



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN

Mémoire

Présentée à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

MASTER EN PHYSIQUE

Option : Physique théorique

Par :

Khelifi Okacha

Sous la direction de Dr. Mohamed Mebrouki

Sur le thème

Application de la méthode de renormalisation par la matrice densité à une chaîne de spins dans le cadre du modèle d'Heisenberg

Soutenue le 28 Juin 2018 à Tlemcen devant le jury composé de:

Mr Dr. Mohamed Mebrouki

ENCADREUR

Mr Pr. Abdelhak Boussaid

PRESIDENT DE JURY

Mme Dr. Fatiha Smain

EXAMINATEUR

Laboratoire Physique Théorique

Tlemcen - Algérie

Abréviations

$\rho(T)$	Résistivité électrique en fonction de la température
H	Hamiltonien d'un système quantique
E_0	Énergie de l'état fondamental d'un système physique
E_1	Énergie du premier état excité fondamental d'un système physique
$ \Psi\rangle$	Vecteur propre de l'hamiltonien d'un syst physique
$\rho_{ii'}$	Éléments de matrice densité d'un système quantique
m	Nombre d'états retenus pendant la procédure de renormalisation
ω_α	Valeurs propres de la matrice densité
O	Matrice de la nouvelle base composée des vecteurs propres de la matrice densité
S_i^z	Composante suivant z du spin sur un site i
S_i^\pm	Opérateurs d'échelle de spin (augmentation et diminution)
μ_0	Perméabilité du vide
\vec{H}	Champ magnétique
\vec{B}	Densité du flux magnétique
\vec{M}	Vecteur d'aimantation d'un matériau
χ_m	Susceptibilité magnétique
μ_B	Magnéton de Bohr
\hbar	Constante de Planck normalisée
J_{ij}	Constante de couplage entre spins sur les sites i et j
$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$	Matrices de Pauli

Résumé

La méthode numérique de renormalisation par la matrice densité est devenue au fil des années précédentes un outil numérique très fort dans l'étude des propriétés physiques statiques et dynamiques des systèmes physiques fondamentaux. L'application de cette méthode à une chaîne de spins antiferromagnétique dans le cadre du modèle de Heisenberg pour des systèmes magnétiques a permis de reproduire des résultats théoriques déjà connus sur des chaînes de longueurs très grandes comparées à celles diagonalisables par des méthodes standards. L'étude numérique a permis aussi de confirmer l'existence d'un gap d'énergie pour une chaîne de spin $s = 1$ (conjecture de Haldane), mais aussi la non existence d'un gap d'énergie pour un système de spins $\frac{1}{2}$. L'effet des conditions aux limites périodiques ou ouvertes, ainsi qu'un couplage aléatoire entre spins plus proches voisins a été étudié. d'autre part, un fit linéaire des résultats obtenus nous a permis d'écrire une expression de l'énergie de l'état fondamental ainsi que l'énergie du premier état excité en fonction de la longueur de la chaîne de spins.

Abstract

The density matrix renormalization group method has become in the past thirty years a stronger numerical tool for the study of static and dynamic physical properties of fundamental physics systems. The application of this method to an antiferromagnetic spin chain within the Heisenberg model for magnetic systems spins allows us to reproduce some well known theoretical results about relatively long spin chains compared to those diagonalizable using standard routines. Also, the numerical study allows us to confirm the existence of an energy gap for a $s = 1$ -spin chain (haldane conjecture), but the non existence of a an energy gap for a $s = \frac{1}{2}$ -spin chain. The effect of both periodic and open boundary conditions on the behavior of the energy spectra of the spin system is studied. Also, the effect of random coupling on the behavior of energy level of a spin system is studied. In the other hand, a linear fit allows us to write an expression of the ground state energy as a function of the length of the spin chain.

Remerciements

J'exprime ici ma gratitude envers mon directeur de thèse, Monsieur Mohamed Mebrouki pour m'avoir introduit et guidé dans ce champ de recherche qui m'était tout à fait inconnu. Je le remercie beaucoup encore pour m'avoir aidé et appris plein de choses en physique et en programmation avancée que je ne connaissait pas. Il m'a ouvert une grande porte pour un futur sujet de recherche, mais aussi, pour ne pas oublier, m'a incité à m'investir plus dans l'apprentissage de la langue anglaise.

Je remercie aussi Monsieur le Professeur A. Bousaid qui me fait l'honneur de présider le jury de soutenance. Qu'il trouve ici l'expression de ma très vive gratitude.

Mes sincères remerciements vont aussi à Madame F. Smain qui a bien voulu examiner ce travail malgré ses nombreuses occupations.

Enfin, je remercie tous ceux qui ont participé de près ou de loin à l'élaboration de ce travail.

