-6) 0.88(-6)	0.28(-6) 0.11(-5)	0.29(-6) 0.15(-5)	0.29(-6) 0.18(-5)
$M = 180$	0.71(-7) 0.13(-6)	0.12(-6) 0.28(-6)	0.14(-6) 0.43(-6)	0.15(-6) 0.56(-6)	0.16(-6) 0.76(-6)	0.16(-6) 0.92(-6)
$M = 210$	0.37(-7) 0.67(-7)	0.64(-7) 0.15(-6)	0.81(-7) 0.24(-6)	0.92(-7) 0.32(-6)	0.94(-7) 0.44(-6)	0.94(-7) 0.53(-6)

TAB. 5.8: *Erreur de troncation pour la dernière étape en fonction de la longueur L et de M. Premième ligne : état fondamental ; deuxième ligne : première excitation. Les chiffres entre parenthèses donnent les puissances de 10.*

M	E_0	$\rho_1(M)$
90	-4.7612172	0.18×10^{-5}
120	-4.7612351	0.75×10^{-6}
150	-4.7612436	0.29×10^{-6}
180	-4.7612456	0.16×10^{-6}
210	-4.7612467	0.95×10^{-7}
∞	-4.761248(1)	—

TAB. 5.9: *Energies par lien d'une chaîne antiferromagnétique isotrope de spin 2 et erreurs de troncation en fonction de M.*

estimation du gap pour $L = \infty$ de 0.081(1). Les déviations d'un comportement linéaire parfait sont extrêmement petites dans le régime de L que nous venons de considérer. Le modèle σ non-linéaire prédit un comportement asymptotique du gap dans une chaîne ouverte, qui est donné par une loi en $1/L^2$: les quasiparticules (relativistes) massives vérifient une relation de dispersion

$$E_k = \sqrt{\Delta_\infty^2 + c^2(k-\pi)^2} \approx \Delta_\infty + \frac{c^2(k-\pi)^2}{2\Delta_\infty} \tag{5.4}$$

près du minimum de la bande (Δ_∞ est le gap dans la limite thermodynamique). Sur une chaîne ouverte avec $L \gg \xi$, la quasiparticule ne peut pas rester dans un état stationnaire avec $k = \pi$ mais plutôt $k - \pi \approx \pi/L$ comme une particule dans une boîte parce qu'il n'y a pas d'invariance par translation. Ceci implique que l'excitation la plus basse a un gap

$$\Delta(L) = \Delta_\infty + \frac{c^2\pi^2}{2\Delta_\infty L^2} + O(1/L^3). \tag{5.5}$$

Pour la chaîne ouverte de spin 1, ce comportement est bien vérifié ([White 92b, Sørensen 93]). Pour $S = 2$, ce comportement ne se montre pas encore pour $L = 270$. Il doit alors y avoir un point de passage vers un comportement parabolique de $\Delta(L)$ pour L plus grand. En conséquence, nous pouvons obtenir une limite supérieure du gap en supposant que le comportement parabolique commence immédiatement au-délà de $L = 270$. Nous joignons une courbe parabolique $\Delta(L) = \Delta_\infty + aL^{-2}$ à notre courbe du gap extrapolée linéaire à $L = 270$ ainsi que, jusqu'à la première dérivée, les deux courbes se joignent continûment. On trouve $\Delta_\infty = 0.090$ (et $a \approx 620$). Nous avons aussi estimé la longueur de corrélation ≈ 50 (voir ci-dessous) et ainsi la vitesse des ondes de spin $c = \xi\Delta_\infty \approx 4.2$. Ceci permet de donner une estimation du coefficient du terme parabolique $1/L^2$. Utilisant cette estimation ($a_0 \approx 1024$) nous définissons maintenant une longueur de passage L_0 pour laquelle le comportement asymptotique $\Delta(L) = \Delta_\infty + a_0L^{-2}$ commence. Joindre cette courbe parabolique à la courbe linéaire implique $\Delta_\infty = 0.085$ et $L_0 \approx 450$. Nos résultats sont ainsi parfaitement cohérents ; nous choisissons comme valeur centrale pour le gap $\Delta_\infty = 0.085$, la borne inférieure donnée par l'extrapolation linéaire et la borne supérieure par 0.09 et donnons comme résultat final

$$\Delta_{S=2} = 0.085(5). \tag{5.6}$$

Il est clair qu'un spectre sans gap est exclu.

Notre résultat, qui est en accord avec une estimation préliminaire par Deisz et al.[Deisz 93], est en fort désaccord avec le résultat donné par Nishiyama, Totsuka et al.[Nishiyama 95], qui en calculant des chaînes avec des longueurs jusqu'à $L \approx 70$ et $M \leq 110$ et en supposant un comportement du gap comme L^{-1} obtiennent $\Delta = 0.055 \pm 0.015$. Comme le comportement en L^{-1} est approximativement correct pour les L qu'ils considèrent, nous nous attendrions à un résultat qui donne au moins une borne inférieure pour le gap, qui pourrait être surestimé à cause du petit M qu'ils considèrent. Ceci n'est pas le cas. Nous pensons que leur approche qui consiste à calculer directement le gap des différences d'énergie dans une chaîne ouverte *sans modifications* (sans les deux spin-1 aux bords) est trop difficile pour le DMRG pour les M considérés (à cause des limitations de temps de calcul, nous ne pouvons pas répéter leurs calculs avec notre programme pour des M plus grands). Comme nous avons observé un comportement "variationnel" dans toutes les quantités que nous avons considérées, ou autrement dit, un comportement monotone en M, le fait que leurs résultats pour le gap ne montrent pas un tel comportement nous semble indiquer un problème dans l'application de la méthode. Notre résultat est aussi en désaccord avec le résultat de Qin et al.[Qin 95], qui pour $M \leq 120$ donnent $\Delta \approx 0.02$ (sans estimation d'erreur) ; ils estiment en même temps $\xi \approx 33$, ce qui donne une vitesse des ondes de spin $c = \xi\Delta \approx 0.66$; on attend une valeur un peu supérieure à $c = 2S = 4$, ce qui est en très bon accord avec le $c \approx 4.2$ que nous trouvons de notre gap et notre longueur de corrélation. Il s'agit encore une fois d'une approche avec une chaîne non-modifiée qui pourrait souffrir des mêmes problèmes que celle de Nishiyama *et al.*

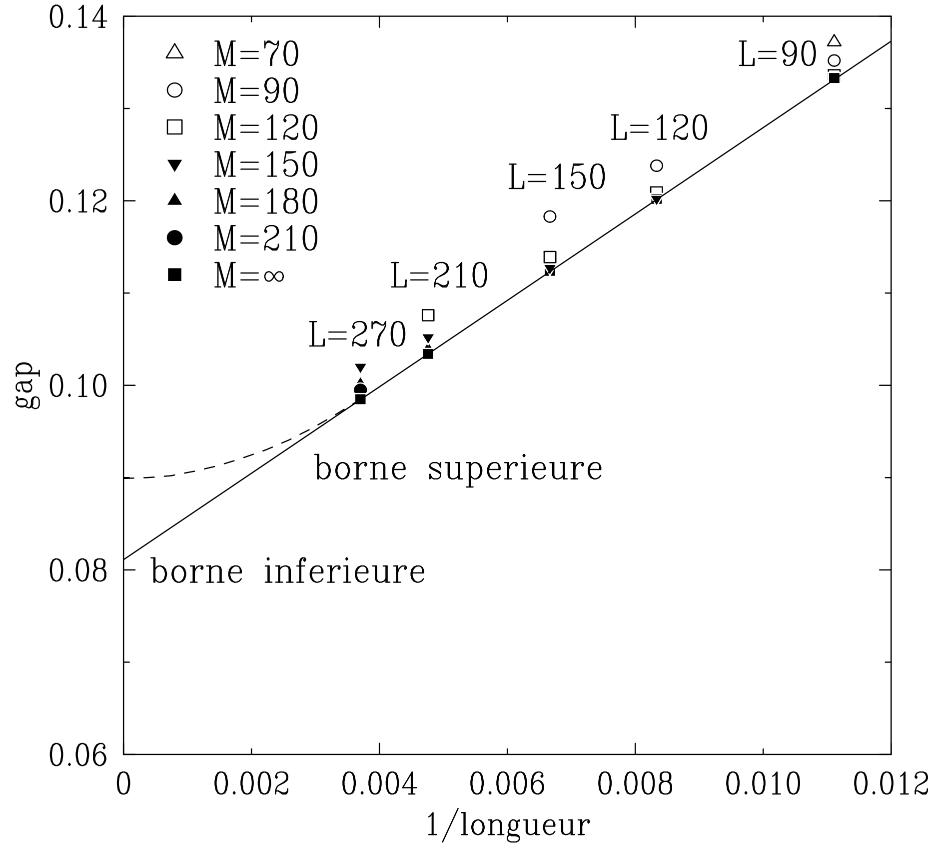

FIG. 5.6: *Gap d'une chaîne de spin 2 ouverte isotrope antiferromagnétique avec des spins 1 aux bords et* $J_{end} = 1$*, en fonction de la longueur* L*, pour des* M *différents. Les valeurs ont été calculées en utilisant l'algorithme de taille finie et extrapolées pour chaque* L *vers* $M = \infty$*. Les carrés noirs donnent les résultats extrapolés. La ligne solide donne une extrapolation de ces résultats vers* $L = \infty$*, donnant ainsi une borne inférieure du gap. La ligne interrompue donne une borne supérieure obtenue en supposant que la forme asymptotique* $\Delta(L) = \Delta_\infty + a/L^2$ *est vérifiée dès* $L = 270$ *; comme nous n'avons pas d'évidence d'un tel comportement, la ligne interrompue devrait être une borne supérieure.*

5.2 La longueur de corrélation pour $S = 2$

Pour le calcul de la longueur de corrélation, nous levons en partie la dégénérescence de l'état fondamental de la chaîne ouverte en ajoutant un spin 1 à *un* bord de la chaîne S=2 ($S_L = 1$, $S_i = 2$ pour les autres) :

$$H = J \sum_{i=1}^{L-2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_{end} \mathbf{S}_{L-1} \cdot \mathbf{S}_L. \tag{5.7}$$

L'état fondamental sera alors un triplet de spin 1 ; au bord de la chaîne où se trouve le spin-2 (position 1), on attend du modèle AKLT un spin 1 effectif libre. Si nous considérons l'état fondamental avec $S^z_{total} = 1$, nous attendons que $\langle S^z_i \rangle$ décroisse, exponentiellement, d'une valeur de $S^z_1 \approx +1$ du premier spin qui est devenu un spin 1 effectivement libre :

$$\langle S^z_i \rangle \propto (-1)^{i-1} \exp(-(i-1)/\xi). \tag{5.8}$$

Le comportement est purement exponentiel, ou, si l'on compare à une corrélation Ornstein-Zernike

$$C_{OZ}(r) \simeq e^{-x/\xi}/r^{(d-1)/2}, \tag{5.9}$$

typique pour un système unidimensionnel, alors que les corrélations calculées avec le modèle σ ont un comportement Ornstein-Zernike bidimensionnel, comme on l'attend pour un modèle quantique unidimensionnel. Ce changement de comportement peut être compris par le fait que le choix de l'état $S^z = 1$ pour le spin libre impose une condition de bord fixe pour tout temps (si nous faisons le mapping sur un problème classique à deux dimensions : espace plus temps) et réduit ainsi la dimensionnalité du problème. En analogie avec des arguments pour le modèle Ising classique dans deux dimensions avec un champ à un des quatre bords, on peut donner une explication intuitive : en utilisant l'intégrale de chemin, on voit que les corrélations à une distance r sont transportées par des marches de longueur $\approx r$, ce qui donne une facteur $e^{-r/\xi}$ (figure 5.7). Ces marches sont aléatoires dans la direction y (fluctuations quantiques). Or, une marche aléatoire dans une dimension qui part de $x = 0$ va arriver sur une ligne $x = r$ avec une déviation standard de l'ordre $\sqrt{r}$; la corrélation effective sera seulement $e^{-r/\xi}/\sqrt{r}$. Si les marches aléatoires partent sur tout l'axe y (à cause de la condition de bord), ce facteur $\sqrt{r}$ est éliminé.

Nous choisissons cette approche, parce que l'équation (5.8) donne la longueur de corrélation ξ beaucoup plus précisement que $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle \equiv C(|i-j|)$ avec

$$C(r) \approx A(-1)^r K_0(r/\xi) \approx A(-1)^r \sqrt{\pi\xi/2r} \exp(-r/\xi), \tag{5.10}$$

d'après le modèle σ non-linéaire. K_0 est la fonction de Bessel modifiée et A une constante. La deuxième expression est valable pour $r \gg \xi$.

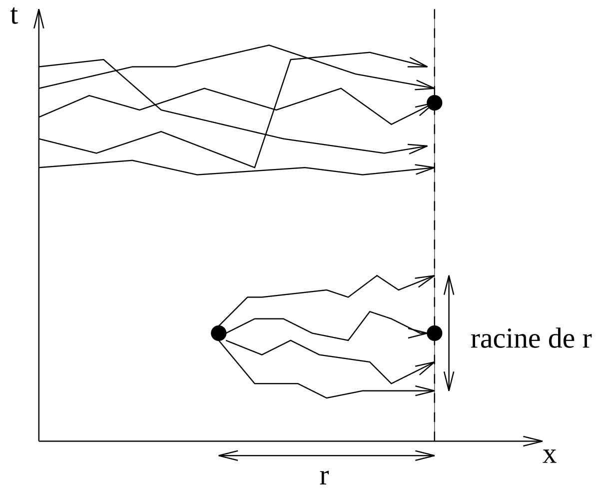

FIG. 5.7: *Explication intuitive des différentes lois de corrélation pour les corrélations spin-spin dans le bulk et pour la décroissance de l'aimantation locale dans une chaîne avec un spin effectif libre à un bord.*

La différence en précision vient du fait que la première approche supprime en partie les erreurs systématiques du DMRG grâce à la condition de bord effective fixe (voir ci-dessous), alors qu'elles augmentent pour des corrélations à deux points. Dans ce cas-là, des états corrélés dans les deux demi-chaînes sont systématiquement négligés en même temps, sous-estimant ξ. Ceci a déjà été démontré par White et Huse[White 93a], qui ont calculé la longueur de corrélation pour $S = 1$ en utilisant les deux approches et montré que les résultats sont égaux. Il n'y a pas de démonstration rigoureuse que les deux longueurs de corrélation sont identiques ; elles le sont pour l'état VBS et l'argument ci-dessus pour la réduction dimensionnelle aussi semble indiquer que les longueurs de corrélation sont identiques. Nous supposons alors que cette identité est une propriété générique des chaînes de spin S entier qui sont dans la même phase que l'Hamiltonien AKLT. Comme déjà dit, pour $S = 1$ cette identité semble directement établie ; pour $S = 2$, tous les résultats indiquent que la chaîne de Heisenberg isotrope de spin 2 partage les propriétés de la chaîne VBS. En plus, nous trouvons que notre longueur de corrélation donne, avec le gap trouvé comme une propriété pure du volume, une vitesse des ondes de spin parfaitement en accord avec la valeur théoriquement attendue.

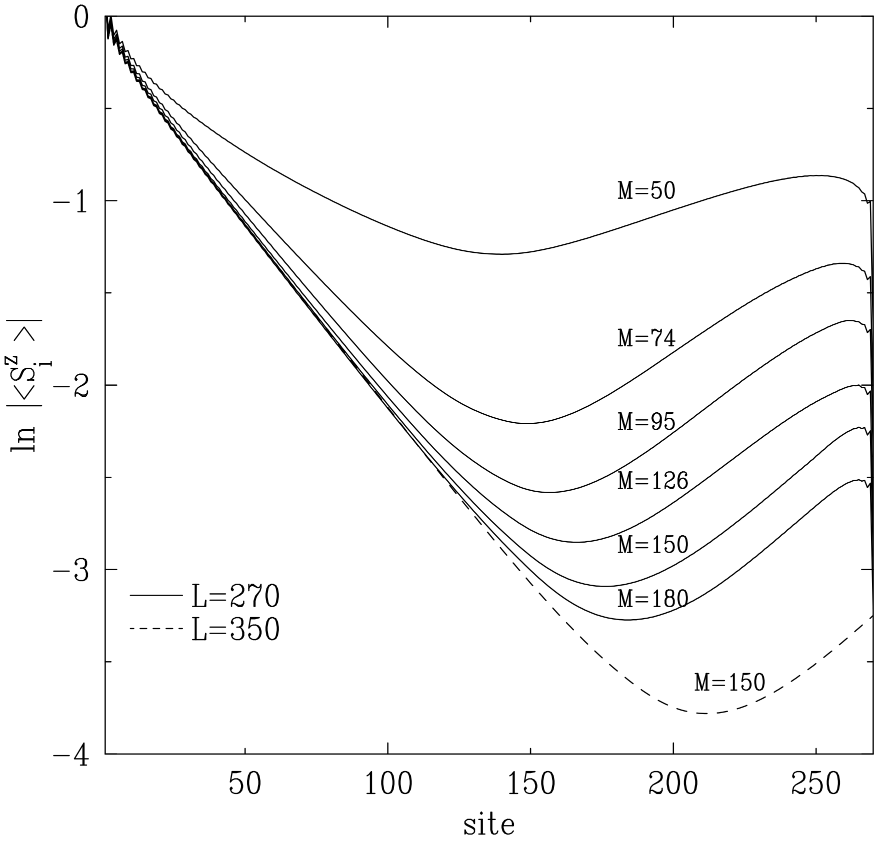

FIG. 5.8: $\ln|\langle S_i^z\rangle|$ *en fonction du site i pour une chaîne ouverte de spin 2 antiferromagnétique isotrope. Les valeurs moyennes pour le bord droit de la chaîne n'ont pas encore convergées, alors que la pente asymptotique pour* $M \to \infty$ *peut être déterminée.*

Avant de donner les résultats, considérons d'abord ceux donnés par (5.10) pour $S = 1$ et $S = 2$. Bien que la chaîne de spin 1 soit beaucoup moins proche d'une chaîne critique que celle de spin 2 et que le nombre d'états M nécessaire afin de décrire le spectre des excitations qui transporte les corrélations soit beaucoup plus petit, la longueur de corrélation “conventionnelle” a été trouvée[White 93a] comme $\xi_{S=1} \approx 5.15$ pour $M = 48$ (et une erreur de troncation $\rho_1(M) = 4.13 \times 10^{-9}$) et $\xi_{S=1} \approx 5.45$ pour $M = 110$ ($\rho_1(M) = 1.27 \times 10^{-11}$), à comparer avec la longueur de corrélation “de bord” $\xi = 6.03$, qui elle-même est en bon accord avec d'autres estimations (alors que les valeurs plus petites ne le sont pas)[Takahashi 88, Nomura 89, Liang 90, Kubo 92, Golinelli 94]. Pour $S = 2$ et $M = 210$, nous trouvons $\rho_1(M) = 9.4 \times 10^{-8}$, ce qui est beaucoup plus grand, et il faut s'attendre à des résultats pires pour $S = 2$ en utilisant l'approche conventionelle. Afin d'obtenir une estimation, nous avons calculé la longueur de corrélation de (5.10) en utilisant une chaîne de longueur $L = 270$ avec $M = 150$ ($P(M) = 2.9 \times 10^{-6}$), et trouvé $\xi \approx 40$, ce qui donne une borne inférieure de la vraie longueur de corrélation (et sera trouvée comme environ 80 pour cent da la valeur limite).

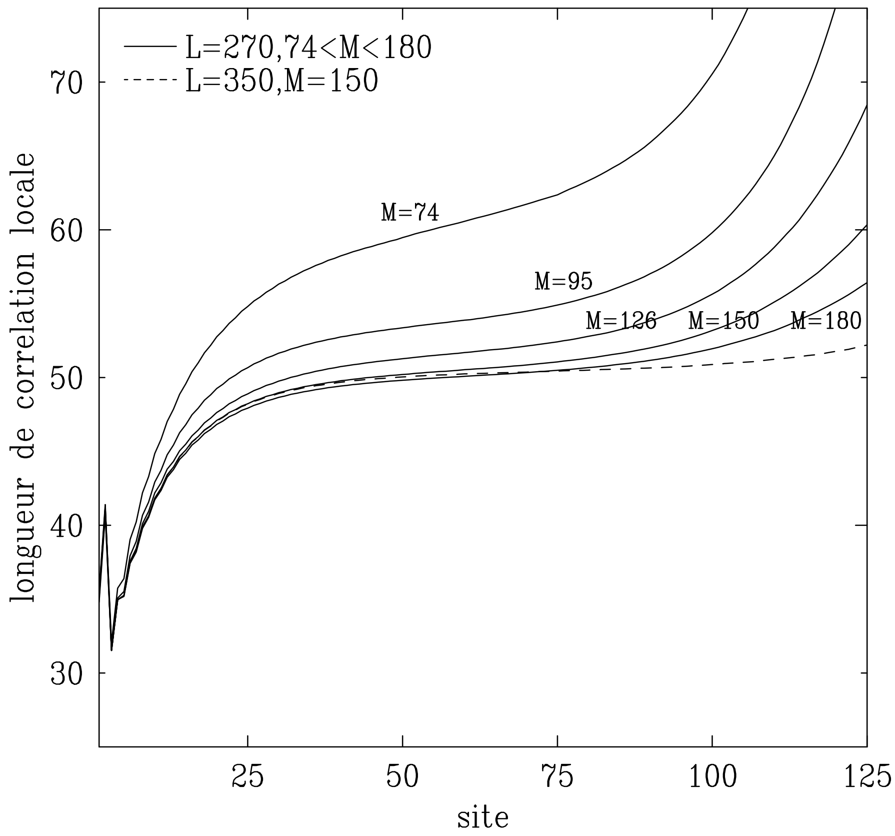

FIG. 5.9: *Moyenne sur deux sites voisins de la longueur de corrélation locale* $2/(\ln|\langle S_i^z\rangle| - \ln|\langle S_{i+2}^z\rangle|)$ *en fonction du site* i ($i < 125$) *pour une chaîne ouverte de spin 2 antiferromagnétique isotrope. Les déviations de l'épaulement au centre sont des effets de taille et précision finies.*

Afin de calculer la longueur de corrélation en utilisant l'approche du spin 1 ajouté, nous avons à faire une extrapolation de ξ par rapport à M à cause de la croissance lente de la précision avec M pour $S = 2$. En même temps, nous considérons des chaînes de longueur $L = 270$ et répétons quelques calculs pour $L = 350$, afin d'étudier des effets de taille finie possibles. Nous trouvons que ceux-ci sont mineurs, tout comme les effets du choix de J_{end}, et nous nous concentrons sur l'extrapolation en M. Dans la figure 5.8, nous donnons $\ln|\langle S_i^z \rangle|$ en fonction de i. Le comportement générique est le même pour tous les M : Après la diminution attendue de $|S_i^z|$, il y a une petite augmentation vers l'autre bout de la chaîne (largement exagérée par l'échelle logarithmique). Avec M plus grand le minimum se déplace vers la droite, la valeur moyenne du spin au bord droit de la chaîne est largement réduite, la diminution devient de plus en plus exponentielle et approche une droite limite que nous prenons comme résultat pour $M = \infty$. Nous ne savons pas si la diminution sera exponentielle pour toute la chaîne. Le cas $S = 1$ semble indiquer que ceci sera le cas pour une précision suffisante, donc pour un M grand : pour $S = 1$, nous trouvons pour $M = 90$ une diminution exponentielle jusqu'au bout de la chaîne.

Il est utile de retenir qu'ici nous trouvons une situation où la même quantité est déterminée avec une précision *très* variable en fonction du site, et qu'une petite erreur de troncation peut donner une fausse impression de précision. L'erreur a, dans notre analyse, l'origine suivante : L'état fondamental que nous considérons a effectivement des conditions de bord fixes au bord gauche (à cause de la présence du spin 1 effectivement libre) et des conditions de bord libres au bord droit. L'état fondamental est avant tout déterminé par le bord gauche : ceci peut être vu du fait que des changements forts de J_{end} n'influencent presque pas $\langle S_i^z \rangle$ même au bord droit de la chaîne. La valeur moyenne non-nulle de S_{total}^z est alors communiquée du bord gauche vers le bord droit par des corrélations, que nous négligeons en partie à cause de M fini. La troncation néglige systématiquement des états où les demi-chaînes ont un $|S^z|$ total élevé ; ceci implique que les valeurs $|S_i^z|$ sont réduites quand elles sont transmises à travers la chaîne. Afin de conserver S_{total}^z de la chaîne, chaque $|S_i^z|$ d'un site ajouté est surestimé en compensation de cette réduction effective. Nous observons numériquement que, comme attendu, la surestimation est plus importante pour M plus petit. Comme les valeurs sont effectivement fixées par le bord gauche, l'effet de surestimation devient de plus en plus important vers le bord droit, car un nombre plus élevé de troncations est intervenu.

Afin d'obtenir une valeur précise de ξ, nous donnons dans la figure 5.9 la

M	$\rho_1(M)$	$\langle S_1^z \rangle$
50	0.14×10^{-4}	1.1924
74	0.37×10^{-5}	1.1709
95	0.15×10^{-5}	1.1552
126	0.61×10^{-6}	1.1420
150	0.26×10^{-6}	1.1376
180	0.16×10^{-6}	1.1334
∞	0	1.13(1)

TAB. 5.10: *Valeur moyenne $\langle |S_1^z| \rangle$ pour le premier spin d'une chaîne de spin 2 avec un spin 1 effectif libre à un bord de la chaîne pour l'état fondamental avec $S_{total}^z = 1$.*

longueur de corrélation locale $2/(\ln|S_i^z| - \ln|S_{i+2}^z|)$ (moyennée sur deux sites voisins, afin de réduire des petites oscillations du type pair-impair), qui découle directement de (5.8). On s'aperçoit qu'au bord de la chaîne avec un spin 2 (qui se comporte comme un spin 1 effectivement libre), la longueur de corrélation est d'abord plutôt petite, mais sature vers sa valeur de volume (l'épaulement). Pour $M = 180$, la convergence de ξ pour $M \to \infty$ peut être bien établie, et nous trouvons une longueur de corrélation

$$\xi = 49(1) \tag{5.11}$$

pour un système qui a alors une longueur $L \approx 5.5\xi$, ce qui est cohérent avec des effets de taille finie mineurs. En même temps, nous trouvons que $\langle S_1^z \rangle$ converge vers 1.13(1), en accord avec l'hypothèse d'un spin $S = 1$ effectif libre aux bords de la chaîne. Ce résultat n'est pas trop sensible à la valeur de M (tableau 5.10).

Nous aimerions enfin revenir encore une fois à la question de la longueur de corrélation du volume vs. une décroissance qui est due à un état particulier du bord. Afin d'examiner cette question, nous avons varié le couplage entre le premier spin (spin 2 qui se comporte comme un spin 1 effectif libre) et le deuxième spin. Nous trouvons qu'il y a une variation considérable de la valeur moyenne $\langle S_i^z \rangle$ pour les quelques premiers spins, alors que la longueur de corrélation (pour notre précision) reste inchangée, ce qui est en faveur de notre hypothèse que c'est effectivement la longueur de corrélation du volume que nous calculons. Ce comportement peut être compris si l'on considère les deux limites d'un couplage antiferromagnétique très fort et très faible du premier spin à la chaîne : Pour un couplage très fort, le premier et deuxième spin formeront un singlet qui ne peut pas être excité ($\langle S_1^z \rangle = 0$) ; effectivement, la chaîne est raccourcie par 2, et nous obtenons la chaîne sans modification à partir de site 3, qui montrera le comportement déjà examiné. Pour la chaîne raccourcie, on observe une petite augmentation de $|\langle S_i^z \rangle|$, comme la courbe de diminution a été déplacée de deux sites. Pour l'autre cas limite, le premier spin est faiblement couplé à une chaîne, qui a un spin total 1 ; le système spin plus chaîne aura aussi un spin total 1. Calculant l'état fondamental avec $S_{total}^z = 1$ du système, on obtient $\langle S_1^z \rangle = 3/2$, la valeur maximale $\langle S_1^z \rangle$ peut prendre dans le système étudiée. La chaîne sera encore une fois comme une chaîne sans modifications mais raccourcie d'un site, avec le même comportement et la même longueur de corrélation, mais les $|\langle S_i^z \rangle|$ $(i > 1)$ seront réduits : la chaîne raccourcie n'est pas dans un état $S_{total}^z = 1$; on trouve $S_{total}^z = -1/2$. On a affaire à une superposition des trois états fondamentaux dégénérés de la chaîne, qui montrent tous la même longueur de corrélation. Nous avons observé l'augmentation de $\langle S_1^z \rangle$ et la diminution de $\langle S_i^z \rangle$ $(i > 1)$ pour des couplages réduits numériquement.