Table des matières

Abréviations	iii
Résumé	v
Abstract	vi
Remerciements	vii
Table des matières	ix
1 Introduction	1
2 Groupe de Renormalisation par la Matrice de Densité (DMRG)	3
1 Historique	3
2 La Matrice de densité	7
3 Algorithmes DMRG	8
3.1 L'algorithme du système infini (warm-up) :	9
3.2 L'algorithme du système fini (sweeping) :	11
4 Mesures	13
3 Magnétisme et modèle d'Heisenberg	15
1 Moment magnétique atomique :	15
2 Magnétisme dans les solides :	17
3 Spin :	20
4 Interaction magnétique :	21
5 Système à deux électrons :	22
6 Le modèle d'Heisenberg	24
7 Conjecture de Haldane :	25
4 Implémentation de l'algorithme :	27
5 Résultats et discussions :	31
1 Diagonalisation exacte :	31
1.1 Spectre énergétique d'une chaîne de spin $s = \frac{1}{2}$:	31
1.2 Spectre énergétique d'une chaîne de spin $s = 1$:	33
1.3 Fonction de corrélation entre spins :	33
2 Renormalisation par la matrice densité :	35
6 Conclusion	41
Bibliographie	43

Chapitre 1

Introduction

La difficulté principale rencontrée dans la recherche des valeurs de l'état fondamental ainsi que les états excités des systèmes quantiques réside dans le fait que la taille de la base sur laquelle est projeté l'hamiltonien du système croît exponentiellement avec la taille physique du même système quantique. Ainsi, pour diagonaliser un système de N fermions sans spins, on aura besoin de 2^N états. De tels calculs peuvent être accomplis pour de petites tailles. Néanmoins, le calcul dépassera rapidement la capacité des ordinateurs actuels. La situation est encore pire pour les systèmes bosoniques, en raison du fait que l'espace de Hilbert sur un site est d'ordre infini.

En cherchant à surmonter ce problème, les spécialistes du domaine ont pu établir tout au long des cinquante années passées des méthodes numériques plus ou moins fiables, permettant l'obtention du spectre énergétique des systèmes quantiques mais aussi leurs propriétés statique et dynamique, jusque là sans résolution. La méthode numérique basée sur le groupe de renormalisation figure parmi les méthodes les plus utilisées par les physiciens dans leur recherche à étudier des systèmes quantiques fortement corrélés. Plusieurs versions ont été avancées depuis sa première utilisation dans le domaine de la matière condensée par Kenneth Wilson au début des années 1970. Un besoin d'amélioration de la méthode apparaît à chaque fois que la méthode était confrontée à de nouveaux défis face à des systèmes de plus en plus complexes. Le tournant majeur dans cette démarche a eu lieu au début des années 1990 lorsque Steve White, qui a assisté à une conférence scientifique donnée par K. Wilson, avait l'idée ingénieuse de faire appel au concept de la matrice de densité, un concept bien connu dans la mécanique quantique, et qui lui a permis de révolutionner la méthode numérique de groupe de renormalisation, lui permettant ainsi une large application à des systèmes très complexes. Depuis, la méthode numérique, appelée communément, groupe de renormalisation par la matrice de densité (de l'anglais ; Density matrix renormalization group, DMRG), a connu un essor remarquable, confirmé par des centaines d'articles scientifiques utilisant la méthode dans différents domaines (on l'a même utilisé en sciences sociales !) et plus particulièrement dans le domaine des systèmes quantiques en relation avec la physique de la matière condensée.

Dans le premier chapitre de cette thèse nous retracerons le chemin vers les origines du concept de la renormalisation apparu dans certaines domaines de la physique de l'état solide et son application à différents systèmes physiques. La méthode de renormalisation par la matrice densité y est exposée. Dans le deuxième chapitre nous révisons les concepts fondamentaux du magnétisme, et plus particulièrement le modèle de Heisenberg. Dans le troisième chapitre un exemple de l'application de la méthode de renormalisation par la matrice densité à une chaîne de spins dans le cadre du modèle de Heisenberg. Les résultats de l'application de la méthode DMRG à des chaînes de spins sont donnés dans le quatrième chapitre.

Chapitre 2

Groupe de Renormalisation par la Matrice de Densité (DMRG)

1 Historique

L'application de la méthode du groupe de renormalisation remonte au travail de Kenneth Wilson dans les années 1970 sur le problème de la résistance minimum à basse température mesurée dans certains alliages métalliques (métaux avec impuretés), appelé communément le problème de Kondo [1]. En effet, pour la plupart des métaux la résistivité électrique diminue lorsque la température diminue. Mais il se trouve que dans certains métaux purs, la résistivité a un minimum pour de basses températures (voir figure (2.1)). Kondo a proposé une explication à

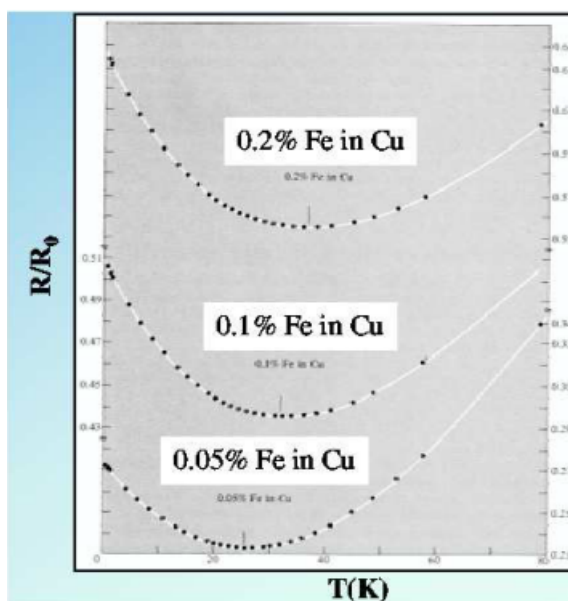


FIGURE 2.1 – Variation de la résistivité électrique pour certains alliages en fonction de la température avec une valeur minimum (image tirée de [2]).