L'hypothèse d'un spin 1 libre est alors cohérente avec l'observation que la longueur de corrélation n'est pas affectée par des changements pour le premier couplage, mais que $\langle S_1^z \rangle$ peut variér de façon continue. La valeur 1.13(1) est seulement valable pour une chaîne ouverte avec des couplages constants ; le même argument tient évidemment aussi pour la valeur 0.53(1) pour les bords d'une chaîne ouverte de spin 1 donné par White[White 92b] ; dans ce cas-là, la valeur minimale est aussi 0, la valeur maximale 2/3.

5.3 Le paramètre d'ordre string pour $S = 2$

Il se pose naturellement la question s'il y a dans la chaîne de spin 2 un ordre caché analogue à celui de la chaîne de spin 1.

On a proposé comme paramètre d'ordre caché pour $S > 1$ une généralisation de O_π^z, où l'on replace π par π/S[Oshikawa 92] :

$$O_{\pi/S}^z(i,j) = \langle S_i^z \exp[i(\pi/S) \sum_{k=i+1}^{j-1} S_k^z] S_j^z \rangle \tag{5.12}$$

(Notons que nous n'incluons pas le premier spin dans l'expression exponentielle. Entre cette convention et l'autre il y a une simple différence de signe dans les résultats que nous allons considérer.)[1]

[1] Si, dans ce qui suit, nous ne donnons qu'un argument pour O, il s'agit de $i - j|$; si nous ne

Cette proposition est motivée par le fait que ce paramètre d'ordre se comporte comme celui de $S = 1$, si l'on suppose que ce sont les valeurs $S^z = \pm S$ qui dominent, comme dans une chaîne avec ordre de Néel. Or, Hatsugai[Hatsugai 92] a argumenté qu'un tel paramètre d'ordre peut avoir, à cause de sa nature nonlocale, une valeur moyenne non-nulle à longue portée sans être un paramètre d'ordre. Il a conjecturé que le bon paramètre d'ordre serait celui, qui, si l'on remplace π/S par un α quelconque, élimine le mieux les oscillations des corrélations $\langle S_i^z S_j^z$ pour des distances paires et impaires à cause de la nature antiferromagnétique de ces corrélations. En étudiant des chaînes de longueur 10, il a retrouvé O_π^z comme paramètre d'ordre pour $S = 1$ - ce qu'on peut prendre comme une confirmation de la méthode - et $O_{\pi/2}^z$ pour $S = 2$. D'autres calculs très récents indiquent que dans le modèle AKLT, le paramètre $O_{\pi/S}^z$ aurait une valeur maximale parmi O_α[Totsuka 95] avec α réel. En tout cas, la situation reste ouverte : Est-ce que $O_{\pi/S}^z$ a une valeur moyenne finie à grande distance, si oui, laquelle, et est-ce un paramètre d'ordre ?

Nous allons calculer $O_{\pi/2}^z$ pour le système AKLT pour $S = 2$, et le déterminer précisement avec le DMRG pour la chaîne isotrope. Enfin, nous allons discuter le comportement de ce paramètre sous l'introduction d'une anisotropie $D(S_i^z)^2$, afin d'étudier si $O_{\pi/2}^z$ est un paramètre d'ordre et comment fonctionne la transition vers la phase "grand D".

Pour le calcul de $O_{\pi/2}^z$ nous utilisons un théorème de décomposition due à Oshikawa[Oshikawa 92] : Pour le calcul du paramètre d'ordre string pour un modèle AKLT (sur une chaîne) dans la limite $|i-j| \to \infty$, il suffit de le calculer sur une chaîne de longueur 3. Ce problème peut être résolu par l'énumération des possibilités : Considerons toutes les combinaisons $\alpha\beta\gamma\delta$ avec $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \{+1/2, -1/2\}$. D'après l'état fondamental du modèle AKLT (4.21) pour $S = 2$, on peut coupler les paramètres de deux sites comme

$$\alpha_1\beta_1\gamma_1\delta_1 \leftrightarrow (-\gamma_1)(-\delta_1)\gamma_2\delta_2 \tag{5.13}$$

et aussi avec $(-\delta_1)(-\gamma_1)\gamma_2\delta_2$; comme cette deuxième possibilité donne la même contribution à $O_{\pi/2}^z$, nous la confondons avec la première. Pour toutes les combinaisons, on calcule le paramètre d'ordre. Afin d'attribuer des poids aux combinaisons, on utilise que grâce à l'isotropie la probabilité de trouver $S_i^z = c$ est $1/5$ pour tout $c \in \{-2, -1, 0, 1, 2\}$; toutes les combinaisons $\alpha\beta\gamma\delta$ qui donnent un certain S^z contribuent avec la même probabilité. Ceci découle directement de

donnons aucun argument, $|i-j| \to \infty$.

la construction de l'état fondamental.

Le calcul montre que toutes les combinaisons qui impliquent au moins un $S^z = \pm 2$ à un des deux bouts donnent une contribution $-\frac{20}{25}$, et toutes les combinaisons, qui ont $S^z = \pm 1$ aux bouts, contribuent $-\frac{5}{25}$. On trouve alors

$$O^z_{\pi/2}(AKLT) = -1. \tag{5.14}$$

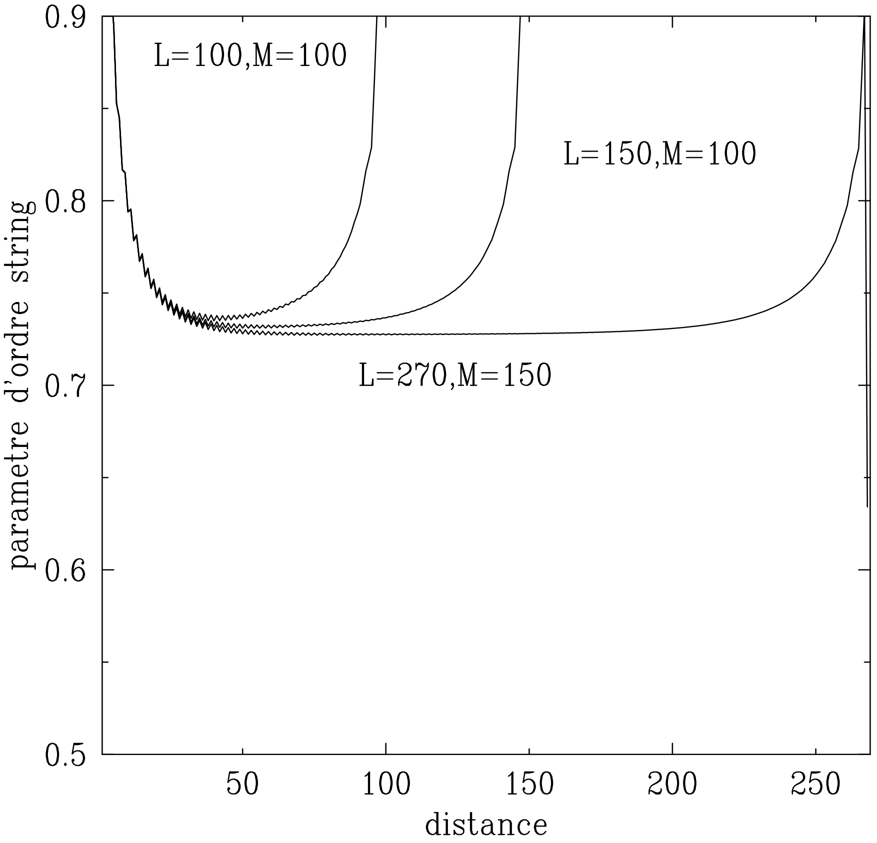

FIG. 5.10: *Valeur de $-O^z_{\pi/2}(i,j)$ en fonction de la distance $|i-j|$ pour i,j centrés autour du centre d'une chaîne antiferromagnétique isotrope de spin 2, pour différentes paires de longueur L et M.*

Pour le calcul numérique du paramètre $O^z_{\pi/2}$ pour la chaîne de Heisenberg isotrope, il faut faire, comme pour le gap et la longueur de corrélation, une extrapolation en M et L. Nous avons calculé plusieurs systèmes, jusqu'à $M = 150$ et $L = 270$. Nous trouvons que dans ce cas, à l'inverse de la situation pour la longueur de corrélation, la convergence en M est assez bonne et permet facilement une estimation plus précise que 1 pour cent de la valeur exacte. Nous supposons que ceci est due au fait que les corrélations à grande distance sont transportées par le “string” dans l'expression, qui est déterminé par des corrélations fortes locales, qui sont alors calculés avec un minimum des erreurs de troncation.

Dans la figure 5.10, nous montrons nos résultats pour $M = 100, L = 100$; $M = 100, L = 150$; et $M = 150, L = 270$. Nous trouvons que l'effet de M fini et de L fini est une surestimation de $O^z_{\pi/2}$. La surestimation à cause de la taille finie est facilement expliquée : les corrélations diminuent pour des distances plus grandes, avant de remonter pour $|i-j| \to L$: ceci est l'effet des conditions de bord. Pour une chaîne ouverte, nous avons fixé les états de bord en ajoutant les spins 1, qui sont ainsi effectivement fortement corrélés. Les spins i et j plus au milieu sont corrélés directement, mais aussi avec les spins de bord, ce qui donne une corrélation effective à travers le bord en forte ressemblence avec un système périodique, où le paramètre d'ordre string est symétrique autour de $L/2$. Pour $|i-j| \to L$, la corrélation à travers les bords va dominer et donner une distance effective très courte, ce qui explique l'augmentation de $O^z_{\pi/2}$. La valeur minimale trouvée pour $O^z_{\pi/2}(L)$ est alors une borne supérieure du résultat dans la limite thermodynamique.

La diminution en M est la conséquence directe de l'observation, que la longueur de corrélation monte avec M : avec un M plus grand, on prend en compte plus de fluctuations, qui poussent le système vers une transition (et augmentent ainsi ξ). Or, le paramètre d'ordre string diminue vers une transition.

Nous trouvons que $O^z_{\pi/2}$ a bien atteint sa valeur pour une distance infinie dans le système de longueur L=270. Il a une valeur moyenne non-nulle dans la limite de grande distance : du comportement de la convergence en M, nous l'estimons à

$$O^z_{\pi/2} = 0.726(2) \tag{5.15}$$

Le paramètre d'ordre est réel, la partie imaginaire disparaît à cause de la symétrie par réflexion autour du centre de la chaîne et la définition de $O^z_{\pi/2}$ symétrique autour du centre de la chaîne. Considérons maintenant le comportement du paramètre d'ordre pour le premier état excité. Nous trouvons (fig. 5.11) que la partie réelle disparaît pour grandes distances, alors que la partie imaginaire augmente pour des distances de plus en plus grandes de zéro à une valeur finie. La phase du paramètre d'ordre $O^z_{\pi/2}$ change donc de $\pi/2$ quand $|i-j|$ va de 0 vers ∞. Si l'on regarde la valeur absolue $|O^z_{\pi/2}|$, on trouve un comportement très proche de

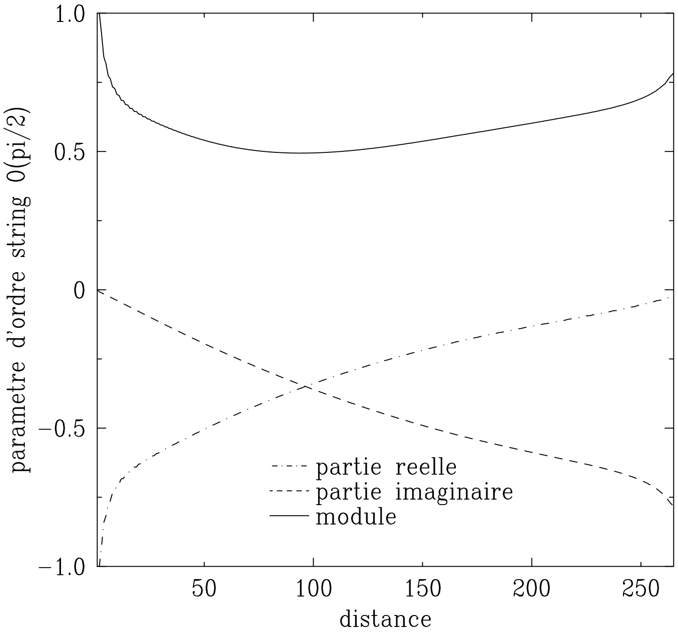

FIG. 5.11: *Partie réelle, imaginaire, et module du parametre d'ordre string* $O^z_{\pi/2}$ *pour la première excitation en fonction de la distance*

celui de l'état fondamental.

5.4 Ordre caché et diagramme de phase $S = 2$

L'ordre caché que l'on suppose décrit par le paramètre d'ordre string dont nous venons d'établir la valeur peut être détruit de plusieurs façons : on peut le détruire en faveur d'un ordre d'Ising antiferromagnétique, en introduisant une anisotropie $J^z > 1$, ou en faveur d'une phase dite de "grand D", où $S^z_i = 0$ dans la limite $D \to \infty$ pour tous i, en introduisant une anisotropie $D(S^z_i)^2$ (voir ci-dessus). Dans ce mémoire, nous étudions seulement la deuxième possibilité. Suivant notre introduction au modèle AKLT, deux questions se posent :

- Pour quel D la transition a-t-elle lieu ?
- Y a-t-il des phases intermédiaires ?

Rappelons que Golinelli et al.[Golinelli 92b] ont trouvé pour $S = 1$ une transition continue avec $D_{crit} = 0.99(2)$ comme valeur critique.

Comme nous ne savons pas exactement à quelles phases nous devons nous attendre, il est essentiel de préparer la chaîne de spin 2 ouverte de telle façon que les excitations basses du système soient bien des excitations du volume (voir chap. 5.1), et les effets artificiels des bords éliminés. Nous attachons deux spins 1 aux bouts de la chaîne, afin d'éliminer la dégénérescence de l'état fondamental dans la phase de Haldane. Comme nous l'avons déjà vu, le couplage du bord J_{end} doit être suffisamment fort pour élever l'énergie d'une excitation des bords au-dessus de celle de la première excitation. Pour grand D, on s'attend à un gap de l'ordre D entre l'état fondamental et la première excitation. J_{end} doit alors être choisi de cet ordre de grandeur, car nous ne savons *a priori* encore rien sur l'état fondamental de la chaîne en fonction de D. Or, nous allons voir que le système essaie de minimiser le gap du spectre en donnant de l'énergie antiferromagnétique afin de compenser le coût d'énergie en fonction de D. Un lien fort au bord contient beaucoup d'énergie antiferromagnétique pour compenser l'énergie du terme $D(S_i^z)^2$, et a donc tendance de localiser l'excitation dans les bords. Il faut donc aussi élever le coût en énergie pour une excitation des bords due à D en augmentant suffisamment D sur les sites de bord. Nous avons choisi de mettre un $D_{end} \approx 20D$ sur les deux premiers et derniers sites ; signalons que cette technique ne marche pas pour la chaîne de spin 1, car un spin 1/2 n'est pas influencé par D.

Afin de vérifier si nos manipulations sont suffisantes pour obtenir les excitations du volume seulement, nous avons calculé $\langle S_i^z \rangle$ pour la première excitation, qui est donnée par $S_{total}^z = \pm 1$, et vérifié que l'excitation n'est pas localisée vers les bords, ce qui serait indiqué par une forte augmentation de $\langle S_i^z \rangle$ vers les bords. Tous les résultats donnés ci-dessous sont des résultats de bulk.

Nous avons calculé le gap, les corrélations spin-spin et les paramètres d'ordre O_π^z et $O_{\pi/2}^z$ ainsi que l'erreur de troncation pour des D entre 0 et 6.

Afin de calculer le gap, nous considérons des chaînes d'une longueur $L = 120$ et gardons $M = 120$ états (quelques-uns de nos résultats proviennent de chaînes plus longues et de calculs plus précis). Nous allons démontrer que ceci nous permet des estimations suffisamment précises du gap.

Pour un modèle isotrope, la première excitation (spin S total 1) est un triplet dégénéré. En présence d'une anisotropie $D \neq 0$, cette dégénérescence est levée : on obtient un doublet $S^z_{total} = \pm 1$ et un singlet $S^z_{total} = 0$. Le doublet est *plus bas* en énergie que le singlet pour $D > 0$ (la situation est renversée pour $D < 0$)[Golinelli 92a]. Ce résultat tient seulement pour des impulsions autour de $q = \pi$, où se situe la première excitation. Pour $D > 0$, on peut alors calculer le gap en prenant la différence en énergie entre les états les plus bas pour $S^z_{total} = 0$ et $S^z_{total} = 1$; pour $D < 0$, il faut prendre la différence entre les énergies des deux premiers états avec $S^z_{total} = 0$.

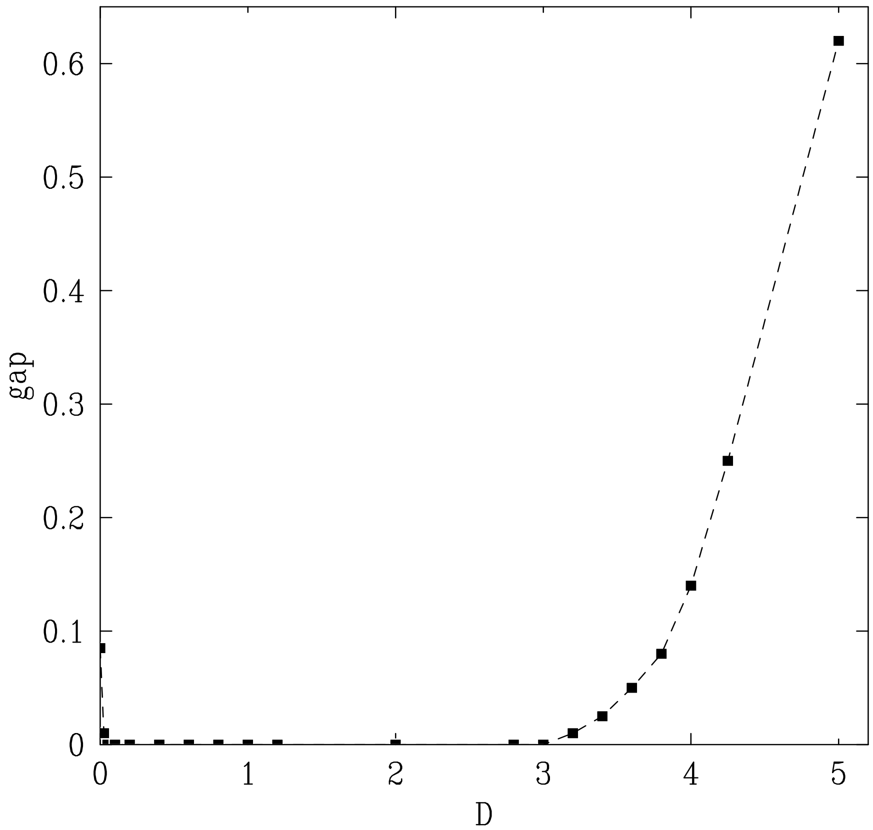

FIG. 5.12: *Valeurs du gap pour une chaîne antiferromagnétique de spin 2 en fonction d'une anisotropie $D(S^z_i)^2$, pour $D > 0$.*

Le comportement du gap en fonction de D est montré dans la figure 5.12. Pour $D = 0.025$, la longueur de corrélation est très grande ; nous ne pouvons alors pas donner une extrapolation sérieuse du gap ; nous attendons en principe le même

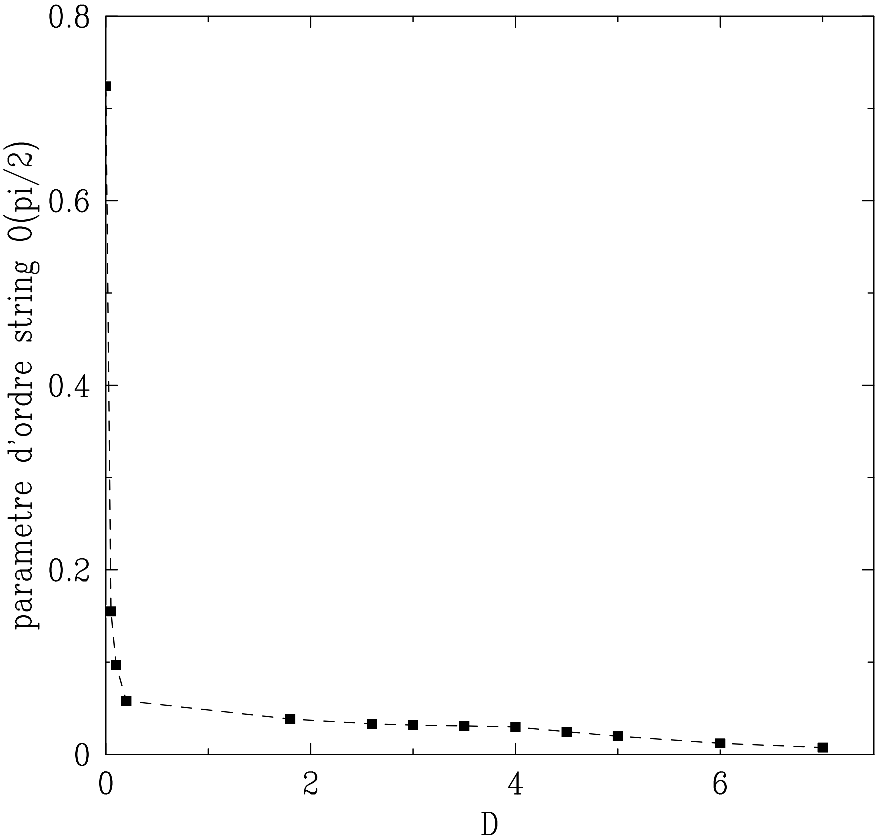

FIG. 5.13: *Valeurs de $|O^z_{\pi/2}(\infty)|$ pour une chaîne antiferromagnétique de spin 2 en fonction d'une anisotropie $D(S^z_i)^2$, pour $D > 0$.*

comportement du gap que pour $D = 0$. Une extrapolation en L^{-1} nous donne donc une borne inférieure du gap, que nous trouvons clairement au-dessus de 0 à 0.01 ; à cause de la pente relativement petite de la courbe du gap, nous avons pris cette borne comme estimation. Pour $0.05 < D < 3.0$, nous trouvons dans tous les cas des courbes en L^{-1}, qui ne montrent même pas une déviation systématique comme dans la figure 5.5, bien que l'erreur de troncation dans notre calcul était assez grande. Ceci est dû au fait que nous trouvons les erreurs de troncation associées aux deux énergies presque identiques et il y a probablement une compensation forte des erreurs systématiques dans les énergies. Une extrapolation vers $L \to \infty$ en L^{-1} nous semble alors permise, qui donne des gaps nuls dans tout ce régime. En tout cas, dans tout ce régime, nous obtenons des bornes supérieures de l'ordre 0.02 pour les gaps, en prenant le gap obtenu pour $L = 120$ comme gap de la limite thermodynamique, ce qui mène à des résultats amplement surestimés. Pour $D > 3.0$, un gap se développe, les longueurs de corrélation deviennent de plus en plus courtes et l'erreur de troncation diminue de plusieurs ordres de grandeur. Les estimations du gap deviennent alors très satisfaisantes.

Nous observons donc qu'il y a un gap pour des très petits D : il disparaît pour $0.025 < D_{c_1} < 0.05$. Nous trouvons ensuite une phase assez large *critique*, qui se termine pour $D_{c_2} \approx 3.0(1)$. Pour $D > D_{c_2}$, le système montre un gap de plus en plus grand en fonction de D, avec une croissance très lente pour D juste au-dessus de D_{c_2}. Ces résultats sont tout à fait surprenants ; ils semblent indiquer qu'il y a toute une phase critique entre la phase de Haldane et la phase de grand D, alors qu'il y a seulement un point critique entre ces deux phases pour $S = 1$, comme le prédit la bosonisation[Schulz 86a]. Remarquons que Khveshchenko et Chubukov ont conjecturé, en regardant la limite classique, qu'une telle phase devrait exister pour $S \gg 1$[Khveshchenko 87].

Nous n'avons aucune indication d'une dégénérescence de l'état fondamental dans la phase critique, qui dans ce cas-là, pourrait posséder en réalité un spectre avec gap malgré nos résultats. Les indications indirectes montrent plutôt aussi que la phase intermédiaire est critique : l'erreur de troncation diminue lentement avec D, mais reste comparativement grande ; sous la présence du gap, elle diminue rapidement. Or, une simple dégénérescence ne mène pas, d'après nos autres calculs, à une augmentation sensible de l'erreur de troncation : le DMRG choisit assez vite un parmi ces états, et ignore les autres. Un argument plus physique et plus fort est donné par la diminution très lente des corrélations spin-spin sur la chaîne, ce qui indique aussi la présence d'une phase critique. Nous trouvons systématiquement des longueurs de corrélation de l'ordre de plusieurs centaines, beaucoup plus grandes que la taille du système. Etant donnée la sous-estimation à cause de M et L finis, la vraie longueur de corrélation est probablement infinie.

Considérons maintenant les résultats pour les paramètres d'ordre O^z_π et $O^z_{\pi/2}$. Nous trouvons que, pour chaque D, O^z_π a la valeur moyenne zéro à grande distance (numériquement, nous trouvons, pour des distances ≈ 150, des valeurs de l'ordre 10^{-4} à 10^{-5}).

La situation est complètement différent pour $O^z_{\pi/2}$ (figure 5.13). Nous trouvons que *pour chaque* D, il atteint une valeur non-nulle dans la limite thermodynamique, avec décroissance monotone vers 0 pour $D \to \infty$. La pente est très grande pour des petits D : pour $D = 0.2$, $O^z_{\pi/2}$ est déjà à moins de dix pour cent de la valeur pour $D = 0$. L'analyse de $O^z_{\pi/2}$ est différente selon les phases : elle est très facile pour la phase de grand D, où la petite erreur de troncation rend le résultat obtenu presque exact et où les corrélations à très courte portée assurent une convergence très rapide vers la limite thermodynamique. Les valeurs ainsi obtenues sont précises à au moins 10^{-4} près, et il n'y a aucun doute que $O^z_{\pi/2}$ disparaît dans la phase de grand D seulement pour $D = \infty$. Dans la phase critique, l'analyse est rendue beaucoup plus difficile à cause des erreurs de troncation relativement importantes (environ 10^{-8}), mais surtout à cause des corrélations en loi de puissance : la limite thermodynamique n'est pas encore atteinte pour les longueurs que nous avons considérées. Nous avons trouvé que nos résultats peuvent, dans ce régime, être extrapolés en L^{-1} avec des déviations vers des valeurs plus grandes pour $L \to \infty$. Il nous est alors impossible de donner une extrapolation précise ; nous estimons que les résultats que nous donnons pour la phase critique ont une précision meilleure que dix pour cent et sont surement non-nuls. Les effets de M fini sont relativement petits pour les M considérés. Nous concluons que $O^z_{\pi/2}$ *n'est pas un vrai paramètre d'ordre* dans le sens où il n'est pas nul dans la limite thermodynamique pour la phase de grand D, parce que l'ordre qu'il décrit ne disparaît que pour $D \to \infty$ (il n'est pas non plus nul dans une phase antiferromagnétiquement ordonnée dans sa définition originale, mais il le devient, si l'on soustrait le paramètre d'ordre antiferromagnétique).

Essayons maintenant de comprendre ce qui se passe du point de vue physique : nos résultats sont en contradiction avec ce qu'on pensait jusqu'à maintenant. Analysons les deux anisotropies "critiques" D_{c_1} et D_{c_2}, pour la première et la deuxième transition.