cette anomalie dans le comportement de la résistivité électrique de certains alliages qui consistait à dire que les électrons de conduction sont susceptibles de subir un retournement de spin lorsque ceux-ci entrent en collision avec les électrons localisés d'une impureté magnétique [3]. Il proposa une expression de résistivité électrique en fonction de la température comme :

$$\rho(T) \propto \ln T \quad (2.1)$$

Cette expression implique une divergence de $\rho(T)$ pour $T \rightarrow 0$, qui est en contradiction avec la saturation constatée expérimentalement. Ainsi, le problème de trouver une solution valable pour des températures très basses $T \rightarrow 0$ est appelé le '**problème de Kondo**'.

En 1974, Kenneth Wilson a proposé une solution au problème de Kondo et qui consistait en la procédure numérique suivante [1] :

1. Supposer une bande de conduction entre les valeurs d'énergie $-D, D$.
2. Appliquer une discrétisation logarithmique de la bande de conduction en la divisant en des intervalles infinis $[\xi_{n+1}, \xi_n]$ et $[-\xi_{n+1}, -\xi_n]$

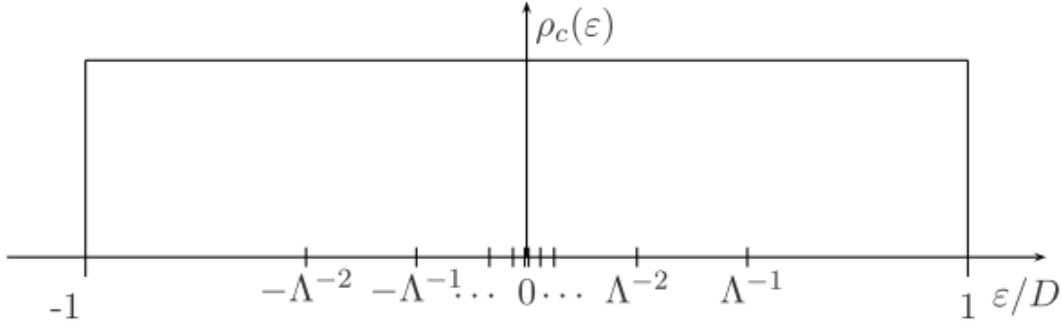


FIGURE 2.2 – Discretisation de la bande de conduction.

3. $\xi_n = D\Lambda^{-n}$ et $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$, où Λ est le pas de méthode de groupe de renormalisation numérique avec des valeurs $1.5 \dots 2$.
4. Les états dans chaque intervalle de la bande de conduction sont alors remplacés par un seul état.
5. Ce modèle discret d'états est ensuite projeté sur un réseau unidimensionnel (chaîne semi-infinie) avec une impureté située sur le premier site.

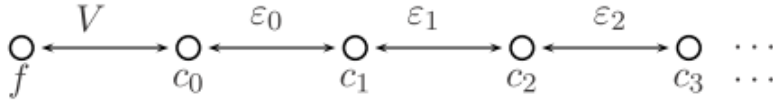


FIGURE 2.3 – Impureté sur le premier site d'une chaîne .

6. L'impureté est donc reliée seulement à un degré de liberté fermionique ($c_{0\sigma}^\dagger$) avec une valeur d'hybridation V , avec un hamiltonien du système entier qui s'écrit sous la forme :

$$H = \sum_{\sigma} \epsilon_f f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow} + \sum_{\sigma} V (f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}) + \sum_{\sigma, n=0}^{\infty} \epsilon_n (c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n+1\sigma} + c_{n+1\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma}) \quad (2.2)$$

où les trois termes de l'hamiltonien représente, respectivement, l'impureté, le couplage entre l'impureté et le premier site occupé par un électron de conduction et enfin les autres sites de la chaîne occupés eux aussi par des électrons de conduction.

7. Les éléments de transfert entre sites décroissent exponentiellement :

$$\epsilon_n \propto \Lambda^{-n/2} \quad (2.3)$$

8. Isoler le site d'impureté puis diagonaliser l'hamiltonien correspondant pour avoir les valeurs et vecteurs propres.

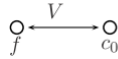


FIGURE 2.4 – Impureté et un site avec une énergie de saut.

9. Ajouter le premier site occupé par un électron de conduction.
10. Construire l'hamiltonien correspondant à deux sites : site occupé par une impureté et un site occupé par un électron de conduction.
11. Diagonaliser l'hamiltonien.
12. Itérer la procédure.
13. L'espace de Hilbert augmente comme 4^L (L est la taille de la chaîne), ce qui rend impossible de garder tous les états obtenus par diagonalisation de l'hamiltonien.
14. La méthode de renormalisation de Wilson consiste à retenir les états énergétiques les plus basses de l'hamiltonien de la chaîne de taille L pour les utiliser dans la construction de l'hamiltonien d'une chaîne de taille $L + 1$ (procédure de troncature).
15. L'argument avancé par Wilson pour justifier cette troncature réside dans le fait que ce sont seulement les états d'énergies les plus basses d'une chaîne de taille L qui sont importantes dans la construction d'une chaîne augmentée par un site (taille $L + 1$). En d'autres termes, il est possible d'écarter les états de haute énergie sans risque de perdre trop d'information sur ce qu'a été la chaîne de taille L .
16. Lors de cette procédure les connections entre sites adjacents sont négligés.

Malheureusement, la procédure numérique proposée par Wilson n'a pas donné de bons résultats une fois appliquée à des systèmes fortement corrélés (modèle de Hubbard, modèle de Heisenberg, etc) et même pour un système simple comme celui d'une particule quantique dans une boîte. Sur la figure (2.5) on présente une comparaison entre résultats obtenus par la méthode du groupe de renormalisation numérique (NRG pour Numerical Renormalization Group) et ceux obtenus par diagonalisation exacte. La raison derrière cet échec réside dans le fait

	10 blockings (2048 sites)	8 states kept	
	<u>State</u>	<u>Exact</u>	<u>NRG</u>
Test calculation:	E_0	2.351×10^{-6}	1.9207×10^{-2}
	E_1	9.403×10^{-6}	1.9209×10^{-2}
	E_2	2.116×10^{-5}	1.9714×10^{-2}

FIGURE 2.5 – Résultats de l'application de la méthode numérique de renormalisation à un système d'une particule quantique dans une boîte .

que la corrélation entre sites voisins du réseau quantique reste constante, alors qu'elle décroissait exponentiellement dans le problème de Kondo. Ainsi, le fait de négliger les corrélations entre différents blocs du système entraîne des déviations flagrantes dans les résultats de la méthode de renormalisation. Une analogie mécanique à cette situation peut être fournie par le cas physique de deux cordes de longueur L chacune, fixées à leurs extrémités. Le fait de mettre cote à cote les deux cordes prises dans leurs modes fondamentaux, ne donnera assurément pas le mode fondamental d'une corde de longueur $2L$ (voir figure (2.6)).

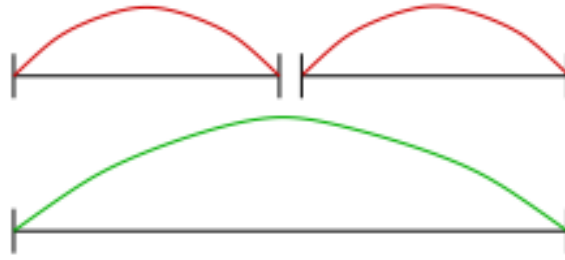


FIGURE 2.6 – Schéma mettant en exergue l’origine de l’échec de la méthode de renormalisation de K. Wilson : La combinaison de deux états fondamentaux ne peut pas donner exactement l’état fondamental d’un système double.

Wilson, lui même, a préconisé que l’application de la méthode du groupe de renormalisation à des systèmes fortement corrélés passera obligatoirement par la résolution du problème d’une particule quantique non corrélée dans une boîte (en anglais *one particle-in-box*). Chose qui a été faite quelques années plus tard par Steve White et Reinhard Noack [4], lesquels ont réussi à formuler deux types de procédures de renormalisation, à savoir : la technique de combinaison des conditions aux limites et la technique du superbloc. Encore une fois, ces deux techniques ne donnaient de bons résultats que pour ce type simple de systèmes quantiques [5].

Steve White s’est rendu compte, au début des années 1990, que l’échec qu’a connu l’application de ces deux techniques à des systèmes fortement corrélés résidait dans le fait que la renormalisation a tendance à omettre l’effet de l’environnement sur le système étudié. Il proposa donc de “mettre” le système quantique dans un bain (environnement) (voir figure (2.7)) tout en utilisant pour la procédure de troncature, non pas les états correspondants aux énergies les plus basses, mais plutôt ceux décidés par la matrice densité, considérés comme les états les plus représentatifs du système lorsque celui-ci sera élargi au sein de son environnement [6,7].

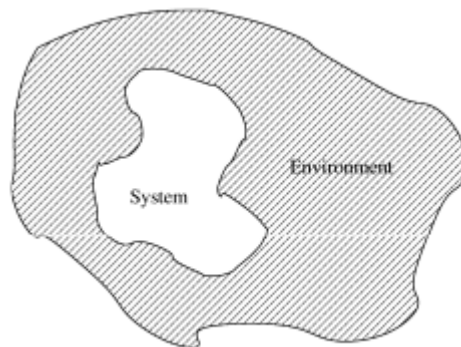


FIGURE 2.7 – .