D_{c_1} est l'anisotropie pour laquelle la phase de Haldane disparaît, pour $S = 2$, $0.025 < D_{c_1} < 0.05$. Sa valeur est essentiellement donnée par le gap de Haldane Δ_S pour $D = 0$: Les corrélations dans la phase de Haldane sont antiferromagnétiques ; l'énergie du gap (de nature antiferromagnétique) est contrebalancée par l'énergie de l'anisotropie D. Pour une excitation de $S^z_{total} = 1$, elle sera de l'ordre $D(S^2-(S-1)^2)/2 = D(2S-1)/2$, si nous approximons l'état fondamental par un ordre de Néel à cause du voisinage de la transition vers l'antiferromagnetisme. Nous divisons par 2 (la réciproque de la moyenne de $\cos^2$), pour prendre en compte l'isotropie de la chaîne de Heisenberg. Nous estimons alors

$$D_{c_1} \approx 2\Delta_S/(2S-1) \tag{5.16}$$

Comme $\Delta_S \to 0$ pour $S \to \infty$, D_{c_1} diminue de façon monotone en fonction de S et s'annulle dans la limite classique.

Afin d'estimer D_{c_2}, placons-nous dans la limite $D \to \infty$, la phase de grand D. Dans cette limite, nous décomposons l'Hamiltonien comme $H = H_0 + V$, avec $(J = 1)$

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_i D(S_i^z)^2 \\ V &= \sum_i \frac{1}{2}(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + S_i^z S_{i+1}^z \end{aligned}$$

Dans la limite $D \to \infty$, V est une petite perturbation et l'état fondamental de H_0 est donné par $S_i^z = 0$ pour tous i et énergie 0. La première excitation de H_0 est donnée en mettant $S_i^z = \pm 1$ sur un seul site ; le gap est D. Un calcul de perturbation au premier ordre ne donne aucun changement pour l'état fondamental, et pour la première excitation, avec (la notation y_i signifie que l'aimantation S_i^z sur site i est égal à y)

$$|\psi_1(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_n e^{ikn} |0_1, 0_2, 0_3, \ldots, 1_n, \ldots, 0_{L-1}, 0_L\rangle \tag{5.17}$$

comme énergie de la première excitation

$$D + \langle \psi_1(k)|V|\psi_1(k)\rangle = D + S(S+1)\cos k. \tag{5.18}$$

Le gap est alors $D - S(S+1)$. Déterminons D_{c_2} approximativement par la condition que le gap disparaît (nous appliquons donc le résultat du calcul perturbatif en dehors de son régime de validité) :

$$D_{c_2} = S(S+1) \tag{5.19}$$

Donc $D_{c_2} = 2$ et $D_{c_2} = 6$ pour $S = 1$ et $S = 2$, à comparer aux valeurs numériques 0.99(2) et 3.0(1). Nous surestimons D_{c_2}, mais semblons saisir l'essentiel (on pourrait faire un calcul perturbatif plus avancé comme [Papanicolaou 89] ; mais nous pensons avoir obtenu le résultat essentiel : d'autres ordres de perturbation apportent de nouveaux facteurs d'ordre $S(S+1)$ à chaque ordre, mais aussi un dénominateur D. L'ordre de grandeur de D_{c_2} reste alors le même.). Pour $S \to \infty$, $D_{c_2} \to \infty$.

Pour des D intermédiaires, on trouve une phase critique, car l'énergie croissante due à D est contrebalancée par une réduction de $|S_i^z|$ sur chaque site, ce qui réduit l'énergie antiferromagnétique du système, jusqu'à ce que cette compensation ne soit plus possible. Si nous regardons la nature des corrélations spin-spin, nous trouvons (figure 5.14) que les corrélations $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ sont à très courte

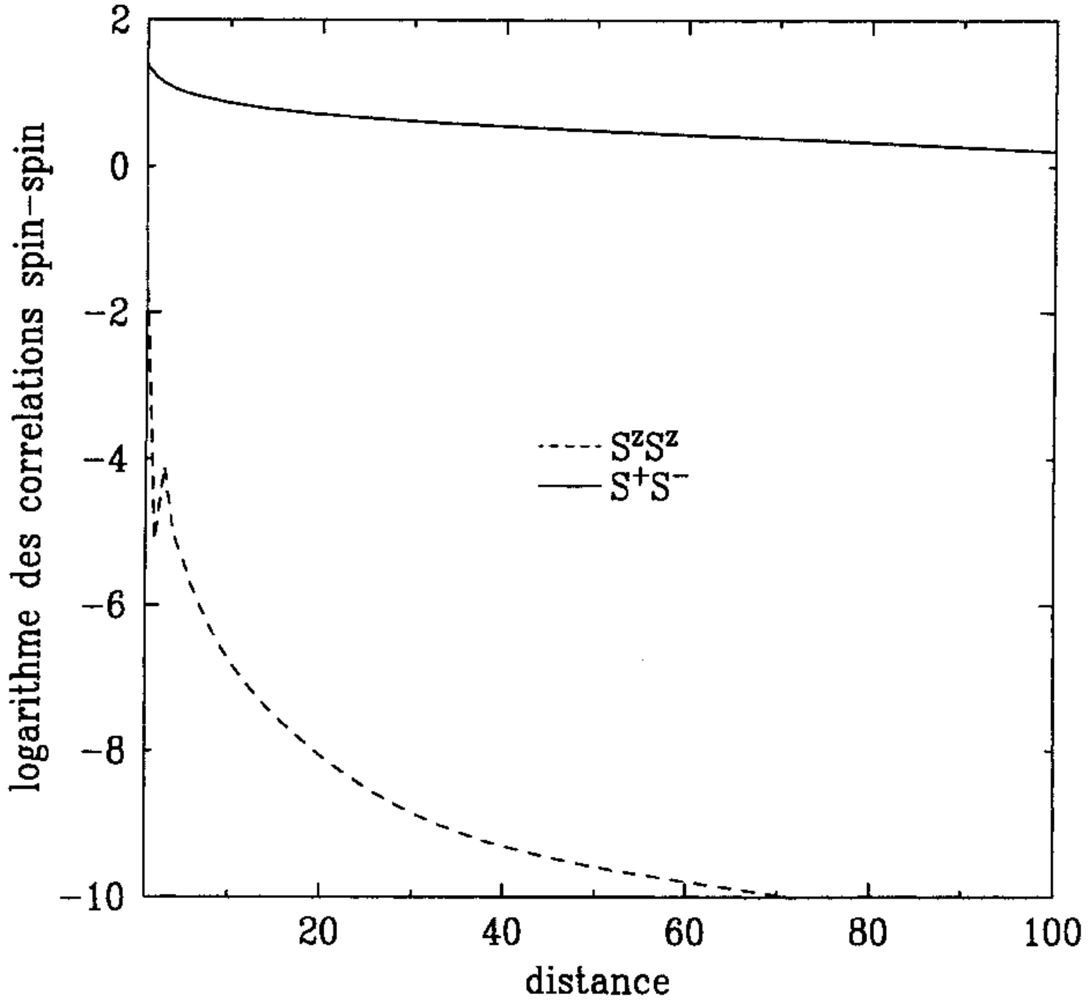

FIG. 5.14: *Logarithmes des corrélations* $|\langle S_i^z S_j^z \rangle|$ *(ligne interrompue) et* $|\langle S_i^+ S_j^- \rangle|$ *(ligne solide) en fonction de la distance* $|i-j|$ *pour une chaîne antiferromagnétique de spin 2 avec* $D = 1.8$.

portée, alors que les corrélations $\langle S_i^+ S_j^- \rangle$ sont à très grande portée ; les résultats numériques indiquent, comme déjà mentionné, une longueur de corrélation infinie associée. Ces corrélations sont tout à fait typiques pour la phase XY critique que l'on trouve déjà pour $S = 1$ (figure 4.2). On est alors portée à la conclusion que la phase XY s'étend au delà de la ligne $J^z = 0$ pour $S = 2$.

La nature des transitions de la phase de Haldane vers la phase intermédiaire et de la phase intermédiaire est, si notre argumentation ci-dessus est juste et la phase XY a simplement été élargie, identique à celle que l'on trouve pour $S = 1$: une transition de Kosterlitz-Thouless de la phase de Haldane vers la phase intermédiaire et encore une fois une transition de Kosterlitz-Thouless vers la phase de grand D. Le DMRG ne permet pas d'obtenir des résultats convaincants

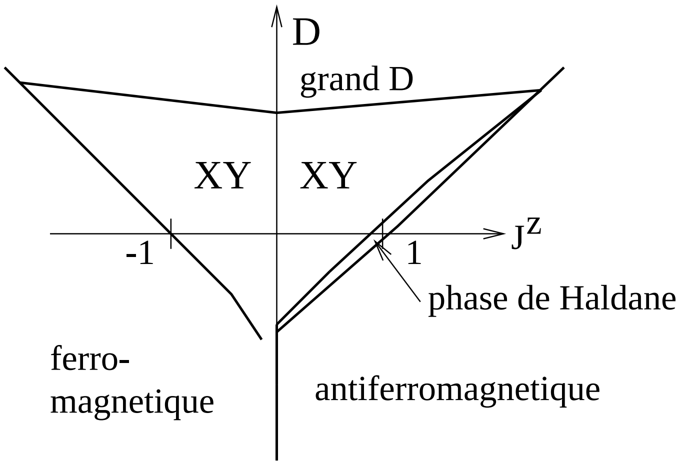

FIG. 5.15: *Diagramme de phase schématique pour $S = 2$ en fonction des anisotropies J^z et D. Le comportement a été déterminé approximativement avec le DMRG.*

pour déterminer la nature de la transition directement.

Remarquons que notre théorie donne immédiatement la limite classique : $D_{c_1} = 0$ et $D_{c_2} = \infty$; le système est toujours critique. L'Hamiltonien classique est donné par

$$H_{class} = \sum_i \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + D \sum (S_i^z)^2 \tag{5.20}$$

Pour $D > 0$, le système montre un spectre sans gap : les spins se retrouvent dans le plan XY ($S_i^z = 0$). La limite classique est moins évidente dans la théorie des transitions successives et la théorie d'une transition entre les deux phases avec gap. Ajoutons que Khveshchenko et Chubukov[Khveshchenko 87] ont conjecturé, en partant de la limite $S \to \infty$, que pour $S \gg 1$ il devrait y avoir une phase critique entre la phase de Haldane et la phase de grand D, utilisant des arguments proches de notres, mais sans pouvoir quantifier leur conjecture. Ils proposent que pour $S \gg 1$ la phase XY présent pour $S = 1$ pour $J^z < 0$ envahit l'espace de phase pour $J^z > 0$. Il faut souligner que quelque chose de plus profond se passe entre $S = 1$ et $S = 2$: dans l'un cas, l'ordre caché (pas encore connu au temps de

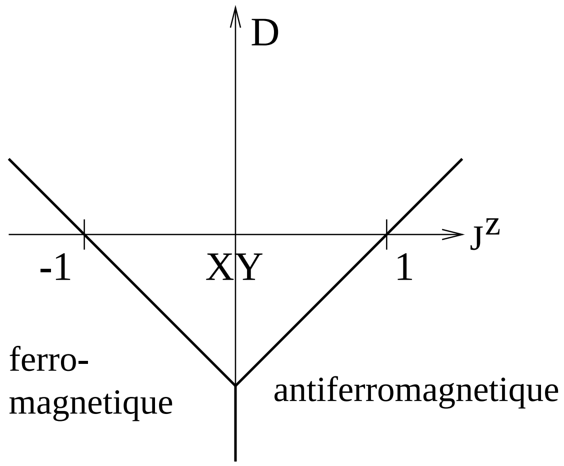

FIG. 5.16: *Diagramme de phase exact pour $S = \infty$ (limite classique) en fonction des anisotropies J^z et D.*

ce travail) disparaît complètement dans la phase de grand D, dans l'autre, elle disparaît graduellement et est alors pas directement lié à la transition de phase. Ceci est un effet qui va au-delà d'un simple deplacement de lignes de transition, et lequel nous ne comprenons pas encore.

Essayons maintenant de mettre ensemble nos résultats pour donner un diagramme de phase quantitatif (figure 5.15) pour $S = 2$ en présence d'une anisotropie J^z et d'une anisotropie $D(S_i^z)^2$. Qu'est-ce qui change par rapport au cas $S = 1$ (figure 4.2) ? En dehors des résultats déjà mentionnés, nous avons aussi établi que la phase XY est aussi présent pour $D < 0$ et $J^z > 0$. La phase de Haldane est limitée à une petite bande entre la phase XY et la phase antiferromagnétique ; nos résultats en provenance du DMRG indiquent fortement qu'elle se termine pour $J^z = 0$, avec une épaisseur toujours inférieure à 0.05, qui devient de plus en plus petite vers $J^z = 0$. Nous ne savons alors pas, si pour $S \to \infty$ elle se réserre autour de $J^z = 1$, où si elle reste prèsent jusqu'à $J^z = 0$, mais avec une épaisseur de plus en plus petite. D'après nos résultats, la deuxième alternative semble plus probable.

Dans la région $J^z < 0$, qualitativement rien ne change.

Si l'on calcule la limite classique $S = \infty$, on trouve le diagramme de phase donné dans la figure 5.16. Il n'y a que trois phases, les lignes de transition sont données par $1 + D = J^z$ pour $J^z > 0$ et $1 + D = -J^z$ pour $J^z < 0$ ainsi que par $J^z = 0$ pour $D < -1$. La différence entre ce diagramme de phase et celui pour $S = 2$ est alors essentiellement que la phase de grand D disparaît vers $D \to \infty$, et que la bande de la phase de Haldane disparaît complètement. Le cas $S = 2$ est donc déjà très proche de la limite classique, alors que le diagramme de phase pour $S = 1$ est fondamentalement différent.

Remarquons que nous avons négligé une transition entre deux types de phases XY, qui pour $S = 1$ se situe pour $D < 0$ et $J^z < 0$ en prolongation de la ligne de transition entre la phase de Haldane et la phase antiferromagnétique. La différence entre les deux phases (les corrélations S^+S-, qui comprennent une partie alternante et une partie non-alternante suivent une loi exponentielle dans la phase avec $D \ll 0$, mais une loi de puissance dans la partie non-alternante dans l'autre phase ; les corrélations S^zS^z suivent une loi de puissance dans la première phase, mais sont exponentielles dans la partie alternante dans l'autre phase[Schulz 86a]) est très difficile à mettre à jour avec le DMRG et n'a pas été étudiée. Si le comportement pour $S = 1$ était générique en ce qui concerne cette transition, la phase XY présent pour $D \ll 0$ serait de plus en plus petit et disparaîtrait complètement pour $S \to \infty$.

Rien dans nos arguments introduit une différence entre différents $S \geq 2$ entiers. Conjecturons donc, pour conclure, *que pour $S \geq 2$ entier la phase de Haldane et la phase de grand D sont séparées par une phase critique, dont la limite inférieure D_{c_1} (pour $J^z = 1$) tend vers $D = 0$ pour $S \to \infty$ et est essentiellement déterminée par le gap de Haldane, alors que la limite supérieure D_{c_2} tend vers $D = \infty$ pour $S \to \infty$ et est essentiellement déterminée par S^2. Les paramètres d'ordre non-locaux $O^z_{\pi/S}$ ne sont pas des vrais paramètres d'ordre, car eux et l'ordre caché qu'ils décrivent ne disparaissent dans la phase de grand D que pour $D \to \infty$.* Le diagramme de phase donné pour $S = 2$ serait alors générique pour $S \geq 2$ entier.

Le cas $S = 1$ apparaît alors comme un *cas pathologique :* $D_{c_1} = D_{c_2}$. En plus, l'ordre caché disparaît dans la phase de grand D et le paramètre d'ordre string est nul dans cette phase et est alors un vrai paramètre d'ordre. Nous n'en connaissons pas la raison ; il se pourrait que c'est l'existence de la symétrie $Z_2 \times Z_2$, qui donne le comportement spécial du cas $S = 1$. Du point de vue de diagramme de phase, la différence se manifeste par le fait que pour $S > 1$ les phases de Haldane et de grand D ne sont pas voisins, alors qu'elles le sont pour $S = 1$.

Finissons par remarquer que le diagramme de phase pour des chaînes de spins demi-entiers se distingue de celui de $S \geq 2$ entier par l'absence de la bande de Haldane, et aussi par l'absence de la phase de grand D : la phase critique continue jusqu'à $D = \infty$. Ceci se comprend facilement dans la limite de grand D : tous les S^z sauf $S^z = \pm 1/2$ sont supprimés, on retrouve la physique d'une chaîne de spin 1/2 critique.

5.5 Discussion

Nous aimerions revenir en quelque mots sur une des questions posées au début de la discussion de la chaîne de spin 2 : est-ce qu'elle est bien décrite par le modèle AKLT ? La réponse est bien *oui* : Nous avons réunis tous les critères : existence d'un gap, corrélations antiferromagnétiques, existence d'un ordre caché décrit par un paramètre d'ordre commun, et l'existence de spins 1 effectif aux bords d'une chaîne ouverte.

Les valeurs numériques ne sont pas tout à fait celles prédites par les lois de Haldane. Insérant les résultats de $S = 1$ dans ces lois, le gap pour $S = 2$ est trop grand et la longueur de corrélation est trop petite. Comme les résultats pour $S = 2$ sont plus proche du cas classique, où ces lois deviennent exacts, on pourrait plutôt dire que la chaîne de $S = 1$ est moins quantique que prévu.

Nous avons vu en plus que le paramètre d'ordre proposé pour $S = 2$ n'est pas un vrai paramètre d'ordre : l'ordre qu'il décrit ne disparaît pas à la transition. Nous avons trouvé une phase critique pour une anisotropie positive intermédiaire D, et conjecturé le comportement pour $S \to \infty$. Quelles sont les conséquences de cette phase critique pour des mesures expérimentales du gap pour $S = 2$? Pour $S = 1$, il y a plusieurs systèmes physiques, où le gap de Haldane est réalisé, comme le $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2ClO_4$ (NENP)[Renard 87]. Pour le spin 2, on n'en a pas encore trouvé. Nos résultats montrent que la phase critique commence déjà pour $D < 0.05$; si l'on cherche la transition vers l'antiferromagnétisme pour $D < 0$, on trouve que cette transition a lieu pour $D \approx -0.01$. Or, des anisotropies du type D sont assez souvent présentes dans des systèmes réels. Il nous semble donc extrêmement difficile de trouver un système expérimental qui se situe dans la phase de Haldane pour un couplage spin-spin afin de mesurer le gap. Mais il semble plus facile de trouver un système, avec la phase critique que nous venons de prédire.

Chapitre 6

La chaîne de spin 1 quantique bilinéaire-biquadratique

Nous avons vu que le modèle AKLT pour $S = 1$ peut être écrit comme la somme d'une interaction spin-spin bilinéaire et d'une interaction spin-spin biquadratique. Il représente alors un cas particulier de la chaîne de spin 1 quantique isotrope bilinéaire-biquadratique

$$H(\gamma) = \sum_i \cos\gamma \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \sin\gamma (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1})^2 \tag{6.1}$$

avec $\gamma \in [0, 2\pi)$. Le comportement de ce modèle en fonction de γ a été le sujet de travaux multiples[Sutherland 75, Babudjian 82, Affleck 86b, Sørensen 90, Fath 91, Hatsugai 91, Nomura 91, Bishop 93, Fath 93a, Xian 93, Xiang 93, Reed 94, Bursill 95, Fath 95]. Dans ces travaux, un certain consensus a émergé sur le diagramme de phase. Dans ce chapitre, nous allons démontrer que ce consensus est incomplet et incorrect dans une région importante. Les nouveaux résultats peuvent être compris avec des concepts de la physique statistique classique, la ligne de désordre et la ligne de Lifshitz. Enfin, le point AKLT se révélera comme un point très particulier, un point de désordre, dans ce diagramme de phase, ce qui permet de comprendre quelques-unes de ses propriétés par rapport au modèle de Heisenberg ($\gamma = 0$), surtout la réduction dimensionnelle du comportement des corrélations.

Nous allons d'abord présenter une discussion générale du diagramme de phase ; ensuite nous allons rappeler les détails pertinents des concepts de ligne de désordre et de Lifshitz, peu familiers dans le monde quantique (voir, pour une application, [Rujan 82]). Enfin nous présentons ceux de nos résultats qui sont en désaccord avec l'opinion courante et les discutons en utilisant les concepts "classiques" introduits.

6.1 Diagramme de phase de la chaîne $S = 1$ bilinéaire-biquadratique

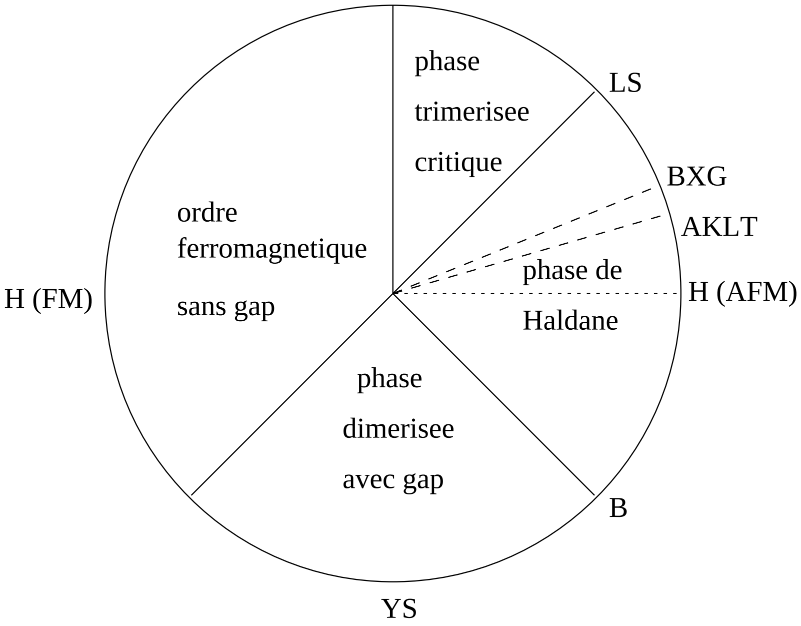

FIG. 6.1: *Diagramme de phase de la chaîne de spin 1 quantique bilinéaire-biquadratique en fonction de γ (dans le sens trigonométrique à partir de la ligne pointillée; lignes solides : points de transition; lignes interrompues : autres points importants; voir éq. (4.1)). H(AFM) : antiferromagnétique isotrope; AKLT : modèle de Affleck, Kennedy, Lieb et Tasaki; BXG : point de passage de comportement introduit par Bursill, Xiang et Gehring; LS : point de Lai-Sutherland; H(FM) : ferromagnète isotrope.*

Représentons le diagramme de phase comme dans figure 6.1 en fonction de γ. Pour $\gamma = 0$ et $\gamma = \pi$ on retrouve le modèle de Heisenberg isotrope antiferromagnétique et ferromagnétique. Il y a quelques points dans ce diagramme de phase où la physique est connue :

- $\gamma = 0$: Modèle de Heisenberg isotrope antiferromagnétique : état fondamental unique désordonné avec corrélations exponentielles antiferromagnétiques (obéissant à une loi $\exp(-r/\xi)/\sqrt{r}$) et avec un gap dans le spectre.

- $\gamma = 0.10242\pi$ ($\tan\gamma = 1/3$) : Modèle AKLT, état fondamental VBS (valence bond solid) exact ; désordonné avec corrélations antiferromagnétiques purement exponentielles et un gap dans le spectre ($\Delta = 0.664$; $\xi = (\ln 3)^{-1} \approx 0.91$)[Affleck 87a, Affleck 88, Arovas 88b]. Etat fondamental unique.
- $\gamma = \pi/4$: soluble par l'ansatz de Bethe[Uimin 70, Sutherland 75]. Le modèle est critique avec des corrélations en loi de puissance, sans gap : le spectre a des modes zéros à $q = 0, \pm 2\pi/3$. L'état fondamental est unique.
- $\gamma = \pi$: Modèle de Heisenberg isotrope ferromagnétique : ordre ferromagnétique ; excitations sans gap.
- $\gamma = -3\pi/4$: point d'une transition de phase (probablement) de première ordre entre une phase ferromagnétique et une phase dimérisée[Fath 95], probablement.
- $\gamma = -\pi/2$: état dimérisé : Le paramètre d'ordre c_2 est défini par

$$\langle (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1})(\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1}) \rangle \to c_1 + (-1)^{i-j} c_2 \tag{6.2}$$

  pour $|i - j| \to \infty$. L'état fondamental est deux fois dégénéré et le spectre a un gap $\Delta = 0.17$[Barber 89, Sørensen 90]. La longueur de corrélation est donnée par $\xi = 42.2$[Sørensen 90].
- $\gamma = -\pi/4$: Le modèle est soluble par l'ansatz de Bethe nesté[Takhtajan 82, Babudjian 82]. On trouve un système critique désordonné avec un état fondamental unique. Les corrélations montrent des modes d'énergie nulle à $q = 0, \pi$.

Avec ces points, on construit le diagramme de phase suivant : Commençant par $\gamma = \pi/2$, on trouve (probablement) une transition entre un état trimérisé et un état ferromagnétique ordonné sans gap. La phase ferromagnétique se termine pour $\gamma_0 = -3\pi/4$[Fath 95]. Une transition de phase (probablement) de première ordre mène à un état dimérisé. Une prédiction d'une phase non-dimérisée nématique entre les phases ferromagnétique et dimérisée par Chubukov[Chubukov 91] semble réfutée par [Fath 95]. L'état fondamental est un singlet, deux fois dégénéré (à cause d'une brisure d'une symétrie Z_2), et il y a un gap vers les excitations. Le paramètre d'ordre est donné par c_2 dans[Affleck 89]

$$\langle (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1})(\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1}) \rangle \to c_1 + (-1)^{i-j} c_2 \tag{6.3}$$

pour $|i-j| \to \infty$. Une transition de phase continue pour $\gamma = -\pi/4$ mène dans une phase de Haldane, avec un état fondamental unique, désordonné, des corrélations exponentielles et un gap dans le spectre.

Nous allons étudier $\gamma_{AKLT} < \gamma < \pi/4$. la région de la transition entre la phase de Haldane et la phase trimérisée : d'abord, elle doit se trouver entre $\gamma = \arctan(1/3)$ (point AKLT : corrélations antiferromagnétiques !) et $\gamma = 0.25\pi$[Fath 93a, Xiang 93], le point exactement soluble, où une période trois dans l'énergie fondamentale pour des chaînes périodiques est très évidente[Xiang 93]. Fáth et Sólyom trouvent[Fath 93a] numériquement qu'il y a une transition du type Kosterlitz-Thouless vers une phase trimérisée sans gap à $\gamma = 0.25\pi$. Or, Xiang et Gehring[Xiang 93] ont démontré qu'il y a des modes incommensurables $q = \pm 2\pi/3$ au-dessous de $\gamma = 0.25\pi$. Dans un travail très récent, Bursill, Xiang et Gehring, en utilisant le DMRG, localisent le point où les corrélations antiferromagnétiques sont remplacées par des corrélations incommensurables à $\tan\tilde{\gamma} = 0.43806(4)$[Bursill 95], ce qui correspond à $\tilde{\gamma} = 0.1314\pi$. Pour trouver ce résultat, ils regardent la transformée de Fourier des corrélations spin-spin et cherchent le γ, où le pic de la transformée commence à se deplacer de $q = \pi$ vers $q = \pm 2\pi/3$. Leur conclusion, prenant en compte les résultats de Fáth et Sólyom, est qu'il y a trois régions pour $0 \leq \gamma \leq \pi/4$:

- $0 < \gamma < \tilde{\gamma}$: corrélations antiferromagnétiques à courte portée
- $\tilde{\gamma} < \gamma < \gamma_c$ (avec $\gamma_c = 0.25\pi$ d'après toute évidence) : ordre spirale de courte portée ; le pic de la transformée de Fourier se déplace de $q = \pi$ vers $q = 2\pi/3$; le spectre a toujours un gap.

Avant de discuter nos résultats, nous allons introduire les concepts nécessaires de la physique statistique classique[Stephenson 69].