L’utilisation de cette nouvelle idée a donné de bons résultats pour les systèmes fortement corrélés avec une première application sur le modèle de Heisenberg pour des spins $\frac{1}{2}$. L’épopée de la méthode du groupe de renormalisation par la matrice densité vient de commencer, et continue encore.

2 La Matrice de densité

Dans cette section on va introduire le concept de la matrice densité dans la mécanique quantique (voir par exemple [8]) en se concentrant sur la manière avec laquelle a été appliqué dans la procédure de renormalisation. Techniquement, le système quantique entier nommé communément **superbloc** est divisé en deux parties connectées : un bloc système et un bloc environnement (voir figure (2.8)).

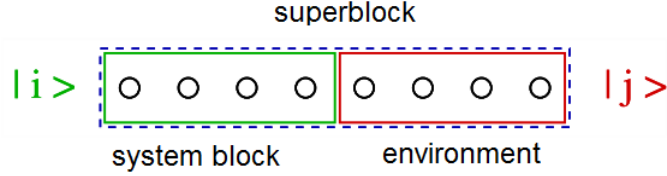


FIGURE 2.8 – .

Un état du superbloc, $|\psi\rangle$, s'écrit sous la forme

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle \quad (2.4)$$

où $|i\rangle$ et $|j\rangle$ sont les états de base du bloc système et du bloc environnement, respectivement. La matrice densité (réduite) (en anglais reduced density matrix) est définie comme

$$\rho_{ii'} = \sum_j \psi_{ij}^* \psi_{i'j} \quad \text{et} \quad \text{Tr}\rho = 1 \quad (\text{normalization}) \quad (2.5)$$

En effet, la matrice densité d'un système quantique contient toutes les informations (qu'on peut tirer de ψ) afin de pouvoir calculer ses propriétés lorsqu'il est contenu dans un système plus large. Ainsi, un opérateur A agissant seulement sur le bloc système a sa moyenne statistique qui s'écrit sous la forme :

$$\langle A \rangle = \sum_{ii'} A_{ii'} \rho_{i'i} = \text{Tr}\rho A \quad (2.6)$$

ou encore

$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \langle u^{\alpha} | A | u^{\alpha} \rangle. \quad (2.7)$$

où $|u^{\alpha}\rangle$ sont les vecteurs propres et $w_{\alpha} \geq 0$ les valeurs propres de la matrice densité ρ au bloc système avec $\sum_{\alpha} w_{\alpha} = 1$.

L'objectif est de définir une procédure pour produire un ensemble de m états du bloc système ($\alpha = 1, \dots, m$)

$$|\phi^{\alpha}\rangle = \sum_i \phi_i^{\alpha} |i\rangle \quad \text{avec} \quad \sum_i |\phi_i^{\alpha}|^2 = 1 \quad (2.8)$$

et un ensemble de m états du bloc environnement ($\alpha = 1, \dots, m$)

$$|\chi^{\alpha}\rangle = \sum_j \chi_j^{\alpha} |j\rangle \quad \text{avec} \quad \sum_j |\chi_j^{\alpha}|^2 = 1 \quad (2.9)$$

tel que

$$|\bar{\psi}\rangle = \sum_{\alpha=1}^m a_{\alpha} |\phi^{\alpha}\rangle \otimes |\chi^{\alpha}\rangle \quad (2.10)$$

qui s'écrit comme

$$|\bar{\psi}\rangle = \sum_{\alpha=1}^m a_{\alpha} \left(\sum_{i,j} \phi_i^{\alpha} \chi_j^{\alpha} |i\rangle \otimes |j\rangle \right) \quad (2.11)$$

ou encore

$$|\bar{\psi}\rangle = \sum_{i,j} \left(\sum_{\alpha=1}^m a_{\alpha} \phi_i^{\alpha} \chi_j^{\alpha} \right) |i\rangle \otimes |j\rangle \quad (2.12)$$

Comparer avec

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle \quad (2.13)$$

Notre objectif est de minimiser

$$\mathcal{S} = \left| |\psi\rangle - |\bar{\psi}\rangle \right|^2 \quad (2.14)$$

qui s'écrit

$$\mathcal{S} = \sum_{ij} \left(\psi_{ij} - \sum_{\alpha=1}^m a_{\alpha} \phi_i^{\alpha} \chi_j^{\alpha} \right)^2, \quad (2.15)$$

Nous minimisons \mathcal{S} en variant vis à vis tous les ϕ_i^{α} , χ_j^{α} , et a_{α} , pour une valeur bien spécifique de m . L'algèbre linéaire nous renseigne sur le fait que les états optimaux ϕ^{α} s'identifient exactement aux vecteurs propres u^{α} de la matrice densité (réduite) correspondant au bloc système. D'autre part, les états optimaux χ^{α} s'identifient exactement aux vecteurs propres v^{α} de la matrice densité (réduite) qui correspond au bloc environnement. Les valeurs

$$a_{\alpha} = \sqrt{\omega_{\alpha}}, \quad \alpha = 1 \dots m \quad (2.16)$$

où ω_{α} sont les valeurs propres de la matrice densité (réduite) pour le bloc système. Ainsi, la fonction d'onde approximative s'écrit comme :

$$|\bar{\psi}\rangle = \sum_{\alpha=1}^m \sqrt{\omega_{\alpha}} |u^{\alpha}\rangle \otimes |v^{\alpha}\rangle \quad (2.17)$$

La déviation de $P_m \equiv \sum_{\alpha=1}^m \omega_{\alpha}$ de la valeur unité (the discarded weight) des valeurs propres de la matrice densité mesure la précision de la troncature en m états.