6.2 Lignes de désordre et de Lifshitz

Considérons un diagramme de phase comme dans la figure 6.2. P est un paramètre qui contrôle les transitions de phase (par exemple, une anisotropie, la pression, etc.). Le système a deux phases ordonnées à basse température, l'une avec des corrélations commensurables (par exemple, ferromagnétiques ou antiferromagnétiques), l'autre avec des corrélations incommensurables. Ces deux phases sont reliées à la phase désordonnée à haute température (paramagnétique) par deux transitions *continues*. Il est intuitivement clair que les corrélations dans la phase désordonnée seront à courte portée et de nature variable : "près" de la phase commensurable, elles seront de nature commensurable, "près" de la phase

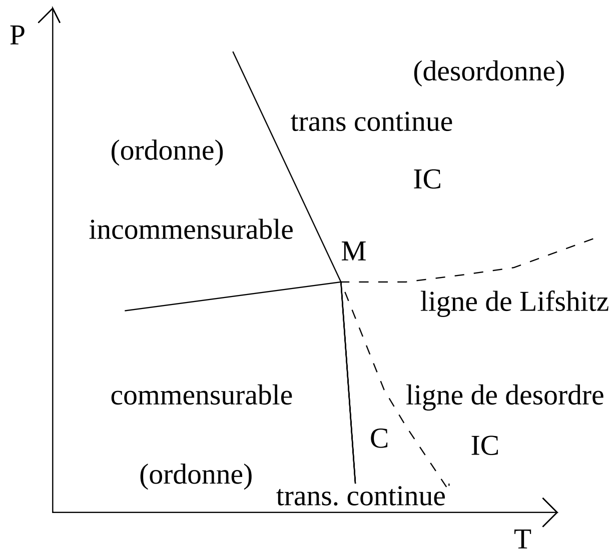

FIG. 6.2: *Diagramme de phase schématique : une phase désordonnée de haute température est liée par deux transitions continues à deux phases ordonnées de basse température aux corrélations incompatibles. P est un paramètre qui contrôle le diagramme de phase. Les lignes interrompues représentent les lignes de désordre et de Lifshitz, où le comportement des corrélations change dans l'espace réel et dans l'espace de Fourier.*

incommensurable, elles seront incommensurables. On peut deviner qu'il y a une ligne dans ce diagramme de phase où les corrélations changent de comportement ; ce changement va être lié à des corrélations de courte portée, alors à un état avec un minimum d'ordre à courte portée. Cette ligne s'appelle donc *ligne de désordre*. Si l'on regarde les corrélations dans l'espace de Fourier, on s'aperçoit que le pic de la transformée de Fourier reste encore à l'endroit du pic pour les corrélations commensurables, même si les corrélations sont déjà devenues incommensurables dans l'espace réel, à cause de la longueur de corrélation finie : la largeur du pic est liée à ξ^{-1}. C'est seulement plus proche de la phase incommensurable que le pic commence à se deplacer. La ligne alors définie s'appelle *ligne de Lifshitz*. Dans des expériences, où on mesure normalement le facteur de structure dans l'espace réciproque, c'est cette ligne que l'on va observer. Il est aussi clair que les deux lignes doivent se terminer dans le point multicritique où les trois phases se rencontrent. Ce point multicritique est nécessaire pour leur existence.

On peut maintenant démontrer qu'il y a deux espèces de lignes de désordre. Afin d'éviter des généralisations peu utiles, je donne les résultats de deux exemples classiques traités en utilisant la méthode RPA[Garel 86]. L'un est une chaîne ANNNI (*anisotropic next-nearest neighbour Ising*) avec une interaction J_1 ferromagnétique entre plus proches voisins et J_2 antiferromagnétique entre spins à distance $2a$ (a la constante du réseau). L'autre est une chaîne décorée avec une interaction J_1 ferromagnétique entre plus proches voisins et une interaction J_2 antiferromagnétique entre sites 1 et 3, 3 et 5, etc.

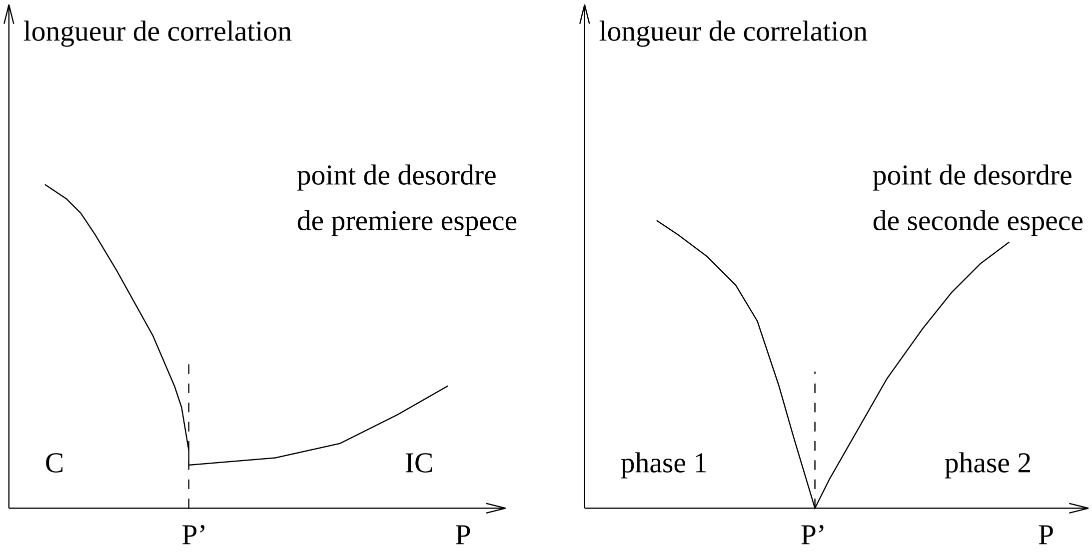

FIG. 6.3: *Longueur de corrélation pour un point de désordre de première et de seconde espece (schématique). Pour le point de désordre de première espece, la phase commensurable se trouve à gauche.*

Le premier exemple est caractérisé par un *point de désordre de première espèce* : On peut démontrer qu'il y a trois régimes : Si l'on définit la température de désordre comme

$$T_D^{(1)} = \frac{J_1^2}{4|J_2|} + 2|J_2|, \tag{6.4}$$

on trouve pour x grand,

1. $T < T_D^{(1)}$: $\langle S(0)S(x)\rangle \simeq e^{-x/\xi_-(T)}$
2. $T = T_D^{(1)}$: $\langle S(0)S(x)\rangle \simeq xe^{-k_0 x}$ avec $\cosh k_0 a = J_1/4|J_2|$
3. $T > T_D^{(1)}$: $\langle S(0)S(x)\rangle \simeq e^{-x/\xi_+(T)} \cos q(T)x$ avec $q(T) \sim (T - T_D^{(1)})^{1/2}$

Pour $\xi_\pm(T)$, on trouve que, du coté commensurable, la longueur de corrélation montre une pente infinie à $T_D^{(1)}$; elle sera typiquement petite, mais pas nécessairement un minimum ou zéro. La pente de l'autre coté est finie (figure 6.3). Ceci caractérise un point de désordre de première espèce. Il a deux autres propriétés très spéciales : (i) La susceptibilité acquiert une forme particulièrement simple pour le point de désordre (typiquement le réciproque d'un carré parfait). (ii) Si l'on regarde les fonctions de corrélation, et les compare avec une fonction de corrélation Ornstein-Zernicke (pour x grand) en fonction de la dimension d

$$\langle S(0)S(x)\rangle \simeq e^{-x/\xi(T)}/r^{(d-1)/2}, \tag{6.5}$$

on voit que les fonctions de corrélations sont bien celles pour $d = 1$ sauf au point de désordre : formellement, elles correspondent à $d = -1$.

Signalons enfin que les corrélations incommensurables sont déterminés par un vecteur d'onde q qui se sépare continument de la valeur $q = 0$ commensurable ; l'exposant $1/2$ est non-universel.

Le deuxième exemple est caractérisé par un *point de désordre de seconde espèce*. Ici, on trouve une température de désordre donnée implicitement par

$$J_2 + (T^{(2)}/2)\ln[2\cosh(2J_1/T_D^{(2)})] = 0. \tag{6.6}$$

On trouve ainsi le comportement suivant des corrélations :

1. $T < T_D^{(2)}$: $\langle S(0)S(x)\rangle \simeq e^{-x/\xi_-(T)}$
2. $T = T_D^{(1)}$: $\langle S(0)S(x)\rangle \simeq \delta(x)$
3. $T > T_D^{(1)}$: $\langle S(0)S(x)\rangle \simeq (-1)^{x/2a}e^{-x/\xi_+(T)}$

Il y a un changement abrupt de la nature des corrélations ; la longueur de corrélation au point de désordre est zéro ; la pente finie (figure 6.3). La période des oscillations à haute température ne dépend pas de la température. On n'observe ni réduction dimensionnelle ni une forme particulièrement simple de la susceptibilité.

Dans la section suivante, nous allons appliquer ces idées de la physique classique au problème quantique de la chaîne de spin 1 quantique bilinéaire-biquadratique.

6.3 Le point AKLT comme point de désordre de première espèce

Pour nos calculs, nous utilisons le DMRG pour des chaînes de longueur $L = 96$ et gardons $M = 80$ états. Ceci est suffisant de trouver des erreurs de troncation inférieures à 10^{-12} dans la région considérée. Il n'est alors pas nécessaire de faire une extrapolation des résultats en M, ils sont déjà extrêmement proches des résultats exacts. Pour le point AKLT, on retrouve les résultats exacts avec la précision de la machine. A cause des longueurs de corrélation très petites (typiquement inférieures à 3) une chaîne de longueur $L = 96$ est suffisamment longue pour obtenir les résultats dans la limite thermodynamique. Du point de vue du DMRG, il s'agit d'une situation idéale. Il faut quand même se méfier des erreurs purement numériques : les corrélations spin-spin sont dans quelques cas, pour une distance de 30 à 40 sites, de l'ordre de 10^{-13} et moins. Comme elles sont obtenues par des additions de petits nombres au-dessous de la précision de la machine (dans un calcul REAL*8), elles doivent être rejettées.

Pour juger l'importance de cet effet, nous avons adopté la stratégie suivante : comme notre système est isotrope et – dans la région où la phase de Haldane et la phase trimérisée se rencontrent – désordonné, les corrélations spin-spin doivent obéir à la relation

$$\langle S_i^+ S_j^- \rangle = \langle S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y \rangle = 2\langle S_i^z S_j^z \rangle. \tag{6.7}$$

Ces deux quantités sont calculées indépendamment ; nous ne retenons pas les corrélations qui montrent une déviation de plus d'un millième de cette relation. Dans ce qui suit, nous faisons mention de ce problème quand nous le rencontrons. Par ailleurs, on trouve que les corrélations $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ atteignent une valeur minimale qui oscille aléatoirement autour de 10^{-14}, alors que $\langle S^+ S^- \rangle$ continue à diminuer régulièrement. Nous en concluons que les valeurs pour la dernière corrélation sont plus précises (En effet, dans le calcul, toutes les contributions importantes à $\langle S^+ S^- \rangle$ et les poids ont le même signe, alors qu'il change pour celles à $\langle S_i^z S_j^z \rangle$).

Le point-clé de cette analyse est de ne pas regarder la transformée de Fourier des corrélations, mais directement les corrélations dans l'espace réel. Je vais ainsi démontrer que le point AKLT, jusqu'alors négligé dans les études du diagramme de phase, est effectivement le point de désordre de la phase de Haldane, qui est liée par des transitions continues à deux phases à corrélations incompatibles, commensurables dans l'un cas (phase dimérisée) et incommensurables dans l'autre (phase trimérisée). Il a toutes les caractéristiques d'un point de désordre de première espece, et l'observation classique du "carré parfait" pour la susceptibilité trouve un équivalent quantique.

Regardons d'abord les corrélations dans l'espace réel (figure 6.12, fin du chapitre), pour des valeurs de γ entre 0.10π et 0.125π. Ceci inclut le point AKLT

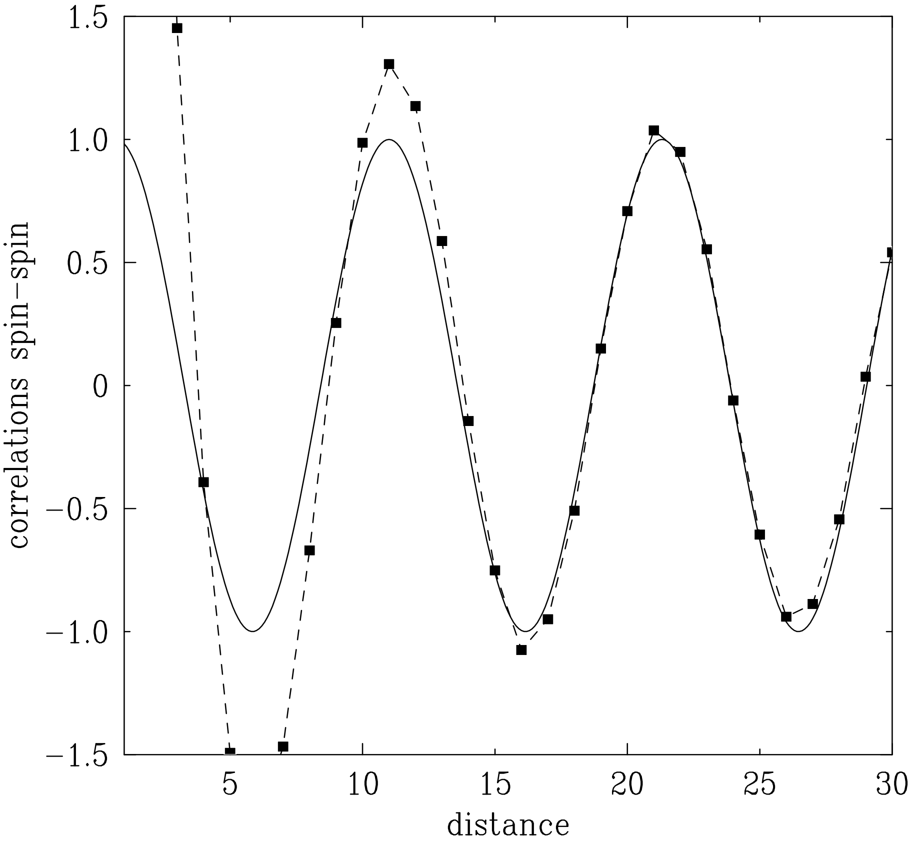

FIG. 6.4: *Comparaison entre les corrélations spin-spin incommensurables prédites (ligne) et mesurés numériquement (carrés) pour $\gamma = 0.115\pi$, au-dessus de γ_{AKLT}, mais au-dessous de $\tilde{\gamma}$. Les échelles ont été adaptées.*

($\gamma = 0.1024\pi$). Les corrélations pour $\gamma < 0.1024\pi$ sont parfaitement antiferromagnétiques ; ceci est le plus évident pour un diagramme logarithmique de $|(-1)^{i-j}\sqrt{|i-j|}\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle|$. Pour des corrélations antiferromagnétiques, la courbe ne montre aucune modulation.

Au-dessus de $\gamma = 0.1024\pi$, les courbes logarithmiques montrent des oscillations à des périodes de plus en plus courtes pour des γ plus grand, pour arriver à une longueur 3. Les corrélations ne sont alors pas antiferromagnétiques, en contradiction avec [Fath 93a, Xiang 93, Bursill 95], mais déjà incommensurables. Ces modulations peuvent être comprises par la loi classique donnée pour la phase haute-température incommensurable pour un point de désorde de première espèce

γ/π	p	γ/π	p
0.105	10	0.109	7
0.106	8	0.110	6
0.107	8	0.115	5
0.108	7	0.120	5

TAB. 6.1: *Longueur p des oscillations incommensurables pour $\gamma > \gamma_{AKLT} = 0.1024\pi$.*

(la racine apparaît parce que notre système est bidimensionnel) :

$$\cos[q(\gamma)(i-j)]\frac{e^{-|i-j|/\xi(\gamma)}}{\sqrt{|i-j|}} = (-1)^{i-j}\cos[(\pi-q)(i-j)]\frac{e^{-|i-j|/\xi(\gamma)}}{\sqrt{|i-j|}} \tag{6.8}$$

Les modulations multipliées par $(-1)^{i-j}$ devraient alors montrer une période $\pi/(\pi-q)$, qui est plus facile à voir que celle originant de $\cos q(i-j)$ directement. Pour démontrer que les fonctions de corrélations peuvent bien être décrites par (6.8), nous avons essayé un fit direct de la fonction trouvée avec la loi théorique. Ce fit est compliqué par le fait qu'il y a effectivement trois paramètres à contrôler, le vecteur d'onde q, la longueur de corrélation ξ et aussi un facteur de phase α en remplaçant $(i-j)$ par $(i-j-\alpha)$ dans l'argument du cosinus. Nous trouvons que le fit est extrêmement sensible aux valeurs de ces paramètres, ce qui permet un fit sérieux. Donnons le cas de $\gamma = 0.115\pi$, qui est sensiblement au-dessous au point donné jusqu'alors pour le changement des corrélations. Nous obtenons le fit donneé en figure 6.4 pour $\alpha = 0.65$, $\xi = 1.08$ et $\pi - q = 0.198\pi$. Le vecteur d'onde q s'est déjà éloigné 20 pour cent de la valeur antiferromagnétique $q = \pi$.

Pour des γ plus proche du point AKLT, ce fit est compliqué encore par les erreurs dans la fonction de corrélation à cause de la précision limitée de l'ordinateur. Pour estimer le comportement $q(\gamma)$, nous avons eu recours à la périodicité : Pour une période p, $\pi - q \approx \pi/p$. La nature discrète du problème limite cette approche. Nous trouvons les périodes données dans le tableau 6.1.

On obtient le comportement montré dans la figure 6.5. Clairement, il est compatible avec $q \propto (\gamma - \gamma_{AKLT})^\sigma$ avec $0 < \sigma < 1$, le comportement pour un point de désordre de première espece. La courbe serait compatible avec $\sigma \approx 1/2$; mais il nous est impossible de donner une estimation précise. Regardons enfin la transformée de Fourier défini par

$$C(q) = \sum_r e^{iqr} C(r) \tag{6.9}$$

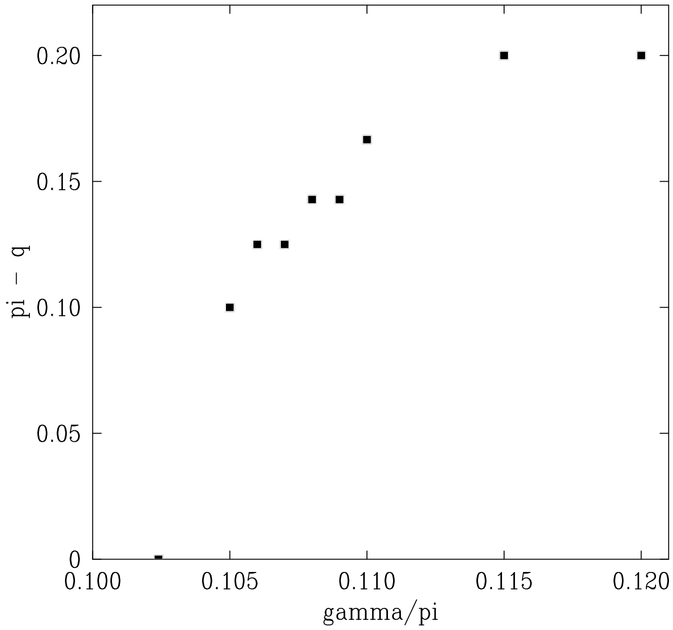

FIG. 6.5: *Vecteur d'onde $\pi - q$ en fonction de γ. On observe une singularité au point AKLT.*

Ici, on n'a pas de problèmes de précision : les contributions imprécises sont effectivement tellement petites qu'elles ne se manifestent pas. Si l'on regarde la partie réelle (suffisant à cause de la symétrie de $C(r)$), on obtient les courbes des figures 6.6 et 6.7. Pour des $\gamma \leq 0.13\pi$, il y a un pic pour $q = \pi$, qui devient de plus en plus large, à cause de la réduction de la longueur de corrélation (largueur $\delta \propto \xi^{-1}$) et pour $\gamma > \gamma_{AKLT}$ à cause des oscillations incommensurables. Le point AKLT n'a ici aucune signification particulière, les oscillations incommensurables sont encore invisibles. Pour des $\gamma \geq 0.135\pi$, le pic se sépare en deux pics, qui

γ/π	q	γ/π	q
0.130	π	0.155	$\pm 0.76\pi$
0.135	$\pm 0.90\pi$	0.160	$\pm 0.74\pi$
0.140	$\pm 0.85\pi$	0.165	$\pm 0.73\pi$
0.145	$\pm 0.81\pi$	0.170	$\pm 0.72\pi$
0.150	$\pm 0.78\pi$	0.200	$\pm 0.67\pi$

TAB. 6.2: *Positions des pics de la transformée de Fourier en fonction de γ.*

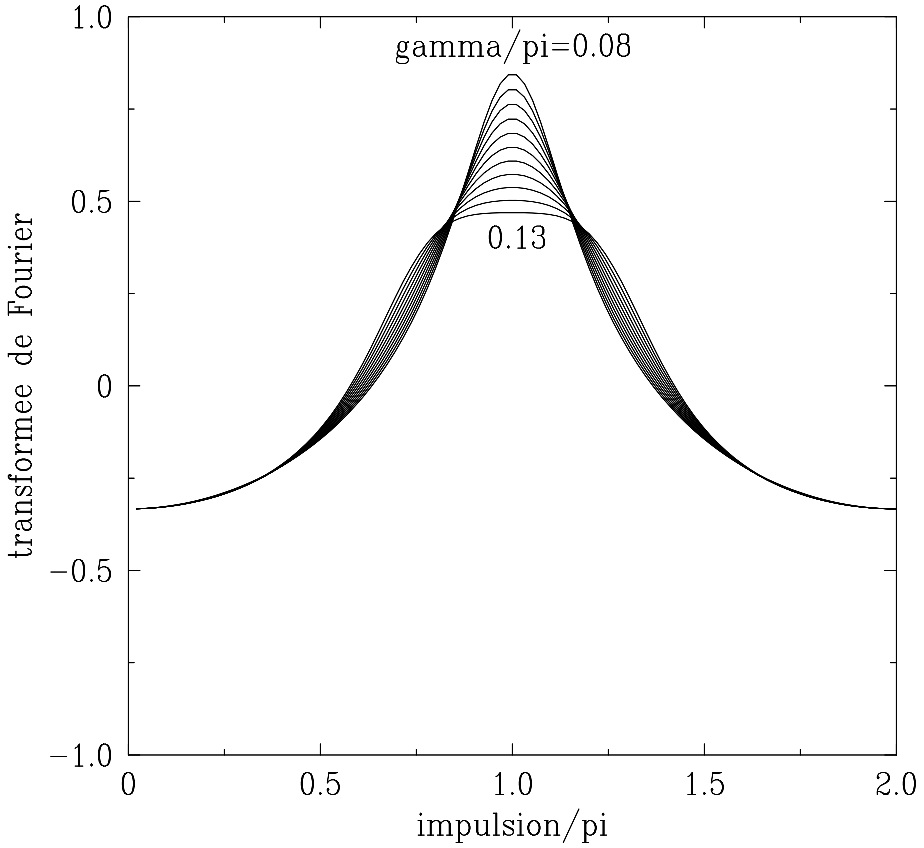

FIG. 6.6: *Transformée de Fourier des corrélations spin-spin pour* $0.08\pi \leq \gamma \leq 0.13\pi$. *Le pic devient plus large en fonction de* γ, *mais reste à* π. *Le point AKLT ne se distingue pas.*

s'éloignent et vont vers $q = \pm 2\pi/3$. Les pics deviennent de plus en plus pointus à cause de la croissance de ξ. Pour $\gamma = 0.20\pi$, les pics se trouvent déjà à $q = \pm 0.67\pi$ et sont très pointus. Nous avons obtenu pour la position du pic les résultats du tableau 6.2. Comme le déplacement de q est très sensible à γ près du point de dégagement $\tilde{\gamma}$, il est très facile de le localiser très précisement. Comme à notre avis, il n'a pas de vraie signification physique, nous ne l'avons pas fait – signalons quand même que nos résultats sont en accord avec le résultat de Bursill et al.[Bursill 95] : $\tilde{\gamma} = 0.1324\pi$, qui est alors le point de Lifshitz.

Pour les longueurs de corrélation, nous trouvons qu'elles ont un minimum pour le point AKLT, avec une pente infinie (numériquement : très grande) pour les ξ dans la partie commensurable ($\gamma < 0.1024\pi$), et une croissance lente pour la partie

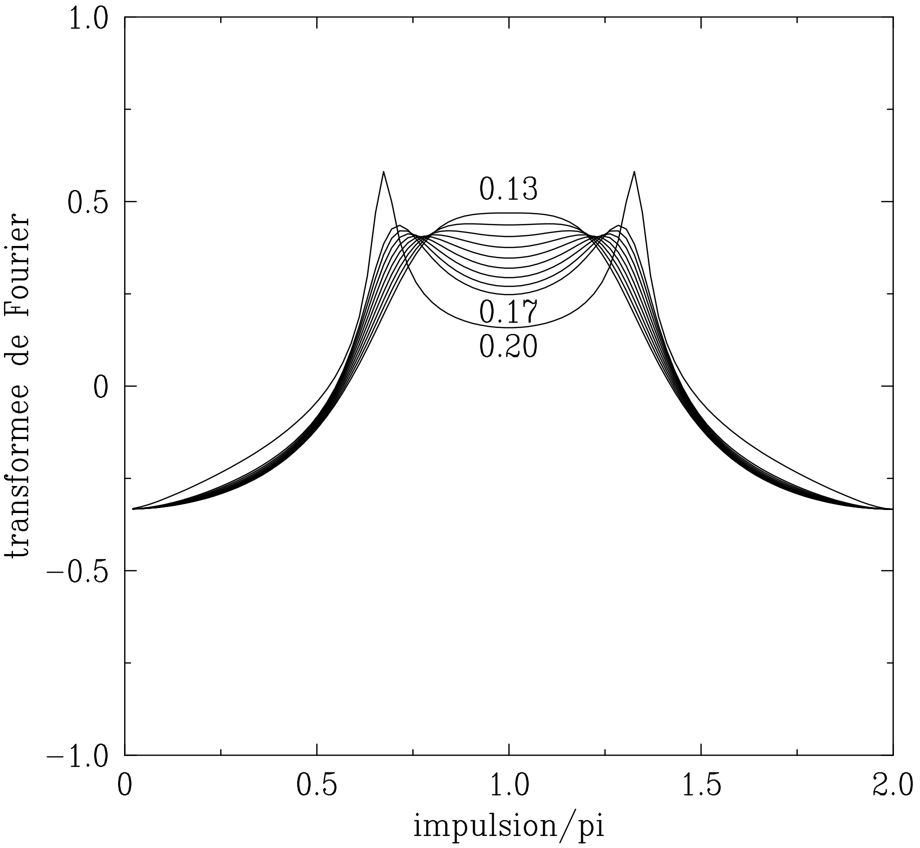

FIG. 6.7: *Transformée de Fourier des corrélations spin-spin pour* $0.13\pi \leq \gamma \leq 0.17\pi$ *et* $\gamma = 0.20\pi$. *Le pic se déplace de* π *(pour* $\gamma = 0.13\pi$*) vers* $\pm 2\pi/3$. *Pour* $\gamma = 0.20\pi$ *les deux pics sont déjà assez aigus, une indication de la longueur de corrélation de plus en plus grande vers* $\gamma = 0.25\pi$.

incommensurable avec une pente finie (voir discussion ci-dessous), données dans le tableau 6.3 et la figure 6.8. Les longueurs de corrélations ont été déterminées par des méthodes différentes : dans le régime $\gamma < \gamma_{AKLT}$, nous avons comparé, numériquement et graphiquement, les corrélations spin-spin avec une loi $\exp(-r/\xi)/\sqrt{r}$, qui étaient dans tous les cas en très bon accord. Nous estimons la précision des résultats à environ 1 pour cent : les erreurs de troncation sont de l'ordre 10^{-13} ; donc, il ne faut pas s'attendre à une sousestimation sérieuse comme dans le cas de spin 2. Pour $L = 96$, et $\xi \approx 1 - 2$, des effets de taille finie sont exclus. La situation est beaucoup plus complexe pour le régime $\gamma > \gamma_{AKLT}$. Comme nous avons déjà vu, le fit du comportement théoriquement attendu à la courbe trouvé est assez complexe. Or, si l'on regarde un plot de $\ln(\sqrt{|i-j|}\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle$

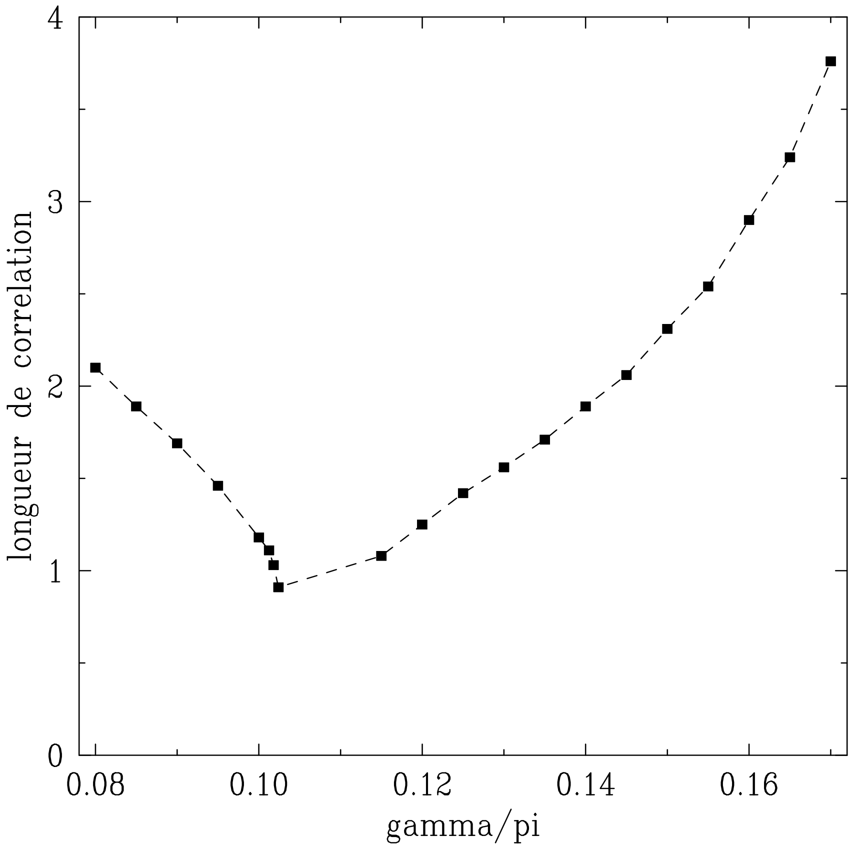

FIG. 6.8: *Longueurs de corrélation en fonction de γ.*

(figure 6.12), on s'aperçoit que l'on peut assez bien obtenir un fit linéaire pour les maxima (qui sont très stable dans le sens qu'un facteur $\cos qx$ influence le logarithme le moins quand il est proche de 1). Très généreusement estimée, l'erreur devrait être au-dessous de 5 pour cent pour l'évaluation graphique. Nous estimons, que pour $\gamma \gtrsim 0.15\pi$ la sousestimation à cause d'une erreur de troncation non-négligéable domine l'erreur. Pour $\gamma_{AKLT} < \gamma \leq 0.11\pi$ nous n'avons pas pu obtenir la longueur de corrélation : d'un part, les périodes dues à l'incommensurabilité sont trop longues pour les dégager du comportement exponentiel. De l'autre part, ni un fit $\exp -r/\xi$ ni un fit $\exp(-r/\xi)/\sqrt{r}$ n'est satisfaisant. Nous ne savons pas, si cette observation est due au changement du comportement de la fonction de corrélation ou simplement due aux problèmes inhérentes à notre méthode numérique. En tout cas, les résultats indiquent assez fortement une extrapolation vers le point AKLT avec une pente finie.