3 Algorithmes DMRG

Les détails techniques de la procédure numérique proposée par Steve White sont tirés des références [6], [7] et [9]. La procédure du groupe de renormalisation par la matrice densité

proposée par Steve White procédera par la construction d'un bloc système (un système unidimensionnel, pour l'instant) dont la matrice hamiltonienne peut être diagonalisée en utilisant des routines standards. Le bloc environnement est obtenu à partir du bloc système par symétrie, sinon il est impératif de le construire de manière séparée. L'hamiltonien du superbloc est alors établi. L'étape suivante consiste à rajouter deux sites entre les blocs système et environnement. Ensuite, l'hamiltonien du superbloc augmenté de deux sites est construit puis diagonalisé. L'idée apportée par Steve White est d'utiliser la matrice densité pour décider quels états du superbloc augmenté de deux sites doivent être retenus pour les utiliser ensuite pour construire un superbloc de taille plus grande. Généralement, cette procédure est achevée en deux algorithmes :

3.1 L'algorithme du système infini (warm-up) :

Pendant l'algorithme du système fini on doit procéder de la manière suivante :

1. Former un superbloc de taille N (sites) à partir d'un bloc système de taille $\ell = N/2$ et d'un bloc environnement de taille $\ell = N/2$ (par réflexion) (voir figure (2.9)).

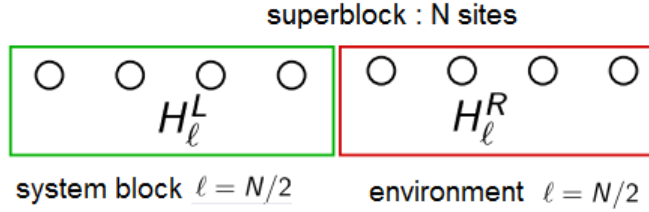


FIGURE 2.9 – .

2. Diagonaliser l'hamiltonien du superbloc H_N^{super} pour obtenir la valeur propre et le vecteur propre de l'état fondamental $|\psi\rangle_N$ (diagonalisation exact, lanczos ou autre).
3. Former la matrice densité du bloc système $\rho_{N/2}$ pour le nouveau bloc système à partir de $|\psi\rangle_N$ en utilisant

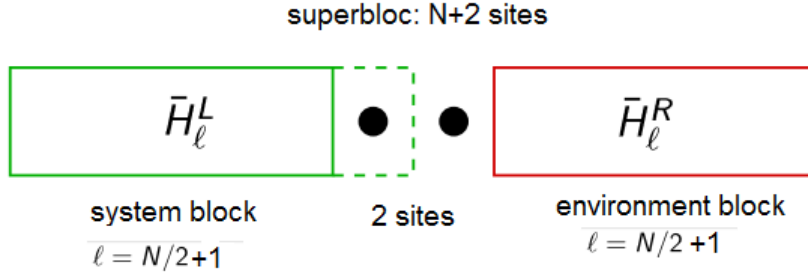
$$\rho_{ii'} = \sum_j \psi_{ij}^* \psi_{i'j} \quad (2.18)$$

4. Diagonaliser la matrice $\rho_{N/2}$ pour obtenir les $m < N/2$ vecteurs propres correspondant aux valeurs propres les plus élevées.
5. Projeter tous les opérateurs agissant dans le bloc système sur la base de la matrice densité réduite (bloc système) :

$$\bar{H}_\ell^L = O_N^\dagger H_\ell^L O_N \quad \bar{A}_\ell^L = O_N^\dagger A_\ell^L O_N \quad (2.19)$$

où les colonnes de la matrice représentant l'opérateur O_N contiennent les m vecteurs propres correspondants aux valeurs propres les plus élevées de $\rho_{N/2}$.

6. Former un superbloc de taille $N + 2$ en utilisant \bar{H}_ℓ^L , deux sites et \bar{H}_ℓ^R .
7. Diagonaliser l'hamiltonien du superbloc H_{N+2}^{super} pour obtenir $|\psi\rangle_{N+2}$.
8. Former la matrice densité réduite $\rho_{N/2+1}$ pour le nouveau bloc système à partir de $|\psi\rangle_{N+2}$.
9. Diagonaliser la matrice densité $\rho_{N/2+1}$ pour obtenir les m vecteurs propres correspondant aux valeurs propres les plus élevées.