γ/π	ξ	γ/π	ξ
0.080	2.10	0.125	1.42
0.085	1.89	0.130	1.56
0.090	1.69	0.135	1.71
0.095	1.46	0.140	1.89
0.100	1.18	0.145	2.06
0.10125	1.11	0.150	2.31
0.1018	1.03	0.155	2.54
0.1024	0.91	0.160	2.90
0.115	1.08	0.165	3.24
0.120	1.25	0.170	3.76

TAB. 6.3: *Longueurs de corrélation en fonction de γ.*

γ/π	Δ	γ/π	Δ
-0.20	—	0.115	0.696
-0.15	0.13	0.12	0.708
-0.10	0.21	0.125	0.709
-0.05	0.31	0.13	0.698
0.00	0.4105	0.135	0.676
0.05	0.533	0.14	0.645
0.08	0.608	0.145	0.608
0.085	0.621	0.15	0.568
0.09	0.634	0.155	0.525
0.095	0.646	0.16	0.48
0.10	0.659	0.165	0.43
0.105	0.671	0.17	0.39
0.11	0.684	0.20	0.16

TAB. 6.4: *Gaps dans la phase de Haldane en fonction de γ.*

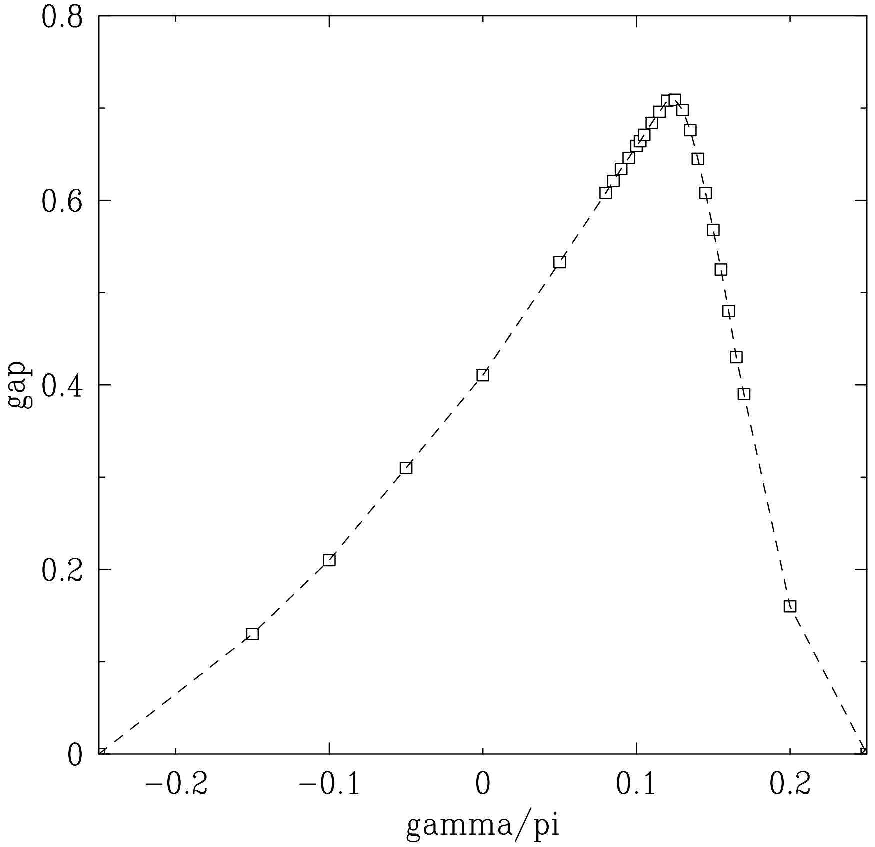

FIG. 6.9: *Gaps dans la phase de Haldane en fonction de γ.*

Les autres quantités importantes sont le gap et le paramètre d'ordre, le paramètre d'ordre non-local O^z_π introduit dans chapitre 4. Le gap montre un maximum pour $\gamma \approx 0.123\pi$, qui n'est alors relié ni au point de désordre ni au point de Lifshitz. Nous donnons nos valeurs du gap avec les chiffres que nous croyons exacts dans le tableau 6.4 (voir aussi la figure 6.9). Rappellons qu'il faut ajouter des spins 1/2 libres aux deux bouts de la chaîne, afin de lever la dégénérescence de l'état fondamental pour des chaînes ouvertes, comme discuté dans le chapitre précécent. Pour les points de transition $\gamma = \pm 0.25\pi$ nous n'avons pas obtenus des estimations du gap sérieuses : on se heurte au problème des fluctations critiques, impliquant un grand M, et à la petite taille du gap (0). Nos résultats sont bien compatibles avec un gap zéro, mais pas suffisamment précises pour donner une estimation sérieuse. Le point $\gamma = -0.20\pi$ est déjà suffisamment proche de la transition : le même problème interdit une estimation sérieuse. Le point $\gamma = 0.20\pi$

γ/π	O_π^z	γ/π	O_π^z
0.080	0.439371	0.130	0.433666
0.085	0.441286	0.135	0.428825
0.090	0.442788	0.140	0.422849
0.095	0.443834	0.145	0.415617
0.100	0.444378	0.150	0.406993
0.105	0.444365	0.155	0.396865
0.110	0.443739	0.160	0.384987
0.115	0.442433	0.165	0.371287
0.120	0.440375	0.170	0.355567
0.125	0.437482		

TAB. 6.5: *Paramètre d'ordre string $O_\pi^z(\infty)$ en fonction de γ. Toutes les chiffres sont exactes.*

est spécial dans le sens qu'il y a une forte période 3 dans les valeurs pour le gap, à cause de la trimérisation (voir [Xiang 93]), qui subsiste encore appréciablement pour $L = 96$ (on obtient des valeurs 0.160, 0.158 et 0.154). Cette oscillation existe aussi pour d'autres $\gamma < 0.25\pi$, mais dans les autres cas, elle est déjà inférieure à la précision du calcul. Signalons enfin que nous obtenons un gap $\Delta = 0.664$ pour le point AKLT, en accord avec les résultats de [Fath 93b] (en prenant en compte les préfacteurs différents de l'Hamiltonien).

Le paramètre d'ordre string à grande distance a son maximum pour le point AKLT : $|O_\pi^z(\infty)| = \frac{4}{9}$. A cause des difficultés d'une représentation graphique, nous le donnons pour la région $0.08\pi \leq \gamma \leq 0.17\pi$ dans le tableau 6.5 (voir aussi la figure 6.10). La précision est pour tous les points donnés meilleure que 10^{-7}. On voit que le point AKLT, bien que d'ordre minimal du point de vue des phases trimérisées et dimérisées, est un point d'ordre *caché* maximal. Ceci est aussi visible dans la figure 6.10, qui montre bien que le paramètre d'ordre string est fortement réduit vers les points de transition.

Afin d'identifier le point AKLT comme point de désordre de première espèce, il faut encore trouver la réduction dimensionnelle et un équivalent de la forme particulièrement simple de la susceptibilité des modèles classiques. La réduction dimensionnelle est évidente : la solution exacte a démontré que les corrélations obéissent à une loi d'Ornstein-Zernicke pour *une* dimension classique, alors que le modèle σ non-linéaire prédit une loi des corrélation bidimensionnelle. La réduction dimensionnelle est accompagnée par une forme particulièrement simple de l'Hamiltonien : il se décompose dans une somme d'opérateurs de projection locaux,

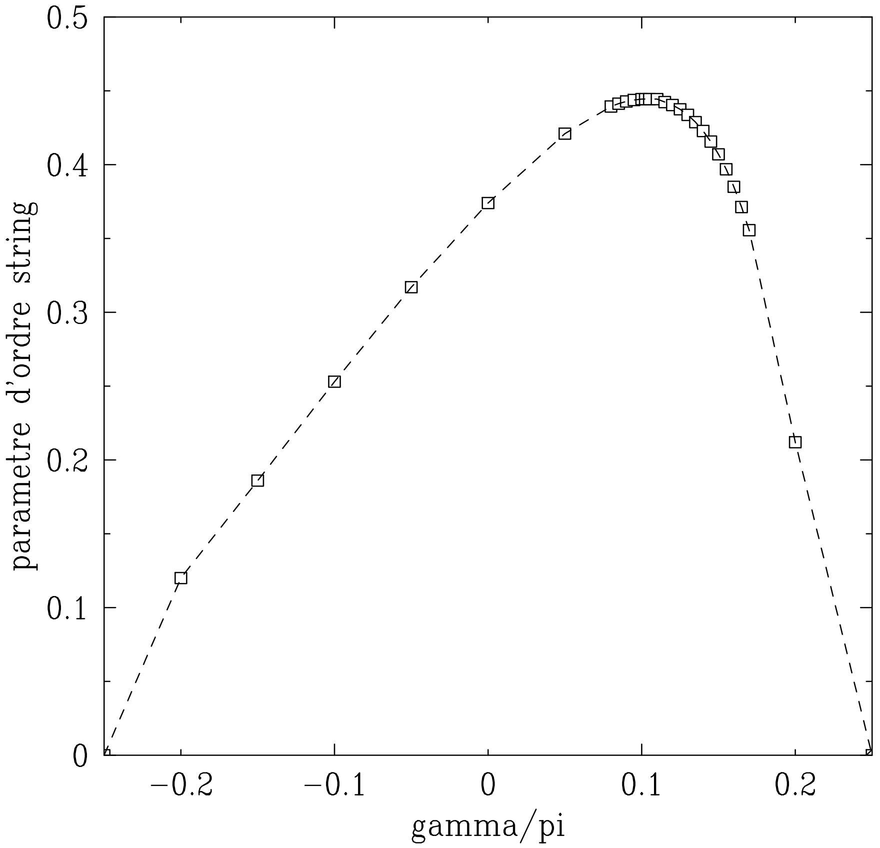

FIG. 6.10: *Paramètre d'ordre string* $|O^z_\pi(\infty)|$ *dans la phase de Haldane en fonction de* γ.

ce qui fait perdre au système son caractère unidimensionnel (en espace) et le transforme dans un problème de mécanique quantique dans un espace à zéro dimensions.

Nous avons alors réuni toutes les caractéristiques d'un point de désordre de première espèce. Le modèle AKLT est donc un point de désordre. Il est alors identifié non pas seulement comme un point qui, par hasard, est exactement soluble, mais qui montre cette propriété pour des raisons physiques beaucoup plus profondes. Les résultats de Bursill et al.[Bursill 95], qui ont regardé la transformée de Fourier des corrélations s'insèrent naturellement : le point qu'ils identifient comme point de changement des corrélations est tout simplement le point de Lifshitz d'après la définition donnée ci-dessus.

Ceci change la description du diagramme de phase changée : Il y a *trois régions* pour $0 < \gamma < \pi/4$, dominées par le point AKLT comme point de désordre et (ici nos résultat semblent en accord avec les résultats de [Fath 93a, Bursill 95]) le point de Lai-Sutherland $\gamma = 0.25\pi$ comme point de transition du type Kosterlitz-Thouless :

- $0 < \gamma < \gamma_{AKLT}$: Corrélations antiferromagnétiques à courte portée ; phase de Haldane ; spectre avec gap. Une description générique est donnée par le modèle AKLT ou aussi le modèle de Heisenberg isotrope antiferromagnétique.
- $\gamma_{AKLT} < \gamma < \tilde{\gamma}$: Corrélations incommensurables à courte portée, avec un vecteur d'onde $q < \pi$, qui s'éloigne de π comme $\pi - q \propto (\gamma - \gamma_{AKLT})^{\sigma \approx 1/2}$. Dans la transformée de Fourier, le pic reste encore à $q = \pi$. Le spectre A un gap ; une description générique par le modèle AKLT est partiellement donnée (il reste en commun avec le modèle AKLT le gap, l'ordre caché et aussi, comme nous avons trouvé numériquement, les spins 1/2 effectifs libres aux bords).
- $\tilde{\gamma} < \gamma < \gamma_c$ (avec $\gamma_c = 0.25\pi$ d'après toute évidence) : comme la région précédente ; le pic de la transformée de Fourier se déplace de $q = \pi$ vers $q = \pm 2\pi/3$ et les corrélations incommensurables deviennent ainsi visibles ; le spectre a un gap.

Reconsidérons, pour conclure, ces résultats du point du vue de la limite classique, $S \to \infty$, de la chaîne bilininéaire-biquadratique. Dans ce cas-là, on trouve facilement les résultats suivants : Pour $\gamma = 0$, l'état fondamental montre de l'ordre antiferromagnétique, avec un vecteur d'onde $q = \pi$. En augmentant γ, on passe à une phase ordonnée incommensurable pour $\gamma = \gamma_{class} = 0.148\pi$ (ou $\gamma_{class} = \arctan 1/2$). Le vecteur d'onde q s'éloigne de π, suivant la loi

$$\cos q = -\frac{1}{2} \cot \gamma. \tag{6.10}$$

Le facteur de structure statique $S(q)$ montre, à cause de l'ordre dans les deux phases, un pic delta pour q. Le changement de la nature des corrélations se passe alors pour le même γ dans l'espace réel et réciproque, et il n'y a évidemment pas de point de désordre.

Or, si nous regardons le cas quantique $S < \infty$ avec S entier, l'ordre à grande portée est détruit en faveur d'un ordre à courte portée sur l'échelle de la longueur de corrélation ξ.

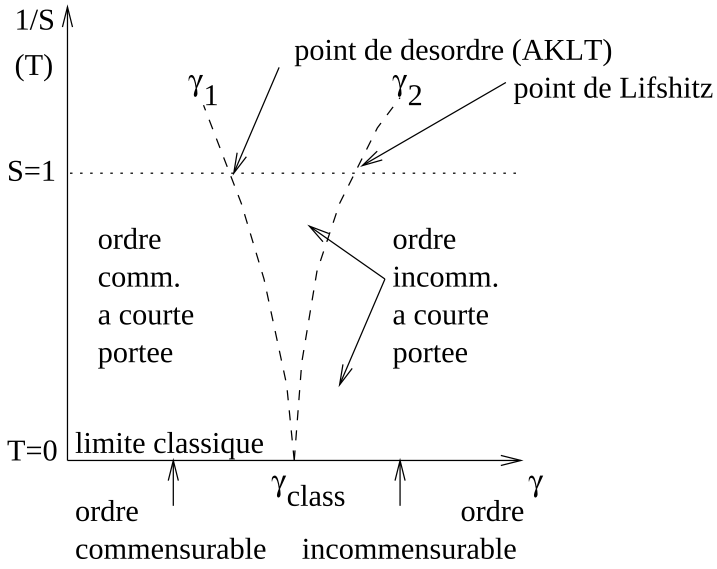

FIG. 6.11: *Scénario proposé pour la chaîne bilinéaire-biquadratique pour S entier : séparation du point de désordre et du point de Lifshitz en fonction de S. Le point de désordre pour $S = 1$, γ_{AKLT}, et le point de Lifshitz pour $S = 1$, $\tilde{\gamma}$, sont les "résidus" de la transition classique entre deux phases ordonnées.*

Dans le mapping de Haldane (voir chap. 3), la constante de couplage g du modèle σ non-linéaire quantique à une dimension spatiale est donnée par $2/S$, alors que dans le modèle σ non-linéaire classique à deux dimensions spatiales, que l'on obtient du mapping pour S entier, elle est donnée par la température T. Un spin fini est alors, d'un certain point de vue, l'équivalent d'une température finie, avec un petit spin correspondant à une haute température dans le modèle classique. Du théorème de Mermin et Wagner[Mermin 66], on sait que ce modèle est désordonné pour tout T fini. Ce modéle classique paramagnétique correspond alors à un modèle qui montre un "paramagnétisme quantique". On peut alors, pour S *entier*, proposer le scénario montré dans la figure 6.11 : pour $S = \infty (T = 0)$, le système montre deux phases ordonnées, l'une commensurable, l'autre incommensurable. Pour $S < \infty (T > 0)$, le système est désordonnée. A cause de la longueur de corrélation finie (et de plus en plus courte pour $S \to 0$), le γ_{class}, où les corrélations changent de nature dans les espaces réel et réciproque, se sépare pour chaque S entier fini dans deux points γ_1 et γ_2, où les corrélations deviennent incommensurables dans l'espace réel et dans l'espace réciproque. La diminution de ξ pour $S \to 0$ mène à une augmentation de la différence entre γ_1

et γ_2. Remarquons que l'on retrouve exactement le scénario de la figure 6.2.

L'existence des points de désordre et de Lifshitz pour la chaîne bilinéaire-biquadratique pour $S = 1$ est alors le "résidu" d'une transition classique entre une phase commensurable avec ordre de Néel et une phase ordonnée incommensurable.

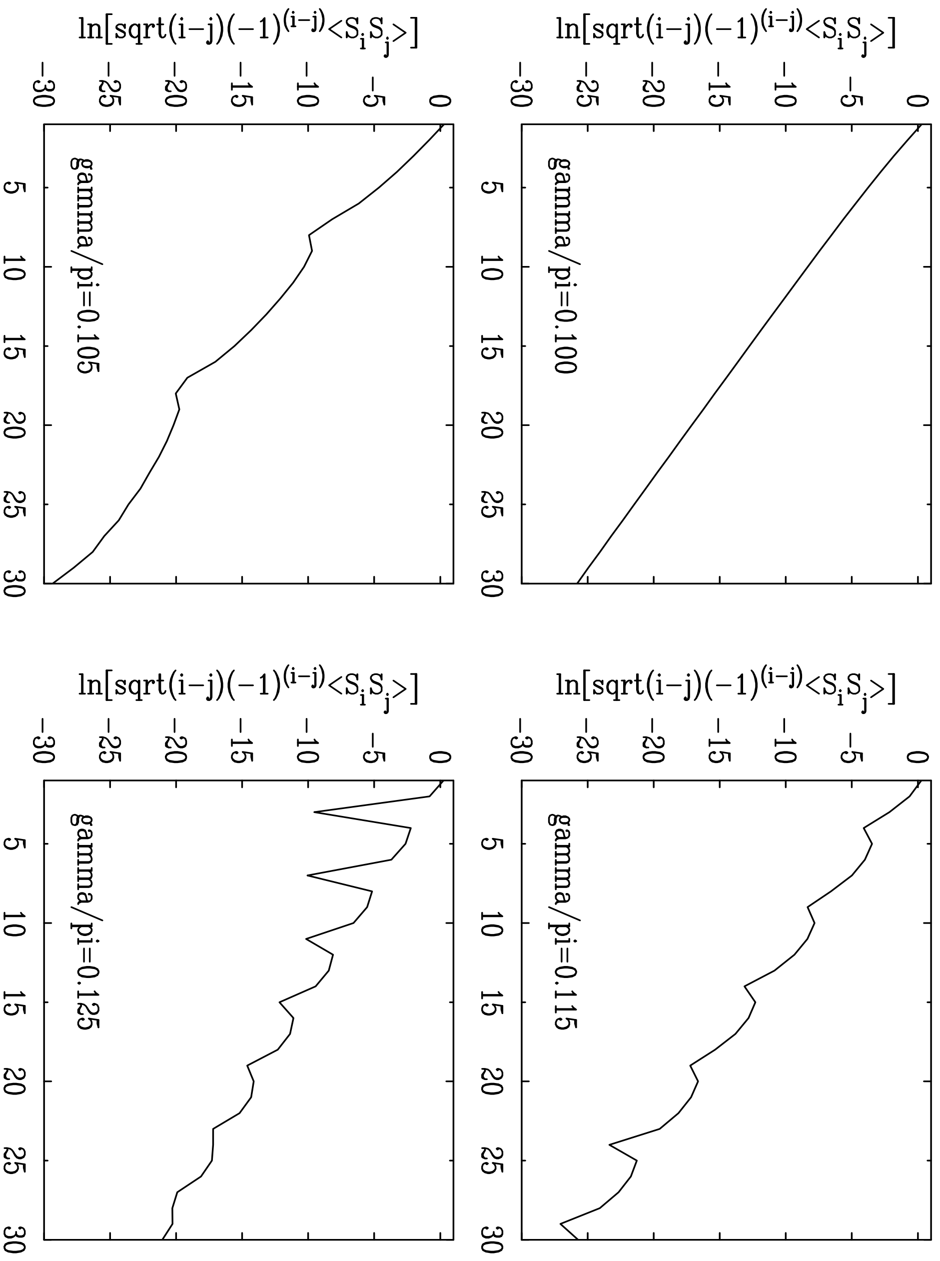

FIG. 6.12: *Corrélations spin-spin en espace réel en fonction de* $\mid i - j \mid$, *pour plusieurs* γ *au-dessous et au-dessus de* $\gamma_{AKLT} = 0.1024\pi$.

Chapitre 7

L'échelle de spin 1/2 quantiques

Dans les années récentes, marquées par le renouvellement général de l'intérêt pour les systèmes (anti)ferromagnétiques quantiques dans une dimension après la conjecture de Haldane[Haldane 83a, Haldane 83b], le sujet de *deux (ou plus) chaînes de spin 1/2 quantiques couplées* a été étudié dans plusieurs travaux, (entre autres, [Schulz 86a, Strong 92, Strong 94, White 94, Chitra 95, Watanabe 93, Barnes 94, Dagotto 92, Hida 91, Barnes 93]).

A l'origine de ces études sont d'abord des systèmes expérimentaux comme le [Johnston 85, Johnston 87] $(VO)_2P_2O_7$ et $Sr_2Cu_4O_6$[Takano 92], qui sont des échelles de spin quantiques : deux chaînes de spin 1/2 paralleles interagissent avec des interactions sur les barreaux d'une échelle. Ces systèmes permettent de vérifier des prédictions théoriques ; dans le premier cas, la théorie a beaucoup contribué à une clarification de la nature des interactions[Barnes 94].

L'intérêt purement théorique est que le problème de deux chaînes couplées est lié à plusieurs autres problèmes d'interet physique : si l'on augmente le couplage entre les chaînes de zéro vers un couplage ferromagnétique fort, des pairs de spin 1/2, qui forment un barreau de l'échelle, sont forcés dans leurs états triplets et forment alors un spin 1 ; on retrouve la physique d'une chaîne de spin 1, fondamentalement différent de celle d'une chaîne de spin 1/2[Haldane 83a, Haldane 83b]. Une question qui se pose naturellement est de savoir si le passage d'un régime à l'autre s'effectue pour un couplage quelconque fini ou est immédiat dès un couplage interchaîne infinitésimal ; cette question a été étudié par [Strong 92, Strong 94, Watanabe 93, Hida 91], avec des résultats contradictoires. Si l'on augmente le couplage entre les chaînes de zéro vers un couplage fort antiferromagnétique, le problème se réduit à celui d'une chaîne d'Ising dans un champ magnétique transversal, résolu par Pfeuty[Pfeuty 70, Strong 92, Strong 94]. Encore une fois, la question se pose sur le passage d'un régime à l'autre : le changement du comportement critique typique d'une chaîne de spin 1/2 vers le comportement d'un liquide de spin avec un gap pour des couplages antiferromagnétiques forts est-il immédiat ou pour un couplage fini ? Dans ce cas-là, il y a une évidence assez forte qu'un couplage infinitésimal est suffisant. En même temps, pour un couplage interchaîne égal au couplage intrachaîne, on étudie le premier pas vers un réseau carré bidimensionnel de spin 1/2. Il existe maintenant un consensus général que ce réseau montre de l'ordre de Néel à température zéro avec une longueur de corrélation divergente[Chakravarty 88]. Il reste à étudier comment ce comportement émerge d'un nombre croissant des chaînes critiques et désordonnées couplées, en particulier, s'il y a une différence entre le comportement d'un nombre pair et impair de chaînes couplées[White 94]. Enfin, la technique de la bosonisation liée aux résultats exactement connus a permis à Strong et Millis de proposer un diagramme de phase pour les chaînes couplées[Strong 92, Strong 94] : il montre dans une situation assez riche la compétition entre l'ordre magnétique et le "quenching" des moments magnétiques dans des états singlet.

Dans ce chapitre, nous allons étudier le problème posé dans un espace des couplages assez général, prenant en compte des anisotropies dans les couplages intra- et interchaînes. Les dernières n'ont pas été étudiées par les autres auteurs. Nous allons d'abord présenter les résultats de notre calcul de bosonisation du cas général, qui, pour le cas d'un couplage interchaîne isotrope, retrouve les résultats annoncés par [Schulz 86a, Strong 92, Strong 94], et montre que l'anisotropie introduit quelques effets nouveaux. Ces résultats, combinés avec des résultats exacts, seront confrontés avec ceux d'une étude avec le DMRG, ce qui permet d'examiner les approximations peu contrôlables et de quantifier les prédictions. En plus, le diagramme de phase permet une étude du comportement du DMRG qui est assez mal connu : la plupart des travaux ont été limités à une étude des points d'un diagramme de phase éloignés des lignes de transition. A notre connaissance, les seuls travaux qui essaient d'obtenir de l'information proche d'une ligne de transition sont ceux de [Kato 94] sur une chaîne de spin 1 avec des liens ferromagnétiques et antiferromagnétiques alternants et de Chitra et al. sur la chaîne de spin 1/2 dimérisée et frustrée[Chitra 95]. Il nous semble alors utile de rapporter aussi les limitations et difficultés encontrées par le DMRG, qui n'ont pas encore été publiées dans un autre travail.