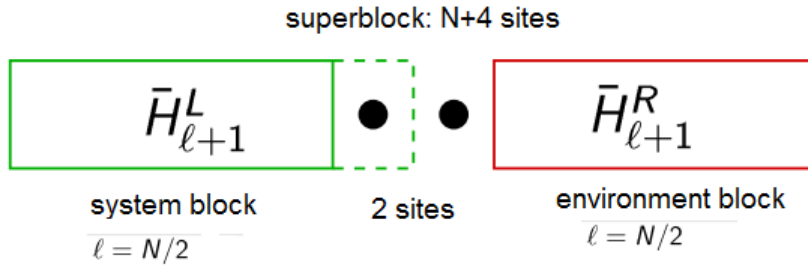
10. Projeter tous les opérateurs du bloc système sur la base de la matrice densité réduite :

$$\bar{H}_{\ell+1}^L = O_{N+2}^\dagger H_{\ell+1}^L O_{N+2} \quad \bar{A}_{\ell+1}^L = O_{N+2}^\dagger A_{\ell+1}^L O_{N+2} \quad (2.20)$$

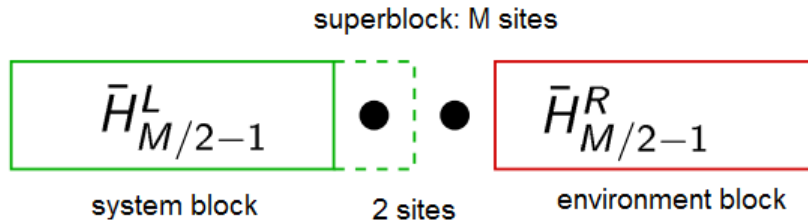
où les colonnes de la matrice de l'opérateur O_{N+2} contiennent les m vecteurs propres correspondant aux valeurs propres les plus élevées de $\rho_{N/2+1}$ et :

$$H_{\ell+1}^L = \bar{H}_\ell^L \otimes \bullet, \quad H_{\ell+1}^R = \bullet \otimes \bar{H}_\ell^L \quad (2.21)$$

11. Former un superbloc de taille $N + 4$ en utilisant $\bar{H}_{\ell+1}^L$, deux sites et $\bar{H}_{\ell+1}^R$.



12. Répéter la procédure jusqu'à ce que la taille désirée (disons M) du bloc système soit atteinte.



13. Diagonaliser l'hamiltonien du superbloc H_M^{super} pour obtenir l'état fondamental $|\psi\rangle_M$ et la valeur propre correspondante E_0^M .

14. **Attention** : Emmagasinier toutes les matrices correspondantes aux hamiltoniens et aux opérateurs pendant les itérations pour les utiliser par la suite.

15. Le superbloc augmente de 2 sites par itération alors que l'ordre de l'espace de Hilbert correspondant reste constant, à savoir $2m + 2$.

Les résultats obtenus à la fin de cette procédure ne sont pas très précises. De ce fait, un algorithme de balayage (sweeping) est ensuite exécuté afin d'améliorer la convergence des résultats vers des valeurs plus précises.

3.2 L'algorithme du système fini (sweeping) :

1. L'idée derrière l'algorithme du système fini est de garder la taille du superbloc (obtenu à la fin de l'étape précédente) constante pendant que la taille du bloc environnement diminue. On fait une sorte de balayage du système afin d'améliorer la convergence des résultats.
2. Former la matrice densité réduite $\rho_{M/2}$ pour le nouveau bloc système à partir de $|\psi\rangle_M$.
3. Diagonaliser la matrice $\rho_{M/2}$ pour obtenir les m vecteurs propres correspondants aux valeurs propres les plus élevées.
4. Projeter tous les opérateurs du bloc système sur la base de la matrice densité réduite :

$$\bar{H}_{M/2}^L = O_M^\dagger H_{M/2}^L O_M \quad \bar{A}_{M/2}^L = O_M^\dagger A_{M/2}^L O_M \quad (2.22)$$

où les colonnes de la matrice O_M contiennent les m vecteurs propres correspondants aux valeurs propres les plus élevées de $\rho_{M/2}$ et :

$$H_{M/2}^L = \bar{H}_{M/2-1}^L \otimes \bullet \quad (2.23)$$

5. Former un superbloc de taille M en utilisant $\bar{H}_{M/2}^L$, deux sites et $\bar{H}_{M/2-2}^R$.

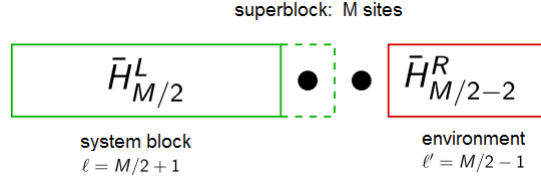


FIGURE 2.10 - .