7.1 Bosonisation des chaînes de spin 1/2 couplées

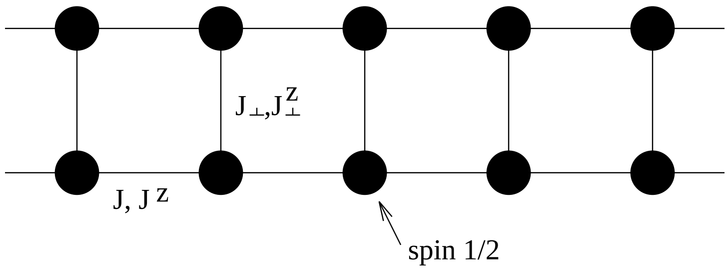

FIG. 7.1: *Chaînes de spin 1/2 couplées.*

Introduisons d'abord l'Hamiltonien complet pour les deux chaînes de spin couplées (figure 7.1) :

$$\begin{aligned} H &= J\sum_n \frac{1}{2}(S^+_{\uparrow,n}S^-_{\uparrow,n+1} + S^-_{\uparrow,n}S^+_{\uparrow,n+1}) + J^z\sum_n S^z_{\uparrow,n}S^z_{\uparrow,n+1} \quad \text{(1. chaîne)} \\ &+ J\sum_n \frac{1}{2}(S^+_{\downarrow,n}S^-_{\downarrow,n+1} + S^-_{\downarrow,n}S^+_{\downarrow,n+1}) + J^z\sum_n S^z_{\downarrow,n}S^z_{\downarrow,n+1} \quad \text{(2. chaîne)} \\ &+ J_\perp\sum_n \frac{1}{2}(S^+_{\uparrow,n}S^-_{\downarrow,n} + S^-_{\uparrow,n}S^+_{\downarrow,n}) + J^z_\perp\sum_n S^z_{\uparrow,n}S^z_{\downarrow,n} \quad \text{(interchaîne)} \end{aligned} \tag{7.1}$$

Dans ce qui suit, nous mettons $J = 1$.

La technique de la bosonisation[1] permet la description des fermions de Dirac (rélativistes) sans masse par une théorie des champs bosonique. Cette méthode est dans sa version originale limitée à des système avec 1+1 dimensions spatiotemporelles. La bosonisation a été originalement découverte par Bloch[Bloch 34] et Tomonaga[Tomonaga 50], redécouverte par Lieb et Mattis pour le modèle d'Ising à deux dimensions[Lieb 65] et par suite appliquée à des systèmes quantiques dans une dimension spatiale (par exemple, [Schotte 69, Luther 75, Coleman 75, Mandelstam 75] et une multitude d'applications plus tard). Nous allons nous limiter à une bosonisation abélienne ; le cas non-abélien a été abordé par Witten[Witten 84].

L'utilité de la bosonisation pour un problème de matière condensée vient du fait que la chaîne de spin 1/2 est critique (sans masse), avec une relation de dispersion rélativiste $\omega = ck$ pour les excitations à basse énergie, et peut être

[1] Notre notation suivit [Shankar 92].

transformée dans un système des fermions qui gardent ces propriétés. On est alors arrivé à un système qui peut être bosonisé. Par exemple, le modèle XY devient un modèle de fermions sans spin et masse rélativistes sans interaction.

La procédure à suivre est la suivante : en utilisant la transformation de Jordan-Wigner[Jordan 28], le problème de spins 1/2 est transformé dans un problème de fermions sans spin dans un système avec demi-remplissage : La relation entre les opérateurs de spin et les fermions sans spin c sur une chaîne est donnée par

$$\begin{aligned} S_n^- &= e^{i\pi \sum_{j=1}^{n-1} c_j^\dagger c_j} c_n && (7.2)\\ S_n^+ &= c_n^\dagger e^{i\pi \sum_{j=1}^{n-1} c_j^\dagger c_j} && (7.3)\\ S_n^z &= c_n^\dagger c_n - \frac{1}{2} && (7.4) \end{aligned}$$

et la relation inverse par

$$\begin{aligned} c_n &= e^{i\pi \sum_j^{n-1} S_j^+ S_j^-} S_n^- && (7.5)\\ c_n^\dagger &= S_n^+ e^{-i\pi \sum_j^{n-1} S_j^+ S_j^-} && (7.6) \end{aligned}$$

Le demi-remplissage est donnée par

$$0 = \sum_n S_n^z = \sum_n c_n^\dagger c_n - \frac{N_{site}}{2} = N - \frac{N_{site}}{2}, \qquad (7.7)$$

où on utilise le résultat que l'état fondamental d'une chaîne antiferromagnétique est un singlet[Marshall 55, Lieb 62].

Ces fermions ne sont pas rélativistes en général ; on les exprime par deux espèces des fermions rélativistes, qui se déplacent sur la chaîne dans les deux directions avec une impulsion autour l'impulsion de Fermi $k = \pm\pi/2$ (pour le cas de demi-remplissage) avec une largueur de bande $\Lambda \ll k_F$ (approximation de basse énergie) :

$$\begin{aligned} c_{\sigma,n} &= e^{-ik_F n} \int_{-k_F-\Lambda}^{-k_F+\Lambda} c_{\sigma,k} e^{i(k+k_F)n} \frac{dk}{2\pi} + e^{ik_F n} \int_{k_F-\Lambda}^{k_F+\Lambda} c_{\sigma,k} e^{i(k-k_F)n} \frac{dk}{2\pi}\\ &= e^{-ik_F n}\psi_{\sigma,R}(n) + e^{ik_F n}\psi_{\sigma,L}(n) && (7.8) \end{aligned}$$

Si l'on utilise cette expression et on l'insère dans un Hamiltonien fermionique, on obtient parmi les produits d'opérateurs fermioniques rélativistes quelques-uns accompagnés par des facteurs rapidement oscillantes ($e^{ik_F x}$, $e^{2ik_F x}$, etc.), ces expressions sont négligées sauf si le facteur est $e^{4ik_F x}$, qui est 1 pour le cas de demi-remplissage (hors de demi-remplissage, l'expression accompagnante serait jetée aussi). L'Hamiltonien alors trouvé est bosonisé en utilisant les règles de traduction de la bosonisation, données par

$$\begin{aligned}\psi_{L,R}(x) &\hat{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{\pm i\sqrt{4\pi}\phi_{L,R}(x)} \\ (\text{Fermi}) &\hat{=} (\text{Bose})\end{aligned} \tag{7.9}$$

α est un cut-off ultraviolet, typiquement de l'ordre de la constante du réseau. Remarquons que pour des produits d'opérateurs identiques qui agissent sur le même site ces expressions ne peuvent pas utilisées, à cause des problèmes d'ordre normal : Nous avons aussi besoin de

$$: \psi^\dagger_{L,R}(x)\psi_{L,R}(x) := \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{\partial \phi_{L,R}(x)}{\partial x} \tag{7.10}$$

L'ensemble de ces expressions suffit pour ce qui suit, et nous n'entrons pas ici dans une discussion des conditions de validité. Dans l'étude de l'Hamiltonien nous allons nous limiter à une analyse dimensionnelle des opérateurs, qui permet déjà de tirer l'essentiel de l'information sur la nature des différentes phases du système.

Pour la bosonisation des deux chaînes, nous introduisons deux ensembles d'opérateurs fermioniques sans spin, pour la première et la deuxième chaîne, $c_\uparrow$ et $c_\downarrow$, qui anticommutent entre eux, afin d'appliquer la transformation Jordan-Wigner[Jordan 28]. Le résultat pour la bosonisation des deux chaînes isolées peut être pris directement de la littérature[Fradkin 91] :

$$H^B = \frac{1}{2}(1+\frac{\gamma}{\pi})\int dx[\Pi^2(x) + (\partial_x\phi)^2(x) - \frac{4\gamma}{\pi^2\alpha^2}\cos\sqrt{\frac{16\pi}{1+\frac{2\gamma}{\pi}}}\phi], \tag{7.11}$$

$\phi \equiv \phi_\uparrow, \phi_\downarrow$ pour la première, deuxième chaîne. Π est l'impulsion canonique conjugée de ϕ.

Le terme d'interaction peut être séparé dans un *terme d'échange* (en $J_\perp$) et un *terme d'interaction* (en $J^z_\perp$). Considérons d'abord le terme d'interaction $V_1 = J^z_\perp \sum_n S^z_{\uparrow,n} S^z_{\downarrow,n}$. L'application de la transformation de Jordan-Wigner donne un modèle des fermions sans spin à demi-remplissage, qui, exprimé par des fermions rélativistes, s'écrit

$$\begin{aligned}V_1 &= aJ^z_\perp \int dx[: j_{0\uparrow} :: j_{0\downarrow} : + (\psi^\dagger_{\uparrow,L}(x)\psi_{\uparrow,R}(x)\psi^\dagger_{\downarrow,R}(x)\psi_{\downarrow,L}(x) + h.c.) \\ &\quad + (\psi^\dagger_{\uparrow,L}(x)\psi_{\uparrow,R}(x)\psi^\dagger_{\downarrow,L}\psi_{\downarrow,R} + h.c.)].\end{aligned} \tag{7.12}$$

Le dernier terme est un terme d'umklapp présent à cause du demi-remplissage ($k_F = \pi/2$). Les flèches indiquent la chaîne, L et R à gauche at à droite. Le courant J_0 est défini par $\psi_R^\dagger\psi_R + \psi_L^\dagger\psi_L$, en omettant les indices de chaîne. La bosonisation donne :

$$\begin{aligned}
V_1 &= aJ_\perp^z \int dx \frac{1}{4\pi}[(\partial_x\phi_\uparrow + \partial_x\phi_\downarrow)^2 - (\partial_x\phi_\uparrow - \partial_x\phi_\downarrow)^2] \\
&+\frac{aJ_\perp^z}{2\pi^2\alpha^2}\int dx \cos\sqrt{4\pi}(\phi_\uparrow - \phi_\downarrow) \\
&+\frac{aJ_\perp^z}{2\pi^2\alpha^2}\int dx \cos\sqrt{4\pi}(\phi_\uparrow + \phi_\downarrow)
\end{aligned} \tag{7.13}$$

Le terme d'echange $V_2 = J_\perp \sum_n \frac{1}{2}(S^+_{\uparrow,n}S^-_{\downarrow,n} + S^-_{\uparrow,n}S^+_{\downarrow,n})$ est plus compliqué à cause de l'operateur "string" dans la représentation fermionique qui ne disparaît pas grâce à la présence de deux ensembles d'opérateurs fermioniques différents. La bosonisation donne $(n = x/a)$:

$$S_n^+ = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}[1 + (-1)^{x/a}\cos\sqrt{4\pi}\phi]e^{i\sqrt{\pi}\tilde{\phi}} \tag{7.14}$$

$$S_n^- = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}[1 + (-1)^{x/a}\cos\sqrt{4\pi}\phi]e^{-i\sqrt{\pi}\tilde{\phi}}, \tag{7.15}$$

avec $\tilde{\phi} = \phi_R - \phi_L$. La contribution dominante à S^+S^- viendra de ces produits d'exponentiels qui, dans le sens du groupe de renormalisation, ont la dimension la plus petite (sont alors les plus pertinents). En passant à la limite comtinue et en restituant les indices de chaîne on trouve

$$V_2 = J_\perp \frac{1}{2\pi a} dx \cos\sqrt{\pi}(\tilde{\phi}_\uparrow - \tilde{\phi}_\downarrow) \tag{7.16}$$

comme la contribution dominante. On rassemble

$$H = H_\uparrow + H_\downarrow + V_1 + V_2 \tag{7.17}$$

et introduit des opérateurs (anti)symétriques sous l'échange des chaînes :

$$\Psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_\uparrow \pm \phi_\downarrow) \tag{7.18}$$

$$\chi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{\phi}_\uparrow \pm \tilde{\phi}_\downarrow) \tag{7.19}$$

En utilisant la relation

$$\partial_x\tilde{\phi}_{\uparrow,\downarrow}(x) = \Pi_{\uparrow,\downarrow}(x). \tag{7.20}$$

pour l'impulsion canonique, on trouve (en mettant $\alpha \to a$, la constante du réseau) :

$$\begin{aligned}
H &= \frac{a}{2}\int dx[(1-\frac{J^z}{\pi})(\partial_x\chi_+)^2+(1+\frac{3J^z}{\pi})(\partial_x\Psi_+)^2+\frac{J_\perp^z}{\pi}(\partial_x\Psi_+)^2] \\
&+ \int dx\frac{J_\perp^z}{2\pi^2 a}\cos\sqrt{8\pi}\Psi_+ \\
&+ \frac{a}{2}\int dx[(1-\frac{J^z}{\pi})(\partial_x\chi_-)^2+(1+\frac{3J^z}{\pi})(\partial_x\Psi_-)^2-\frac{J_\perp^z}{\pi}(\partial_x\Psi_+)^2] \\
&+ \int dx\frac{J_\perp^z}{2\pi^2 a}\cos\sqrt{8\pi}\Psi_- \\
&+ \int dx\frac{J_\perp}{2\pi^2 a}\cos\sqrt{2\pi}\chi_-.
\end{aligned} \tag{7.21}$$

L'Hamiltonien se sépare donc dans deux parts, agissant sur des secteurs différents de l'espace de Hilbert, l'un symétrique et l'autre antisymétrique sous l'échange des deux chaînes : $H = H_+ + H_-$. Nous avons négligé des termes de symétrie mixte comme

$$-\frac{J^z}{2\pi^2 a^2}\cos\sqrt{8\pi}\Psi_+\cos\sqrt{8\pi}\Psi_-, \tag{7.22}$$

comme il y a toujours des opérateurs présents, qui sont plus pertinents dans le sens du groupe de renormalisation. Afin d'écrire l'Hamiltonien dans le forme d'un Hamiltonien bosonique libre conventionnel plus un terme d'interaction on change d'échelle : En introduisant des vitesses de spin

$$c_+ = 1+\frac{J^z}{\pi}+\frac{J_\perp^z}{2\pi} \tag{7.23}$$

$$c_- = 1+\frac{J^z}{\pi}-\frac{J_\perp^z}{2\pi}. \tag{7.24}$$

et en changeant l'échelle des opérateurs (anti)symétriques comme

$$\sqrt{c_{\Psi\pm}}\Psi_\pm \to \Psi_\pm \tag{7.25}$$

$$\sqrt{c_{\chi\pm}}\chi_\pm \to \chi_\pm, \tag{7.26}$$

avec

$$c_{\Psi\pm} = 1+\frac{2J^z}{\pi}\pm\frac{J_\perp^z}{2\pi} \tag{7.27}$$

$$c_{\chi\pm} = 1-\frac{2J^z}{\pi}\mp\frac{J_\perp^z}{2\pi}. \tag{7.28}$$

on trouve, en mettant $a = 1$,

$$H_+ = \frac{1}{2}c_+\int dx[(\partial_x\chi_+)^2+(\partial_x\Psi_+)^2+\frac{J_\perp^z}{\pi^2 c_+}\cos\sqrt{\frac{8\pi}{c_{\Psi+}}}\Psi_+] \tag{7.29}$$

$$H_- = \frac{1}{2}c_- \int dx[(\partial_x\chi_-)^2 + (\partial_x\Psi_-)^2 + \frac{J_\perp^z}{\pi^2 c_-}\cos\sqrt{\frac{8\pi}{c_{\Psi_-}}}\Psi_- \tag{7.30}$$
$$+\frac{J_\perp}{\pi^2 c_-}\cos\sqrt{\frac{2\pi}{\chi_-}}\chi_-]$$

Les relations de changement d'échelle conservent, pour des *petites* interactions, les relations de commutation entre les champs et les impulsions canoniques.

Pour l'analyse de cet Hamiltonien, considérons d'abord la limite de validité de la bosonisation, identifié conventionnellement avec la transition vers une phase ferromagnétique. Un critère est donné par un signe négatif da la vitesse de spin dans un des deux Hamiltoniens H_+ ou H_-. La première condition, $c_+ < 0$, donne

$$J^z < -\pi - \frac{J_\perp^z}{2}. \tag{7.31}$$

Dans ce cas-là, H_+ devient ferromagnétique, ce qui indique qu'il y a de l'ordre ferromagnétique sur les deux chaînes, et que les deux spins sur un barreau de l'échelle ont la même aimantation. Alternativement, $c_- < 0$, donne

$$J^z < -\pi + \frac{J_\perp^z}{2}. \tag{7.32}$$

Dans ce cas-là, H_- devient ferromagnétique ; l'ordre sur les chaînes conduit à des spins sur une marche qui ont l'aimantation opposée. Si l'on dessine un diagramme de phase dans l'espace des couplages interchaînes, on s'aperçoit que pour un J^z plus ferromagnétique la région non-ferromagnétique disparaît ; pour $J^z = \pi$, la partie inférieure du diagramme montre le ferromagnétisme "symétrique", la partie supérieure montre le ferromagnétisme "antisymétrique". La bosonisation indique alors que la transition, dans une première approximation, est *indépendante* de $J_\perp$. Indiquons déjà ici que le mapping du problème dans la limite d'un couplage antiferromagnétque fort entre les chaînes et un couplage fort J^z sur les chaînes sur un modèle d'Insing dans un champ transverse donne

$$H = \frac{J_\perp}{2}\sigma_i^z + \frac{J^z}{2}\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x. \tag{7.33}$$

En utilisant les résultats de Pfeuty[Pfeuty 70], on trouve que dans cette limite la transition de phase est donnée par $|J_\perp| = J^z$ et est déterminée par $J_\perp$ *seulement.* Cette contradiction évidente reste sur les différentes régimes de validité des deux approches. Nous allons interpoler numériquement entre ces deux régimes.

Dans le régime de validité de la bosonisation, on étudie la dimension des opérateurs en H_+ et H_-, en utilisant pour la dimension d la formule $d[\cos\beta\phi] =$

$\beta^2/4\pi$, et trouve

$$\cos\sqrt{\frac{8\pi}{c_{\Psi+}}}\Psi_+ : \qquad d = \frac{2}{1+\frac{2J^z}{\pi}+\frac{J_\perp^z}{2\pi}} \tag{7.34}$$

$$\cos\sqrt{\frac{8\pi}{c_{\Psi-}}}\Psi_- : \qquad d = \frac{2}{1+\frac{2J^z}{\pi}-\frac{J_\perp^z}{2\pi}} \equiv d_1 \tag{7.35}$$

$$\cos\sqrt{\frac{2\pi}{c_{\chi-}}}\chi_- : \qquad d = \frac{1}{2(1-\frac{2J^z}{\pi}+\frac{J_\perp^z}{2\pi})} \equiv d_2. \tag{7.36}$$

Comme un opérateur est pertinent si d est inférieur à la dimension de l'espace-temps, alors 2, on trouve comme condition pour la pertinence :

$$\cos\sqrt{\frac{8\pi}{c_{\Psi+}}}\Psi_+ : \qquad J^z > -\frac{J_\perp^z}{4} \tag{7.37}$$

$$\cos\sqrt{\frac{8\pi}{c_{\Psi-}}}\Psi_- : \qquad J^z > \frac{J_\perp^z}{4} \tag{7.38}$$

$$\cos\sqrt{\frac{2\pi}{c_{\chi-}}}\chi_- : \qquad J^z < \frac{3}{8}\pi + \frac{J_\perp^z}{4}. \tag{7.39}$$

Nous voyons que pour H_- il y a toujours (au moins) un opérateur pertinent. Pour des interactions faibles, nous avons $d_1 = 1/d_2$. Dans un tel cas il faut considérer l'opérateur le *plus* pertinent : les deux opérateurs vont changer d'échelle vers un couplage fort, mais le plus pertinent plus rapidement. La condition pour $d_2 < d_1$ (le terme en χ_- est plus pertinent que le terme en Ψ_-) est

$$J^z < \frac{1}{4}J_\perp^z + \frac{3}{10}\pi. \tag{7.40}$$

Comme les lignes de transition prédites par la bosonisation sont des approximations plutôt mauvaises, nous allons d'abord discuter la nature des phases possibles. En considérant les conditions de pertinence, on trouve *trois* phases possibles : (i) une phase, où les opérateurs en $\cos\Psi_+$ et en $\cos\Psi_-$ sont pertinents ; (ii) une phase, où les opérateurs $\cos\Psi_+$ et $\cos\chi_-$ sont (le plus) pertinents ; (iii) une phase, où seulement l'opérateur $\cos\chi_-$ est (le plus) pertinent.

Les fonctions de corrélations peuvent être écrites en exprimant les opérateurs de spin par les opérateurs bosoniques en utilisant ($n = x/a$) :

$$S_n^z = \frac{a}{\sqrt{\pi}}\partial_x\phi - (-1)^{x/a}\frac{a}{\pi}\cos\sqrt{4\pi}\phi \tag{7.41}$$

et (7.14). On trouve que pour phase (i) les deux champs $\Psi_\pm$ seront constants, la partie non-alternante de l'opérateur S^z disparaîtra et le système montrera de l'ordre antiferromagnétique à grande portée. Cette phase est voisine de la phase (ii) où Ψ_+ et χ_- prendront des valeurs fixes ; en considérant les expressions pour les opérateurs, on voit que cela ne donne pas de l'ordre, mais les termes massifs sont à l'origine de fonctions de corrélations exponentielles ; un gap se développera au-dessus de l'état fondamental. Ceci est le comportement prédit par Haldane pour des chaînes de spin entier isotropes. Effectivement, pour un couplage ferromagnétique fort entre les chaînes, nous obtenons un Hamiltonien effectif pour une chaîne de spin 1. Comme l'ordre est du type Ising, on attend que les exposants du modèle d'Ising bidimensionnel apparaissent pour la transition entre les deux phases. Dans la phase (iii), il n'y a pas d'opérateur pertinent dans H_+ ; comme dans phase (ii), les chaînes seront désordonnés. Or, le comportement des fonctions de corrélation est différent. De H_+, il y aura des contributions aux fonctions de corrélations suivant des lois de puissance, le spectre sera alors sans gap et la phase *critique.* En utilisant ces résultats et ceux sur

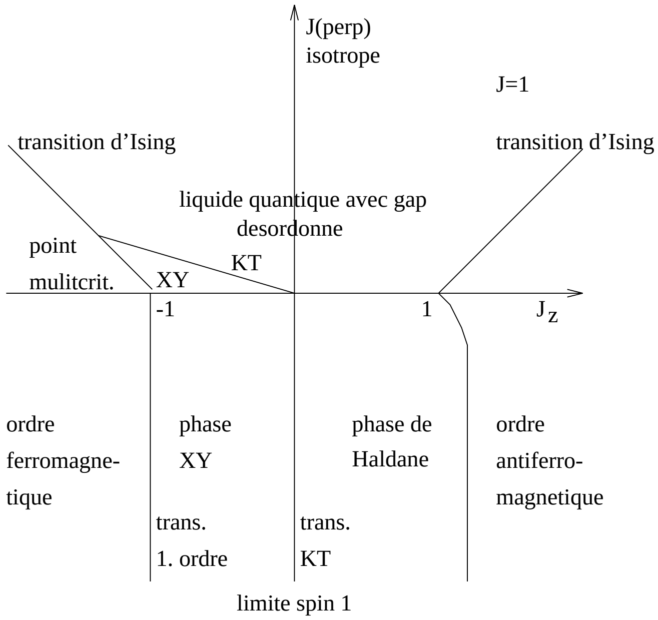

FIG. 7.2: *Diagramme de phase schématique pour deux chaînes de spin 1/2 anisotropes avec un couplage interchaîne isotrope ; d'après [Strong 92] et [Strong 94].*

les limites bien connues (la chaîne de spin 1/2 possède de l'ordre de Néel pour

$J^z > 1$, une transition continue du type Ising classique bidimensionnel vers une phase critique désordonnée jusqu'à $J^z = -1$, où il y a une transition du premier ordre vers une phase avec de l'ordre ferromagnétique ; la chaîne de spin 1 a de l'ordre antiferromagnétique pour $J^z \gtrsim 1.2$[Schulz 86b], après une transition du type Ising classique bidimensionnel elle entre dans la phase de Haldane ; pour $J^z = 0$[den Nijs 89] il y a une transition Kosterlitz-Thouless vers une phase désordonnée critique, qui, pour $J^z = -1$, montre une transition de premier ordre vers l'ordre ferromagnétique), Strong et Millis[Strong 92, Strong 94] ont obtenu le diagramme de phase schématique de la figure 7.2. Signalons que nous sommes en désaccord avec leurs résultats sur la ligne de transition entre la phase de Haldane et la phase critique et ont ainsi modifié le diagramme ; il semble qu'ils ignoraient le résultat de den Nijs et Rommelse[den Nijs 89]. Une prédiction interéssante est l'existence d'un point multicritique : la bosonisation prédit que la phase critique existe aussi pour des couplages antiferromagnétiques entre les chaînes pour des couplages J^z ferromagnétiques. Comme cette phase n'existe pas dans la limite du couplage interchaîne fort antiferromagnétique[Pfeuty 70], elle doit se terminer quelque part dans un point multicritique.

7.2 Résultats numériques

7.2.1 Le gap dans la limite d'un couplage faible entre les chaînes

Une question déjà discutée est le comportement du spectre pour un couplage faible entre les deux chaînes $J_\perp = J_\perp^z \to 0$ (ici, nous ne considérons que des couplages isotropes entre les chaînes) pour deux chaînes de spin 1/2 *critiques* avec une anisotropie antiferromagnétique ($0 \leq J^z \leq 1$). La bosonisation prédit que le système couplé possède un gap pour tous les couplages interchaînes non-nuls : les opérateurs Ψ_+ et χ_- sont toujours pertinents, mais disparaîssent exactement pour des chaînes libres. L'utilisation de la méthode Monte-Carlo et des diagonalisations exactes est problématique pour des couplages très faibles ; encore il faut que les résultats du DMRG que nous allons présenter soient soumis à une discussion critique des effets artificiels possibles.

Le choix du DMRG était encore une fois déterminé par le fait que cette méthode permet de considérer des chaînes plus longues que toutes les autres méthodes en compétition.

Retenons de la discussion du gap de la chaîne de spin 2, que les gaps sont systématiquement surestimés, et qu'une erreur finie *positive* est ajoutée à chaque étape, de telle manière qu'un gap qui decroît de façon monotone commence à remonter. Ce problème, déjà très génant dans ce cas-là, est amplifié ici par le fait que l'erreur de troncation $\rho_1(M)$, qui est proportionnel à l'erreur ajouté au gap par étape, augmente dramatiquement pour $J_\perp \to 0$, où le gap est supposé de s'annuller. Ceci peut être compris en considérant que, dans la limite d'un couplage fort entre les deux chaînes, les flucutations sur les deux chaînes sont fortement corrélées. *Une* chaîne "effective" est décrit dans une base de M états. Dans la limite du couplage faible, les chaînes agissent (presque) indépendamment. Si l'on regarde la limite sans interaction, la fonction d'onde de l'état fondamental est donnée par

$$\Psi = \psi_1 \otimes \psi_2, \tag{7.42}$$

le produit de deux fonctions d'onde ψ_i d'une chaîne isolée de spin 1/2. Les M états deviennent alors la base d'un espace de produit, et effectivement de l'ordre de $\sqrt{M}$ états décriront chaque chaîne. La chaîne de spin 1/2 peut être traitée très précisement pour M plus grand qu'environ 30[White 92b]. Si, dans notre problème, nous considérons $M \approx 100$, nous retenons effectivement environ 10 états pour chaque chaîne dans la limite du couplage faible. Pour $M = 10$, même la chaîne de spin 1/2 n'est pas calculée très précisement[White 92b, White 93b]. Nous trouvons un bon accord entre nos erreurs de troncation pour des couplages entre chaînes très faibles et celles pour une chaîne des spin 1/2 décrit par $\sqrt{M}$ états.

Pour $M \approx 100$, dans notre limite, les erreurs de troncation sont de l'ordre 10^{-5} ; les erreurs pour les énergies par site sont typiquement de l'ordre 10 (pour l'état fondamental) ou 20 fois (pour la première excitation) plus grand ; pour une chaîne de longueur 2×100, l'erreur pour le gap est de l'ordre 10^{-2}. En même temps, Barnes[Barnes 93] a trouvé pour $J_\perp = 0.2$ et $J^z = 1$ un gap de l'ordre 0.07(3). En supposant un comportement linéaire du gap pour $J^z = 1$ comme $\Delta \approx 0.5 J_\perp$ pour $J_\perp > 0$, qui semble bien obéi au moins pour des couplages forts, on peut estimer que pour $J_\perp = 0.05$ on a à démontrer l'existence d'un gap de l'ordre 0.025, ce qui, prenant en compte une vitesse des ondes de spin $\pi/2$ (que nous prenons de la chaîne isolée[des Cloizeaux 62]), donne une longueur de corrélation de l'ordre 60. D'après nos résultats pour la chaîne de spin 2, on devrait calculer des chaînes d'une longueur $L > 200$ afin d'établir la valeur du gap, ce

$J_\perp$	Δ
-0.05	0.0206
-0.10	0.0174
-0.20	0.0141
-0.50	0.0096
-1.00	0.0070

TAB. 7.1: *Gap pour* $L = 2 \times 100$*,* $M = 75$*,* $J^z = 0.5$ *en fonction de* $J_\perp$ *pour des chaînes ouvertes* sans modification.

qui double au moins l'erreur du gap proposée, enfin excédant la quantité que l'on cherche. Les calculs pour la chaîne de spin 1/2 critique nous indiquent, que, afin de réduire substantiellement l'erreur, nous devrions augmenter $\sqrt{M}$ à environ 20, alors $M \approx 400$, ce qui est largement au-dessus de possibilités présentes.

Il ne nous était alors pas possible d'établir un comportement *quantitatif* du gap pour les couplages $J_\perp$ faibles, mais nous avons essayé d'estimer soigneusement l'erreur en faisant la comparaison des résultats pour $M = 60, 80, 100, 120$ pour des chaînes d'une longueur jusqu'à 2×140, afin de voir si un spectre sans gap peut être exclu sans doute pour un couplage $J_\perp = \pm 0.05$. Signalons que cette procédure se substitue à la seule approche valable, d'extrapoler d'abord toutes les énergies en M et après en L.

Nous calculons le gap comme la différence en énergie des états fondamentaux dans les sous-espaces $S^z_{total} = 0$ et $S^z_{total} = 1$; comme toujours, nous considérons des chaînes ouvertes. Dans le cas d'un couplage *ferromagnétique* entre les chaînes cette approche doit être modifiée : elle donne des résultats qui indiquent un état fondamental dégénéré pour tous les couplages (négatifs) interchaînes. Les résultats dans le tableau 7.1 sont les gaps pour des chaînes couplées de longueur $L = 2 \times 100$, calculé pour $M = 75$ et $J^z = 0.5$. Les résultats n'ont pas été extrapolés et sont alors des surestimations. L'erreur due à M fini est de l'ordre 0.015 pour le premier et de l'ordre 0.001 pour le dernier résultat. Les longueurs de corrélation plus longues pour couplages faibles mènent à une baisse plus lente du gap restant.

Ce comportement peut être compris en considérant la limite du couplage fort, la chaîne de spin 1. Il est connu[Affleck 87a, Affleck 88, Kennedy 90, Hagiwara 90, Glarum 91, White 92b] que des chaînes de spin 1 ouvertes possèdent un triplet d'excitation très bas qui dégénère avec l'état fondamental singlet dans la limite thermodynamique. Nous avons déjà discuté (chap. 4) que ce comportement est due à des états des spin 1/2 effectifs libres aux deux bords de la chaîne, qui interagissent faiblement à travers la chaîne, et forment un singlet ou triplet. Ce comportement peut être compris dans le modèle AKLT. Il est maintenant généralement accepté que le modèle AKLT est générique pour la phase de Haldane (désordonnée et avec gap) de la chaîne de spin 1. Nos résultats montrent *qu'il est aussi générique pour la phase de Haldane des chaînes couplées dans la limite des couplages faibles.* On peut enlever la dégénérescence en ajoutant un spin 1/2 à chaque bout de la chaîne couplée et le couplant aux deux premiers (derniers) spins de l'échelle avec un couplage suffisamment élevé (voir notre discussion de la chaîne de spin 2). Maintenant, le gap peut être trouvé suivant l'approche standard (chap. 5.1). Pour un couplage *ferromagnétique* $J_\perp = -0.05$ et $J^z = 1$, nous trouvons

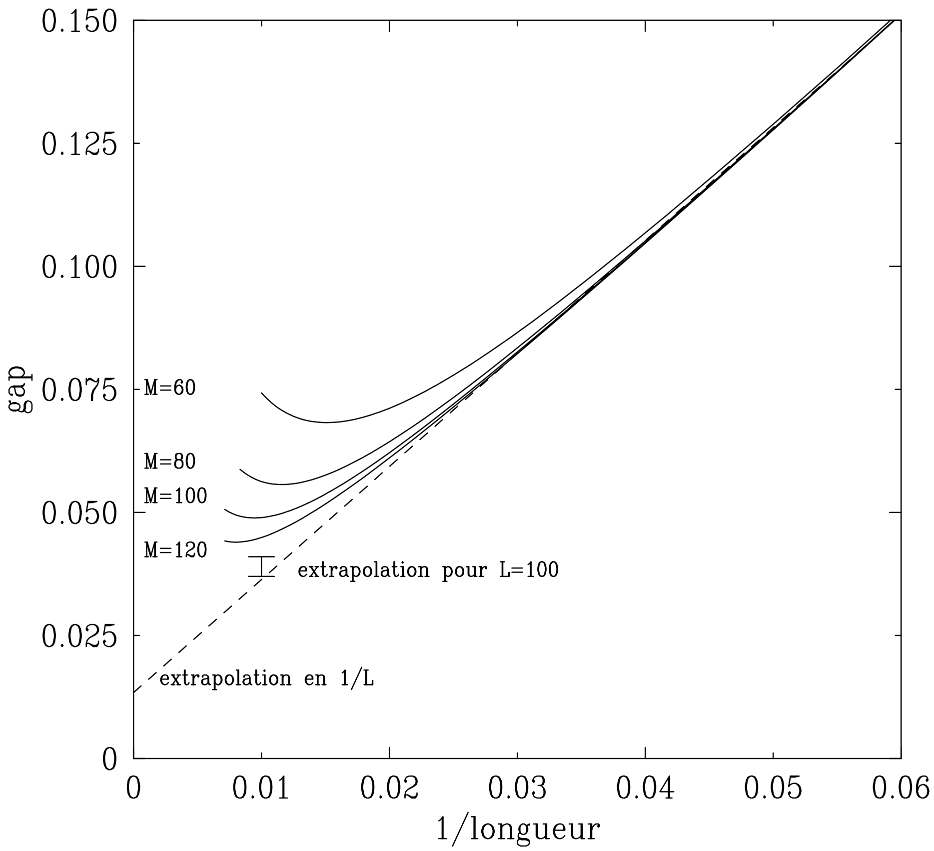

FIG. 7.3: *Gap en fonction de M et de la longueur L pour deux chaînes de spin 1/2 isotropes antiferromagnétiques couplées par $J_\perp = -0.05$. Ligne interrompue : extrapolation en L^{-1} ; barre d'erreur : gap extrapolé vers $M = \infty$ pour $L = 100$.*

les courbes du gap données dans la figure 7.3 pour $M = 60, M = 80, M = 100$

M	E_0	$\rho_1(M)$	E_1	$\rho_1(M)$
60	-87.93567	0.45×10^{-4}	-87.86138	0.80×10^{-4}
80	-87.94471	0.22×10^{-4}	-87.88843	0.40×10^{-4}
100	-87.94824	0.13×10^{-4}	-87.89928	0.22×10^{-4}
120	-87.95025	0.83×10^{-5}	-87.90535	0.13×10^{-4}
∞	-87.953(1)		-87.914(1)	

TAB. 7.2: *Energies et érreurs de troncation en fonction de M pour l'état fondamental et la première excitation pour $J_\perp = -0.05$.*

et $M = 120$, en utilisant l'algorithme de longueur infinie. La convergence des courbes pour $M \to \infty$ est évidente. Si l'on extrapole la courbe du gap en L^{-1} vers $L \to \infty$, on obtient une borne inférieure du gap comme ≈ 0.014. Il reste à déterminer si la petite inflection est due à l'erreur de troncation où au comportement du gap pour des longueurs finies. Pour $L = 2 \times 100$ nous obtenons les énergies données dans le tableau 7.2. Le résultat extrapolé est obtenu en utilisant une dépendence quasilinéaire de l'erreur des énergies E de l'erreur de troncation $\rho_1(M)$. Nous trouvons un gap extrapolé $\Delta = 0.039(2)$ pour $L = 2 \times 100$, ce qui est au-dessus de l'extrapolation linéaire du gap. L'inflection de la courbe est donc en partie physique. Nous attendons que, comme pour la chaîne de spin 1, les excitations des chaînes de spin 1/2 couplées ferromagnétiquement soient bien décrites par le modèle σ non-linéaire et le modèle AKLT, comme est indiqué par les excitations à très basse énergie même pour des couplages interchaînes très petits. Dans ce cas-là, la relation de dispersion pour des basses énergies est celle d'un particule massif rélativiste. Comme la chaîne est ouverte, l'impulsion n'est pas un bon nombre quantique et on s'attend à la même équation du gap que pour une chaîne de spins entiers :

$$\Delta(L) = \Delta_\infty + \frac{c^2\pi^2}{2\Delta_\infty L^2} + O(L^3) \tag{7.43}$$

et alors un passage à un comportement parabolique pour $L \gg \xi$[Sørensen 93]. Supposant que pour des petits couplages la vitesse des ondes de spin est essentiellement celle d'une chaîne isolée $c \approx \pi/2$, on peut estimer que pour un gap ≈ 0.025 on trouve $\xi \approx 60$ cohérent avec la très petite déviation d'un comportement du gap en L^{-1} pour les L considérés.

Le gap augmente pour des couplages interchaînes plus forts et sature pour la limite d'un couplage infini vers le gap de la chaîne de spin 1, $\Delta = 0.41050(2)$. Cette convergence est lente : nous trouvons pour $J_\perp = 0.5$ $\Delta = 0.106(2)$ et pour $J_\perp = 1.0$ $\Delta = 0.137(2)$.

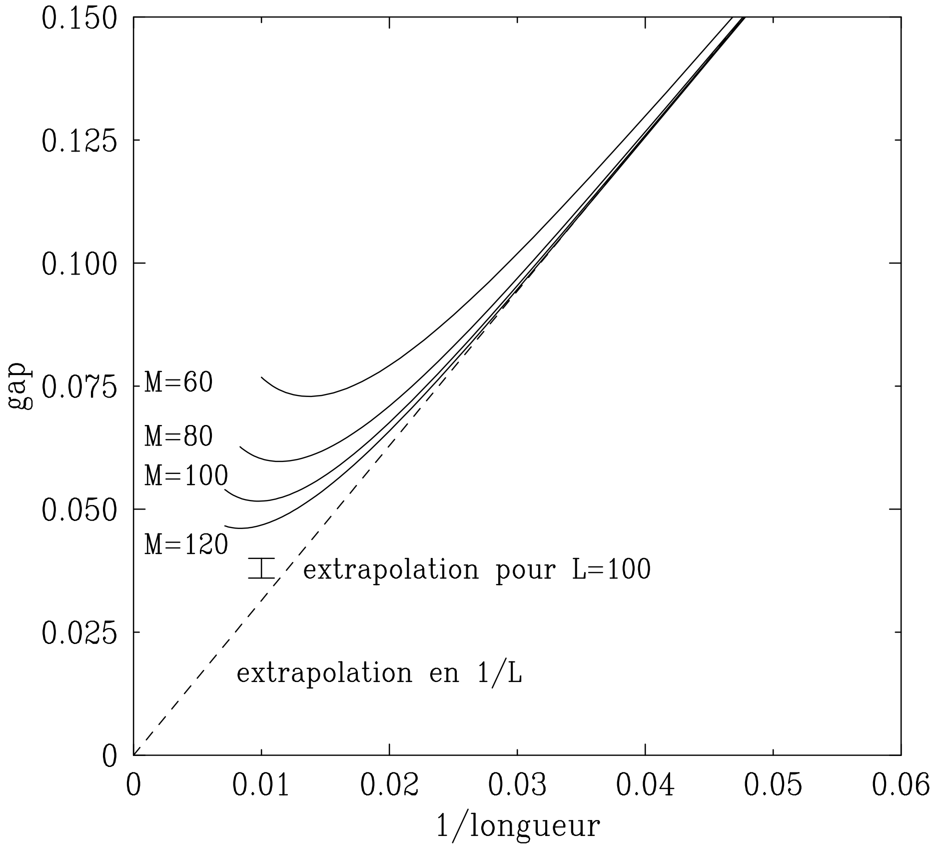

FIG. 7.4: *Gap en fonction de M et de la longueur L pour deux chaînes de spin 1/2 isotropes antiferromagnétiques couplées par $J_\perp = 0.05$. Ligne interrompue : extrapolation en L^{-1} ; barre d'erreur : gap extrapolé vers $M = \infty$ pour $L = 100$.*

Pour un couplage *antiferromagnétique* $J_\perp = 0.05$ nous trouvons pour $M = 60, M = 80, M = 100$ et $M = 120$ les courbes du gap de la figure 7.4. Encore une fois, la convergence des courbes pour $M \to \infty$ est évidente. Une extrapolation linéaire de la partie convergée de la courbe du gap vers $L \to \infty$ donne un gap nul. Afin d'établir si le gap est non-nul, nous extrapolons les résultats pour le gap pour $L = 2 \times 100$ vers $M = \infty$. Ainsi, nous démontrons une courbure vers le haut et alors un gap non-nul dans la limite thermodynamique pour $J_\perp = 0.05$. Les résultats sont donnés dans le tableau 7.3. Pour l'extrapolation, nous avons encore une fois utilisé la linéarité de l'erreur en $\rho_1(M)$. Pour $L = 2 \times 100$, nous trouvons donc un gap égal à 0.038(2), bien au-dessus de l'interpolation linéaire vers un gap nul. *Nous concluons alors l'existence d'un gap non-nul pour des petits couplages antiferromagntíques entre chaînes.*

M	E_0	$\rho_1(M)$	E_1	$\rho_1(M)$
60	-88.37658	0.47×10^{-4}	-88.29979	0.78×10^{-4}
80	-88.38652	0.23×10^{-4}	-88.32628	0.37×10^{-4}
100	-88.39087	0.13×10^{-4}	-88.33923	0.22×10^{-4}
120	-87.39285	0.83×10^{-5}	-88.34608	0.14×10^{-4}
∞	-88.396(1)		-88.358(1)	

TAB. 7.3: *Energies et érreurs de troncation en dépendance de M pour l'état fondamental et la première excitation pour* $J_\perp = +0.05$.

En accord avec d'autres auteurs[Barnes 93, Barnes 94] nous trouvons une dépendence presque linéaire du gap en $J_\perp$ avec $\Delta \approx 0.5 J_\perp$ pour des couplages interchaînes de force intermédiaire. Pour $J_\perp = 1.0$, nous trouvons une énergie fondamentale $E_0 = -0.57809$, un gap $\Delta = 0.506(1)$ et une longueur de corrélation $\xi = 3.2(1)$ (figure 7.5). Ces résultats sont en accord avec ceux de White, Noack et Scalapino[White 94], ce que nous prenons comme vérification de notre programme. De ces résultats on peut conclure que pour des couplages intermédiaires la vitesse des ondes de spin change seulement peu de sa valeur pour des chaînes isolées : pour $J_\perp = 1$, $c = 1.60$ par rapport à $c = 1.57$ pour la chaîne de spin 1/2[des Cloizeaux 62]. Nous analysons l'excitation comme une excitation d'un barreau de l'échelle de son état singlet dans son état triplet, ce qui donne l'échelle d'énergie $J_\perp$ pour le gap. L'excitation alors se déplace sur une chaîne seulement, comme un défaut qui se propage, ce qui donne une vitesse de spin près de celle pour la chaîne isolée (voir aussi [Barnes 93]). Cette explication est en accord avec l'image d'un *valence bond* résonant proposée par White, Noack et Scalapino[White 94] et les résultats de Barnes et al. utilisant un dévéloppement de couplage fort entre les chaînes[Barnes 93].

7.2.2 Identification des phases

Le DMRG a permis d'identifier toutes les phases prédites par la bosonisation, bien que dans un cas l'identification est seulement indirecte. Nous avons considéré plusieurs centaines des points du diagramme de phase, en calculant des chaînes jusqu'à $L = 2 \times 200$ en retenant $M = 120$ états. Nous avons observé que le DMRG donne des résultats assez précis au milieu des phases, ou autrement dit, loin des lignes de transition. Les points intéressants ont déjà été abordés dans la section précédente. Les résultats ont, en somme toute, été assez décévants en ce qui concerne la localisation des lignes de transition : nous ne pouvons pas,

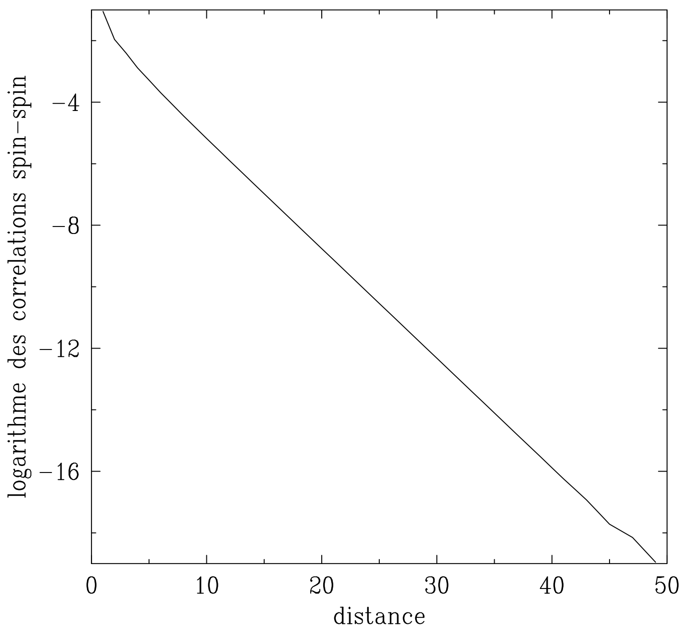

FIG. 7.5: *Logarithme des corrélations spin-spin pour deux chaînes de spin 1/2 isotropes antiferromagnétiques couplées par un couplage isotrope antiferromagnétique égal au couplage sur les chaînes. Longueur $L = 50$, $M = 50$.*

à l'exception des résultats présentées dans la section prochaine, améliorer les prédictions de la bosonisation. En particulier, le DMRG n'était pas capable de donner de l'information sérieuse sur la transition du type Kosterlitz-Thouless vers la phase critique. D'un côté, le gap se dégage très lentement et les erreurs de troncation sont très élevées même pour des M assez grands. Même pire, on tombe sur une situation *où le DMRG n'est plus vraiment applicable :* Dans la phase critique, le nombre des itérations de Lanczos a chaque étape explose avec la longueur de la chaîne (figure 7.6), avant de saturer pour des grands L à cause des effets de la renormalisation : on recalcule toujours le même système pour L grand. Nous supposons que cet effet est dû à une présence d'un spectre *continu* au-dessus de l'état fondamental. Comme déjà expliqué dans chapitre 2, la seule présence d'une densité d'états divergente n'est pas suffisante pour provoquer un tel effet. Pour L plus grand, les états deviennent de plus en plus denses, ce qui fait la diagonalisation de plus en plus difficile, avant l'effet de saturation évoquée ci-dessus. Or, la diagonalisation de Lanczos peut avoir des instabilités numériques pour un nombre d'iterations trop grand. Les résultats obtenus sont alors douteux,

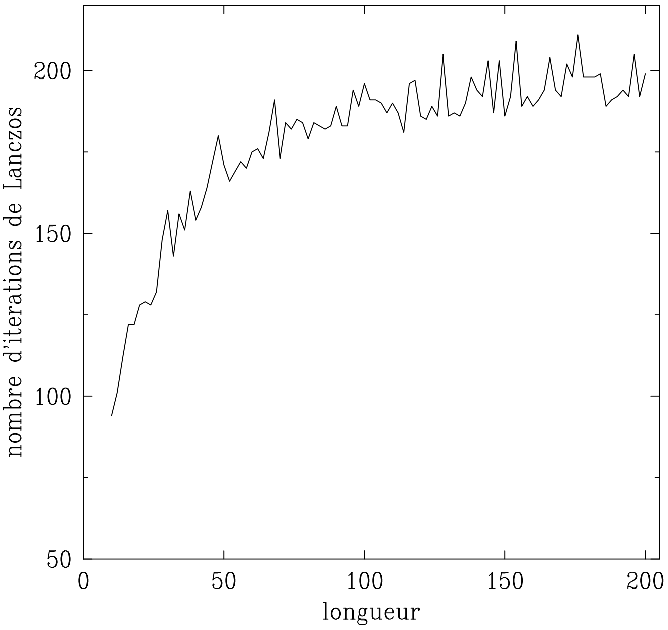

FIG. 7.6: *Nombre d'iterations de Lanczos par étape en fonction de la longueur L pour $M = 55$, pour deux chaînes de spin 1/2 couplées dans la phase critique : $J^z = -0.3$, $J_\perp = J_\perp^z = -4$.*

et le temps de calcul devient en tout cas prohibitif.

7.2.3 La transition de phase vers le ferromagnétisme

Il est évident qu'il est difficile de localiser la position exacte d'une ligne de transition par le DMRG, d'un côté à cause de l'augmentation en M nécessaire afin de décrire les fluctuations fortes et de l'autre côté à cause des conditions de bord ouvertes qui interdisent l'application des méthodes d'échelle de taille finie. Nous avons trouvé une seule transition de phase où déjà pour petit M l'erreur de troncation était très petite et où on peut alors concentrer sur l'extrapolation des résultats en L dans un espace de paramètres assez grand. Il s'agit de la transition vers le ferromagnétisme dans la partie gauche du diagramme de phase, où déjà pour $M = 50$ l'erreur de troncation était typiquement inférieur à 10^{-9} ; pour la transition vers le antiferromagétisme, nous trouvons, pour le même M, typiquement des erreurs de troncation de l'ordre 10^{-5}. On joue de l'avantage que les fluctuations ferromagnétiques sont décrites par extrêmement peu d'états dans l'espace de Hilbert dans la base S_i^z. Ceci réduit le nombre d'états nécessaires pour une bonne description de la phase désordonnée, dont les corrélations sont déjà dominées par la phase ferromagnétique.

Nous allons examiner la transition de phase vers le ferromagnétisme pour des couplages interchaînes générales anisotropes $J_\perp, J_\perp^z$. Suivant les prédictions de la bosonisation, nous avons à distinguer entre deux cas : (i) $J_\perp^z < 0$ (ferromagnétique) : une transition de première ordre d'une phase ferromagnétique avec des spins ferromagnétiquement couplés sur une marche de l'échelle vers une phase critique dite XY ; (ii) $J_\perp^z > 0$ (antiferromagnétique) : ici on devrait trouver si une transition de première ordre d'une phase antiferromagnétique avec des spins antiferromagnétiquement couplés sur une marche vers la phase critique ou une transition continue dans la classe d'universalité d'Ising dans deux dimensions vers un liquide quantique avec gap.

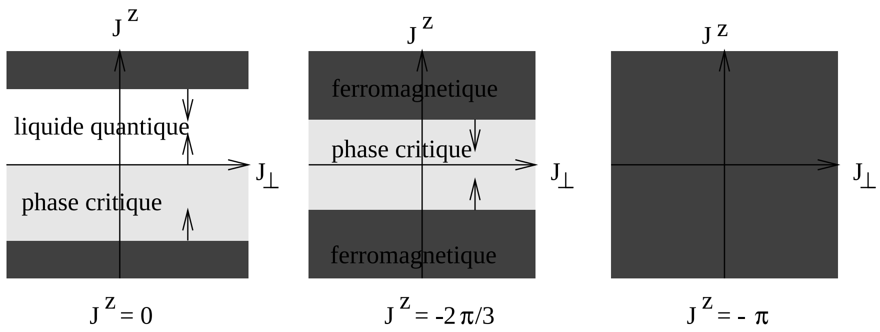

FIG. 7.7: *Représentation schématique du diagramme de phase prédit par la bosonisation pour un couplage anisotrope interchaîne $J_\perp, J_\perp^z$ en fonction d'un couplage J^z ferromagnétique ($J = 1$). Les flèches indiquent le changement des lignes de transition pour un J^z plus ferromagnétique (plus négatif). La phase du liquide quantique disparaît pour des J^z suffisamment négatifs. $+-$ et $++$ indiquent les deux types d'ordre ferromagnétique que l'on trouve. Comme les prédictions sont qualtitatives, les valeurs sur les axes ne sont pas données.*

Avant de présenter les résultats numériques, nous voulons généraliser les résultats analytiques aux couplages interchaînes anisotropes. Pour la bosonisation, nous avons fait cela dans la section 7.1. Utilisant les formules (7.31), (7.32) et (7.37), on trouve les résultats montrés dans la figure 7.7. Recapitulons que pour des *petits* J^z, $J_\perp$ et $J_\perp^z$ on s'attend à que la transition soit déterminée par $J_\perp^z$ seulement. Les deux phases ferromagnétiques font disparaître, pour J^z plus grand, les deux phases désordonnées entre les deux, et la phase avec gap disparaît complètement en faveur de la phase critique. On peut s'attendre que pour $|J_\perp|$ grand (l'Hamiltonien est invariant sous l'opération $J_\perp \to -J_\perp$, comme on peut le voir d'une rotation des spins d'une des deux chaînes par π autour de l'axe z) les lignes de transition s'inclinent afin de donner plus de place aux phases désordonnés favorisées par $J_\perp$, qui échange les spins.

De l'autre côté, pour un couplage interchaîne très fort, on peut obtenir de l'information par un mapping exact. Dans le cas limite d'un couplage très fort ferromagnétique entre les chaînes, les deux spins sur une marche vont former des triplets de spin avec $S^z_{total} = \pm 1, 0$, où, pour un couplage interchaîne anisotrope, l'énergie des états triplet avec $S^z = \pm 1$ est plus grande que celle de l'état triplet $S^z = 0$ de $\frac{1}{2}(J_\perp^z - J_\perp)$. Ceci donne un spin 1 effectif avec une anisotropie axiale $D(S^z)^2$ où $D = \frac{1}{2}(J_\perp^z - J_\perp)$. L'interaction sur les chaînes donne une interaction effective pour une chaîne de spin 1 si $|J_\perp^{(z)}| \gg |J^{(z)}|$:

$$H = \sum_i \frac{1}{2}\frac{J}{2}(S_i^+ S_{i+1}^- + h.c.) + \frac{J^z}{2} S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2}(J_\perp^z - J_\perp)(S^z)^2 \qquad (7.44)$$

Pour un J et J^z donné, la transition de la chaîne de spin 1 d'une phase désordonnée vers le ferromagnétisme dépendra seulement de D. Ceci implique que pour un couplage interchaîne fort on peut s'attendre à une ligne de transition $J^z_{\perp,crit} = J_{\perp,crit} + cst.$, avec une constante en fonction de J^z. Si l'on considère le diagramme de phase pour $S = 1$ en présence des anisotropies D et J^z[den Nijs 89], on trouve qu'il y a deux phases désordonnées qui voisinent la phase ferromagnétique : pour $|J^z|$ petit, il s'agit de la phase XY prédite par la bosonisation, pour $|J^z|$ grand, de la phase de grand D. Dans les deux cas la transition est de première ordre. Pour les J^z que nous avons considérés, la phase désordonnée est la phase XY.

Dans le cas limite d'un couplage interchaîne fort antiferromagnétique, les spins sur une marche sont forcés dans un état de $S^z_{total} = 0$. Nous avons démontré, avec une extension facile d'une démonstration de Strong et Millis[Strong 94], que, dans la limite d'un couplage fort anisotrope entre les chaînes et un J^z fort, l'échelle des spins a un état fondamental où la composante S^z_{total} sur une marche est une quantité conservée et nulle. Dans cette limite, l'échelle de spin peut être écrit comme une chaîne des spins Ising dans un champ magétique transverse, résolu par Pfeuty[Pfeuty 70] :

$$H = \frac{J_\perp}{2}\sigma_i^z + \frac{J^z}{2}\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x, \quad (7.45)$$

où les matrices de Pauli ont été utilisées. $+1$ est l'état triplet et -1 l'état singlet d'un barreau avec aimantation totale 0. Empruntant les résultats de Pfeuty, on attend une transition continue dans la classe d'universalité d'Ising à deux dimensions pour $J^z > J_\perp$ d'une phase paramagnétique (le liquide de spin quantique) vers une phase ferromagnétique. La généralisation du mapping de l'échelle de spin sur le modèle d'Ising pour des couplages *anisotropes* révèle un passage intéressant de la quantité déterminant la transition de phase : alors qu'il s'agit de $J_\perp^z$ dans la limite du couplage faible selon la bosonisation, il s'agit de J^z pour la limite du couplage fort.

L'intérêt d'une étude numérique de cette transition de phase est bien sûr de déterminer la nature précise de ce passage, en particulier dans le régime des couplages interchaînes faibles et moyennes, qui est le cas le plus intéressant du point de vue physique. Nos résultats sont contenus dans la figure 7.8.

Les lignes de transition dans la partie inférieure du diagramme de phase ont été facilement obtenus avec $M = 50$ et des chaînes jusqu'à $L = 2 \times 50$. Nous n'avons pas observé, sauf pour des chaînes très courtes, des effets de taille finie ; la localisation de la transition reste stable pour des longueurs différentes, à cause de la transition de première ordre. Les lignes de transition obéissent bien, dans la limite du couplage interchaîne fort, au comportement prédit ; la limite semble être atteinte déjà pour des couplages assez petits.

Dans la partie supérieure du diagramme de phase, la situation dépend fortement de J^z. Pour J^z plus grand, la phase ferromagnétique apparaît déjà pour des $|J_\perp^z|$ plus petits, comme prédit par la bosonisation. Le régime oú la transition est dominée par $J_\perp^z$ comme prédit par la bosonisation est tellement petit que nous ne pouvons pas l'observer : la ligne de transition devient très vite déterminée seulement par $J_\perp$. Pour $J^z = 1$, la ligne de transition touche le point de couplage nul entre les chaînes à l'origine du diagramme. Pour J^z plus grand, la ligne de transition est d'abord dominée par $J_\perp^z$, comme prédit par la bosonisation, avant de changer abruptement de comportement et d'être dominée par $J_\perp$. Le $J_\perp$ critique est systématiquement plus petit que J^z, la prédiction, mais approche cette valeur pour J^z fort : pour $J^z = 3$, nous trouvons comme $J_\perp$ critique $J_\perp \approx 2.8$. Dans la limite du couplage fort, la nature de la phase désordonnée peut être clairement établie comme la phase du liquide quantique avec gap. C'est la présence de l'interaction désordonnant J qui limite la phase ferromagnétique.

Trouver les lignes de transition dans cette partie du diagramme de phase était plus difficile, à cause des sévères effets de taille finie, alors que pour $M = 60$ des effets de précision finie sur la ligne de transition étaient déjà négligeable (vérifié par des calculs avec plusieurs M). Nous avons considéré des chaînes jusqu'à une longueur $L = 2 \times 200$ afin de localiser la transition avec une précision de 0.1. Les résultats vérifient bien une dépendence linéaire en L^{-1} :

$$J_{\perp,crit}(L) - J_{\perp,crit}(\infty) \propto L^{-1} \tag{7.46}$$

Le comportement en L^{-1} est prédit par l'exposant critique $\nu = 1$ de la transition d'Ising dans deux dimensions ; la théorie des échelles[Barber 83] prédit $J_{\perp,crit}(L) - J_{\perp,crit}(\infty) \propto L^{-1/\nu}$. L'effet des conditions de bords ouvertes est réduit par la grande longueur des chaines et par l'effet que les contributions des bords sont typiquement de l'ordre L^{-1}. Nous ne pouvons donc pas savoir si nos chaînes sont suffisamment longues de faire une échelle de taille finie, où si $\nu = 1$ nous a permis une extrapolation assez précise, accidentellement.

7.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié quelques aspects du diagramme de phase de deux chaînes de spin couplées, par un calcul analytique et par une étude numérique. Retenons que les résultats les plus importants sont que toute la phase de Haldane dans ce modèle est décrit génériquement par le modèle AKLT, et que le comportement critique des chaînes isolées semble cesser dès qu'il y a une petite couplage entre les chaînes. Nous avons aussi localisé les lignes de transition vers le ferromagnétisme et encadré les prédictions contradictoires. Admettons aussi que nous n'avons pas réussi de résoudre le problème du point multicritique conjecturé par [Strong 92, Strong 94] et qu'il nous était impossible d'étudier la ligne de transition entre la phase critique et la phase du liquide quantique ; alors qu'une telle analyse serait possible pour un seul point, il nous est impossible de trouver les moyens informatiques pour attaquer le grand nombre de points dans le diagramme de phase à examiner.

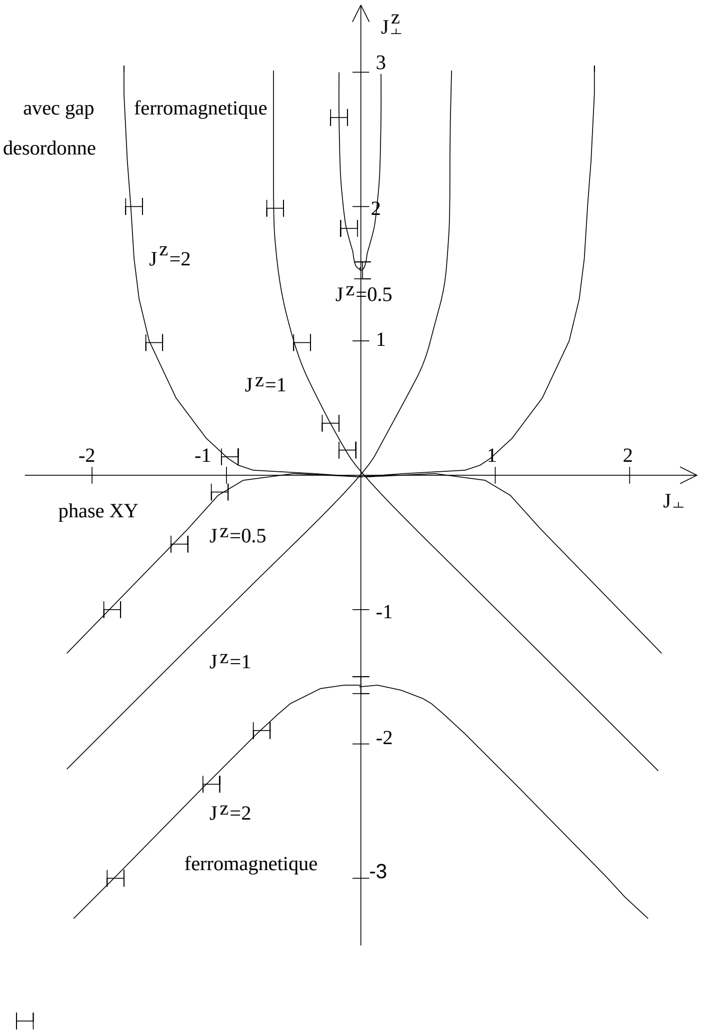

FIG. 7.8: *Lignes de transition entre les phases ferromagnétiques et les phases paramagnétiques pour différents J^z. Pour toutes les lignes, la phase ordonnée est plus proche de l'axe $J^z_\perp$. Les barres d'erreur montrent la précision de localisation des lignes.*

Conclusion

Le travail fondamental[White 92b] de Steve White de 1992, dans lequel il expose l'idée générale de l'application de la matrice de densité aux analyses du groupe de renormalisation dans l'espace réel, se termine sur les mots : "On s'attend à que cette méthode déviendra, dans les années à venir, la méthode numérique dominante pour les systèmes quantiques unidimensionnels." Est-ce que, moins de trois ans après, le DMRG a tenu ses promesses ?

D'abord, clarifions ce qu'on peut attendre d'une méthode numérique. Certainement pas de la compréhension *physique* immédiate à partir des quelques nombres fournis par une telle méthode. Au-delà d'une simple quantification des valeurs de certaines quantités physiques en principe bien comprises, qui peut quand même être très utile quand il s'agit de la comparaison avec l'expérience, la valeur des résultats numériques semble être de permettre de trancher entre des théories qui toutes restent sur des hypothèses plus ou moins douteuses. Le domaine des systèmes fortement corrélés à basse dimension, dans lequel se situe cette thèse, est particulièrement riche en hypothèses et approximations incontrôlables, et une nouvelle théorie analytique, sauf dans le cas extrêmement rare où elle résout un problème pertinent exactement, risque de n'ajouter qu'une nouvelle approximation et de ne pas permettre de trancher. Des méthodes numériques soigneusement appliquées peuvent beaucoup aider à clarifier les choses - même si l'on retrouve seulement ce qui a déjà été prédit par une théorie approximative.

De ce point de vue, le DMRG a aidé de quantifier avec une précision inouie les prédictions dérivés du modèle σ non-linéaire sur la chaîne de spin 1 quantique et d'étudier la nature de son spectre d'excitations à basse énergie, qui ressemblent à des fermions rélativistes massifs. Le lien avec les prédictions du modèle AKLT a été établi. Il faut quand même admettre que ces résultats étaient déjà assez précisement connus par d'autres méthodes. Le DMRG a permis d'établir la différence du comportement d'un nombre pair ou impair des chaînes antiferromagnétiques quantiques couplées. Il a aussi réussi de donner des résultats pour des systèmes fermioniques, que nous n'avons pas abordés ici. Dans plusieurs modèles spéciaux, le DMRG a aidé à clarifier le comportement du système.

La contribution de cette thèse à ces travaux est d'avoir établi le comportement du type AKLT aussi pour la chaîne de spin 2, et d'aller pour la première fois numériquement au-delà du cas $S = 1$ d'une façon qui permet de'avoir des résultats assez précis. Nous avons établi quantitativement la valeur du gap, la longueur de corrélation, l'énergie fondamentale et la valeur non-nulle à grande distance du paramètre d'ordre caché proposé pour $S = 2$, qui, de ce point de vue, est non-trivialement différent de $S = 1$. L'observation que la nature de la transition de la phase de Haldane vers la phase de grand D est tout à fait différente pour $S = 2$ par rapport à $S = 1$ à cause de la présence d'une phase critique intermédiaire nous semble même ouvrir la voie à des nouveaux spéculations théoriques, á pertir du diagramme de phase que nous avons donné pour $S = 2$. Ces résultats là n'ont, jusqu'ici, pas été obtenus par d'autres méthodes numériques et il semble bien que la situation y restera. Ils permettent pour la première fois une sorte de comparaison systématique avec les prédictions analytiques du comportement des chaînes de spins entiers en fonction de S.

Le DMRG nous a permis de clarifier dans un point important le diagramme de phase pour le modèle de spin 1 bilinéaire-biquadratique et de déterminer le rôle du modèle Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki dans ce modèle plus général. En plus, elle nous a fourni les résultats afin d'établir le caractère physique du point AKLT. Ses propriétés assez spéciales (en dehors de sa solubilité exacte) s'insèrent maintenant dans un cadre physique bien compris : il est un point de désordre, qui est caractérisé par le changement de la nature des corrélations du système. Ici, c'était la puissance de la méthode qui nous a permis de sortir les résultats caractéristiques d'un tel point de désordre.

Pour le problème des chaînes de spin 1/2 couplées, le bilan est plutôt mixte. Nous avons établi l'existence du gap pour le problème des couplages faibles entre les chaînes. Le problème des effets artificiels du DMRG se révélait très important. Une étude du diagramme de phase a essentiellement confirmé les prédictions de la bosonisation. Mais, à l'exception de la transition de phase vers le ferromagnétisme, qui se prêtait bien à l'étude, le DMRG montre ses limitations nettement pour les régions d'un diagramme de phase près d'une transition continue. Pour certains spectres, il ne peut pas être appliqué, comme pour la phase critique de ce problème.

Il nous semble que le DMRG a tenu ses promesses en clarifiant plusieurs problèmes qui jusqu'alors échappaient à l'analyse. Son succès nous semble quand même limitée par un certain manque de flexibilité et surtout par la complexité de son application : d'abord, le risque d'erreurs est beaucoup plus éléve que pour des méthodes simple à programmer ; ensuite, l'application elle-même nécessite beaucoup plus de doigté que d'autre méthodes ce qui mène à un certain risque de calculer des résultats systèmatiquement faux sans s'en apercevoir. Le nombre assez élevé de résultats contradictoires publiés dans les derniers mois en forme préliminaire et abordés dans ce mémoire, utilisant quand même la même méthode, en témoigne.

Ce qui resterait à faire du point de vue algorithmique, serait une théorie de l'algorithme, qui apporte une connaissance plus approfondie de son comportement afin d'éviter des erreurs inutiles. Il nous semble qu'une analyse de l'algorithme dans les termes de la théorie Bayesienne de l'analyse des décisions pourrait apporter cette théorie, mais nous n'avons pas pu concretiser cet espoir jusqu'à maintenant.

Bibliographie

[Affleck 86a] I. Affleck, E. Lieb, Lett. Math. Phys. **12**, 57 (1986).

[Affleck 86b] I. Affleck, Nuc. Phys. **B** 265, 409 (1986).

[Affleck 87a] I. Affleck, T. Kennedy, E.H. Lieb, H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).

[Affleck 87b] I. Affleck, F.D.M. Haldane, Phys. Rev. **B 36**, 5291 (1987).

[Affleck 88] I. Affleck, T. Kennedy, E.H. Lieb, H. Tasaki, Commun. Math. Phys. **115**, 477 (1988).

[Affleck 89] I. Affleck, J. Phys. Cond. Matt. **1**, 3047 (1989).

[Affleck 91] I. Affleck, Phys. Rev. **B 43**, 3215 (1991).

[Arovas 88a] D.P. Arovas, A. Auerbach, Phys. Rev. **B 38**, 316 (1988).

[Arovas 88b] D.P. Arovas, A. Auerbach, F.D.M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **60**, 531 (1988)

[Auerbach 88] A. Auerbach, D.P. Arovas, Phys. Rev. Lett. **61**, 617 (1988).

[Auerbach 94] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer, New York, Berlin, 1994.

[Babudjian 82] Babudjian, Phys. Lett. **90A**, 479 (1982) ; Nucl. Phys. **B 215**, 317 (1983).

[Barber 83] M.N. Barber, *Finite-Size Scaling*, dans : Domb, Lebowitz, Vol. 8, Academic Press, London, 1983

[Barber 89] M.N. Barber, M.T. Batchelor, Phys. Rev. **B 40**, 4621 (1989)

[Barnes 93] T. Barnes, E. Dagotto, J. Riera, E.S. Swanson, Phys. Rev. **B 47**, 3196 (1993)

[Barnes 94] T. Barnes, J. Riera, Phys. Rev. **B 50**, 6817 (1994).

[Bethe 31] H.A. Bethe, Z. Phys. **71**, 205 (1931).

[Bishop 93] R.F. Bishop, J.B. Parkinson, Y. Xian, J. Phys. : Cond. Matt. **5**, 9169 (1993).

[Bloch 34] F. Bloch, Helv. Phys. Acta **7**, 385 (1934).

[Botet 83] R. Botet, R. Jullien, Phys. Rev. B **27**, 613 (1983) ; R. Botet, R. Jullien, M. Kolb, Phys. Rev. B **28**, 3914 (1983).

[Bursill 95] R.J. Bursill, T. Xiang, G. Gehring, à paraître dans : J. Phys. : Cond. Matt. (1995)

[Chakravarty 88] S. Chakravarty, B.I. Halperin, D.R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **60**, 1057 (1988).

[Chitra 95] R. Chitra, S. Pati, H.R. Krishnamurthy, D. Sen, S. Ramasheshа, à être publié (1995).

[Chubukov 91] A.V. Chubukov, Phys. Rev. **B 43**, 3337 (1991).

[des Cloizeaux 62] J. des Cloizeaux, J.J. Pearson, Phys. Rev. **128**, 2131 (1962).

[Coleman 75] S. Coleman, Phys. Rev. **D 11**, 2088 (1975).

[Cullum 85] J.K. Cullum, R.A. Willoughby, *Lanczos algorithms for large symmetric eigenvalue computations*, Birkhäuser, Basel, 1985

[Dagotto 92] E. Dagotto, J. Riera, D. Scalapino, Phys. Rev. **B 45**, 5744 (1992)

[Deisz 93] J. Deisz, M. Jarrell, D.L. Cox, Phys. Rev. **B 48**, 10227 (1993).

[Eccleston 94] R.S. Eccleston, T. Barnes, J. Brody, J.W. Johnson, Phys. Rev. Lett. **73**, 2626 (1994).

[Elstner 94] N. Elstner, H.J. Mikeska, Phys. Rev. **B 50**, 3907 (1994).

[Fadeev 81] L. Fadeev, L.A. Tahktajan, Phys. Lett. **85A**, 375 (1981).

[Fath 91] G. Fáth, J. Sólyom, Phys. Rev. **B 44**, 11836 (1991).

[Fath 93a] G. Fáth, J. Sólyom, Phys. Rev. **B 47**, 872 (1993).

[Fath 93b] G. Fáth, J. Sólyom, J. Phys. : Cond. Matter **5**, 8983 (1993).

[Fath 95] G. Fáth, J. Sólyom, Phys. Rev. **B 51**, 3620 (1995).

[Feynman 72] R.P. Feynman, *Statistical Mechanics*, Benjamin, Reading, 1972.

[Fradkin 91] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems*, Addison Wesley, New York, 1991

[Garel 86] T. Garel, J.M. Maillard, J. Phys. C : Solid State Phys. **19**, L505 (1986).

[Gaudin 83] M. Gaudin, *La fonction d'onde de Bethe*, Masson, Paris, 1983

[Girvin 89] S.M. Girvin, D.P. Arovas, Phys. Scr. T **27**, 156 (1989).

[Glarum 91] S.H. Glarum, S. Geschwind, K.M. Lee, M.L. Kaplan, J. Michel, Phys. Rev. Lett. **67**, 1614 (1991).

[Golinelli 92a] O. Golinelli, Th. Jolicœur, R. Lacaze, Phys. Rev. **B 45**, 9798 (1992).

[Golinelli 92b] O. Golinelli, Th. Jolicœur, R. Lacaze, Phys. Rev. **B 46**, 10854 (1992).

[Golinelli 94] O. Golinelli, Th. Jolicœur, R. Lacaze, Phys. Rev. **B 50**, 3037 (1994)

[Hagiwara 90] M. Hagiwara, K. Katsumata, I. Affleck, B.I. Halperin, J.P. Renard, Phys. Rev. Lett. **65**, 3181 (1990).

[Haldane 83a] F.D.M. Haldane, Phys. Lett. **93A**, 464 (1983).

[Haldane 83b] F.D.M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).

[Hatano 93] N. Hatano, M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jap. **62**, 1346 (1993).

[Hatsugai 91] Y. Hatsugai, M. Kohmoto, Phys. Rev. **B 44**, 11789 (1991).

[Hatsugai 92] Y. Hatsugai, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 3856 (1992)

[Hida 91] K. Hida, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 1347 (1991)

[Les Houches 82] J.B. Zuber, R. Stora (ed.), *Recent Advances in Field Theory and Statistical Mechanics*, Les Houches Summer School 1982, session XXXIX.

[Les Houches 89] E. Brézin, J. Zinn-Justin (ed.), *Fields, Strings and Critical Phenomena*, Les Houches Summer School 1988, session XLIX.

[Huang 87] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley, New York, 1987.

[Hulthén 38] L. Hulthén, Ark. Mat. Astr. Phys. **26A**, no. 1 (1938).

[Johnston 85] D.C. Johnston, J.W. Johnson, J. Chem. Soc., Chem. Comm. 1720 (1985).

[Johnston 87] D.C. Johnston, J.W. Johnson, D.P. Goshorn, A.J. Jacobson, Phys. Rev. **B 35**, 219 (1987)

[Jordan 28] P. Jordan, E. Wigner, Z. Phys. **47**, 631 (1928).

[Kaburagi 93] M. Kaburagi, I. Harada, T. Tonegawa, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 1848 (1993).

[Kadanoff 66] L.P. Kadanoff, Physics 2, 263 (1966).

[Kato 94] Y. Kato, A. Tanaka, J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 1277 (1994).

[Kennedy 90] T. Kennedy, J. Phys. : Cond. Matter **2**, 5737 (1990).

[Kennedy 92] T. Kennedy, H. Tasaki, Phys. Rev. **B 45**, 304 (1992).

[Khveshchenko 87] D.V. Khveshchenko, A.V. Chubukov, Sov. Phys. JETP **66**, 1088 (1987).

[Knabe 88] S. Knabe, J. Stat. Phys. **52**, 627 (1988).

[Kubo 92] K. Kubo, Phys. Rev. **B 46**, 866 (1992).

[Lanczos 50] C. Lanczos, J. Res. Natl. Bur. Stand. **45**, 255 (1950).

[Liang 90] S. Liang, Phys. Rev. Lett. **64**, 1597(1990).

[Liang 94] S. Liang, H. Pang, Phys. Rev. **B 49**, 9214 (1994).

[Lieb 61] E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis, Ann. Phys. (N.Y.) **16**, 407 (1961).

[Lieb 62] E. Lieb, D. Mattis, J. Math. Phys. **3**, 749 (1962).

[Lieb 65] E. Lieb, D. Mattis, J. Math. Phys. **6**, 304 (1965).

[Lin 90] H.Q. Lin, Phys. Rev. **B 42**, 6561 (1990).

[Luther 75] A. Luther, I. Peschel, Phys. Rev. **B 12**, 3908 (1975).

[Majumdar 69] C. Majumdar, D. Ghosh, J. Math. Phys. **10**, 1388 (1969).

[Mandelstam 75] S. Mandelstam, Phys. Rev. **D 11**, 3026 (1975).

[Marshall 55] W. Marshall, Proc. Roy. Soc. **A 232**, 48 (1955).

[Mermin 66] D. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).

[Miyashita 93] S. Miyashita, S. Yamamoto, Phys. Rev. **B 48**, 913 (1993).

[Nightingale 86] M. P. Nightingale, H. W. J. Blöte, Phys. Rev. B**33**, 659 (1986).

[den Nijs 89] M. den Nijs, K. Rommelse, Phys. Rev. **B 40**, 4709 (1989).

[Nishiyama 95] Y. Nishiyama, K. Totsuka, N. Hatano, M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. **64**, 414 (1995)

[Ng 92] T.K. Ng, Phys. Rev. **B 45**, 8181 (1992).

[Noack 94a] R.M. Noack, S.R. White, D.J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **73**, 882 (1994).

[Noack 94b] R.M. Noack, S.R. White, D.J. Scalapino, à paraître. (1994)

[Nomura 89] K. Nomura, Phys. Rev. **B 40**, 2421 (1989).

[Nomura 91] K. Nomura and S. Takadu, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 389 (1991).

[Numerical Recipes 86] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, Cambridge, 1986.

[Orbach 58] R. Orbach, Phys. Rev. **112**, 309 (1958).

[Oshikawa 92] M. Oshikawa, J. Phys. : Cond. Matter, **4**, 7469 (1992).

[Paige 72] C.C. Paige, J. Inst. Math. Its Appl. **10**, 373 (1972).

[Papanicolaou 89] N. Papanicolaou, P. Spathis, J. Phys. : Cond. Matter **1**, 5555 (1989) ; J. Phys. : Cond. Matter **2**, 6575 (1990).

[Parkinson 85] J. B. Parkinson, J. C. Bonner, Phys. Rev. **B 32**, 4703 (1985).

[Pfeuty 70] P. Pfeuty, Ann. Phys. (N.Y.) **57**, 79 (1970).

[Qin 95] S.Qin, T.K. Ng, Z.-B. Su, à être publié (1995).

[Reed 94] P. Reed, J. Phys. **A 27**, L69 (1994).

[Renard 87] J. P. Renard, M. Verdaguer, L. P. Regnault, W. A. C. Erkelens, J. Rossat-Mignod, W. G. Stirling, Europhys. Lett. **3**, 945 (1987) ; J. P. Renard, L. P. Regnault, M. Verdaguer, J. Phys. Coll. (Paris), C8-1425 (1988).

[Rujan 82] P. Rujan, J. Stat. Phys. **29**, 231 (1982).

[Sakai 94] T. Sakai, M. Takahashi, J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 755 (1994).

[Scharf 95] R. Scharf, H.J. Mikeska, ... (1995).

[Schotte 69] K.D. Schotte, U. Schotte, Phys. Rev. **182**, 479 (1969).

[Schulz 86a] H.J. Schulz, Phys. Rev. **B 34**, 6372 (1986).

[Schulz 86b] H.J. Schulz, T. Ziman, Phys. Rev. **B 33**, 6545 (1986)

[Schwinger 52] J. Schwinger, *On Angular Momentum*, U.S. Atomic Energy Commission preprint NYO-3071 (1952) ; publié dans : L. Biedenharm, H. van Dam (eds.), *Quantum Theory of Angular Momentum*, Academic Press, New York, 1965.

[Shankar 92] R. Shankar, Summer Course on Low-Dimensional Quantum Field Theories for Condensed Matter Physicists, International Centre for Theoretical Physics, Trieste, 1992.

[Sørensen 90] E. Sørensen, A.P. Young, Phys. Rev. **B 42**, 754 (1990)

[Sørensen 93] E.S. Sørensen, I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **71**, 1633 (1993).

[Stephenson 69] J. Stephenson, Can. J. Phys. **47**, 2621 (1969) ; J. Stephenson, Can. J. Phys. **48**, 1724 (1970) ; J. Stephenson, Can. J. Phys. **48**, 2118 (1970) ; J. Stephenson, J. Math. Phys. **12**, 420 (1970).

[Strong 92] S. Strong, A.J. Millis, Phys. Rev. Lett. **69**, 2419 (1992).

[Strong 94] S. Strong, A.J. Millis, Phys. Rev. **B 50**, 9911 (1994).

[Sutherland 75] B. Sutherland, Phys. Rev. **B 12**, 3795 (1975).

[Takahashi 88] M. Takahashi, Phys. Rev. **B 38**, 5188 (1988).

[Takahashi 89] M. Takahashi, Phys. Rev. Lett. **62**, 2313 (1989).

[Takano 92] M. Takano, Z. Hiroi, M. Azuma, Y. Takeda, Jap. J. of Appl. Phys. Series **7**, 3 (1992)

[Takhtajan 82] L.A. Takhtajan, Phys. Lett. **87A**, 479 (1982).

[Tasaki 91] H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **66**, 98 (1991).

[Tomonaga 50] S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys. **5**, 544 (1950).

[Totsuka 95] K. Totsuka, M. Suzuki, J. Phys. : Cond. Matter, **7**, 1639 (1995).

[Tsvelik 90] A.M. Tsvelik, Phys. Rev. **B 42**, 10499 (1990).

[Uimin 70] G.V. Uimin, JETP Lett. **12**, 225 (1970).

[Watanabe 93] H. Watanabe, K. Nomura, S. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 2845 (1993)

[White 92a] S.R. White, R.M. Noack, Phys. Rev. Lett. **68**, 3487 (1992).

[White 92b] S.R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).

[White 93a] S.R. White, D.A. Huse, Phys. Rev. **B 48**, 3844 (1993).

[White 93b] S.R. White, Phys. Rev. **B 48**, 10345 (1993).

[White 94] S.R. White, R.M. Noack, D.J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **73**, 886 (1994).

[Wilson 75] K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).

[Witten 84] E. Witten, Comm. Math. Phys. **92**, 455 (1984).

[Xian 93] Y. Xian, J. Phys. **C 5**, 7489 (1993).

[Xiang 93] T. Xiang, G. Gehring, Phys. Rev. **B 48**, 303 (1993).