6. La matrice $\bar{H}_{M/2-2}^R$ a été déjà emmagasinée lors de l'algorithme du système infini.
7. Diagonaliser l'hamiltonien du superbloc H_M^{super} pour obtenir l'état amélioré (improved) $|\psi\rangle_{N+2}$.
8. Former la matrice densité réduite $\rho_{M/2+1}$ pour le nouveau bloc système à partir de $|\psi\rangle_M$.
9. Diagonaliser la matrice $\rho_{M/2+1}$ pour obtenir les m vecteurs propres correspondants aux valeurs propres les plus élevées.
10. Projeter tous les opérateurs agissant dans le bloc système sur la base de la matrice densité réduite :

$$\bar{H}_{M/2+1}^L = O_{M/2+1}^\dagger H_{M/2+1}^L O_{M/2+1} \quad \bar{A}_{M/2+1}^L = O_{M/2+1}^\dagger A_{M/2+1}^L O_{M/2+1} \quad (2.24)$$

où les colonnes de la matrice O_{N+2} contiennent les m vecteurs propres correspondants aux valeurs propres les plus élevée de $\rho_{N/2+1}$ et :

$$H_{M/2+1}^L = \bar{H}_{M/2}^L \otimes \bullet \quad (2.25)$$

11. Former un superbloc de taille M en utilisant $\bar{H}_{M/2+1}^L$, deux sites et $\bar{H}_{M/2-3}^R$.
12. Répéter la procédure jusqu'à atteindre la situation décrite sur la figure (2.12).
13. Inverser les rôles de $\bar{H}_{M-N/2-2}^L$ (environnement) et $\bar{H}_{N/2}^R$ (système) (voir figure (2.13)) :
14. Diagonaliser l'hamiltonien du superbloc H_M^{super} pour obtenir l'état amélioré $|\psi\rangle_M$.
15. Former la matrice densité réduite $\rho_{N/2+1}$ pour le nouveau bloc système à partir de $|\psi\rangle_M$.
16. **Attention** : Le système dont la matrice densité est calculée dans ces itérations est celui à droite !
17. Répéter la procédure de droite vers la gauche et de gauche vers la droite jusqu'à ce que la convergence désirée soit atteinte.

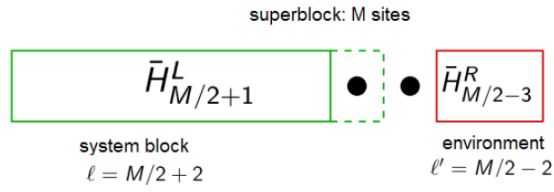


FIGURE 2.11 - .

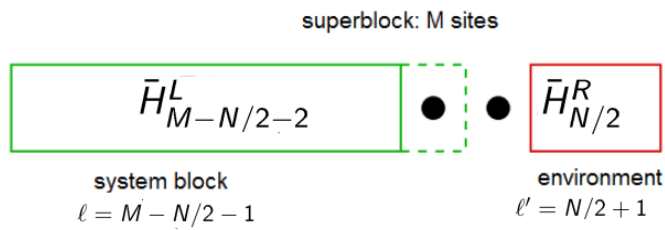


FIGURE 2.12 - .

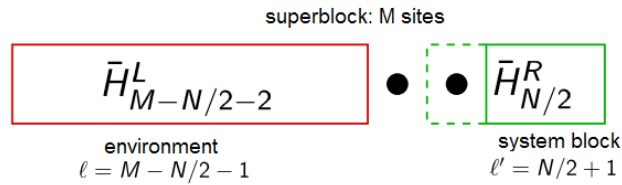


FIGURE 2.13 - .

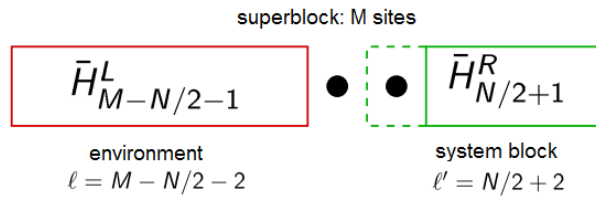


FIGURE 2.14 - .

4 Mesures

Afin de mesurer la valeur moyenne statistique (expectation values) d'un opérateur A de la forme $\langle \psi | A | \psi \rangle$, on doit garder toutes les matrices correspondantes à chaque itération de la procédure de renormalisation. Par exemple, pour mesurer la densité de spin S_j^z pour tous les sites ℓ , on doit garder trace des matrices $[S_\ell^z]_{ii'}$, pour chaque site dans ℓ dans les deux blocs :

$$\langle \psi | S_\ell^z | \psi \rangle = \sum_{i,i',j} \psi_{ij}^* [S_\ell^z]_{ii'} \psi_{i'j}, \quad (2.26)$$

D'autre part, l'évaluation de la fonction de corrélation $\langle \psi | S_l^z S_m^z | \psi \rangle$ se fait selon que le site ℓ appartienne ou non au même bloc. Ainsi, si les spins S^z appartiennent à deux blocs différents, on aura seulement besoin de garder trace de $[S_l^z]_{ii'}$, et $[S_m^z]_{jj'}$, d'où

$$\langle \psi | S_l^z S_m^z | \psi \rangle = \sum_{i,i',j,j'} \psi_{ij}^* [S_l^z]_{ii'} [S_m^z]_{jj'} \psi_{i'j'} \quad (2.27)$$

Si les spins S^z sont dans le même bloc, il serait impératif de garder trace de $[S_l^z S_m^z]_{ii'}$ tout au long des calculs. On calcule alors

$$\langle \psi | S_l^z S_m^z | \psi \rangle = \sum_{i,i',j} \psi_{ij}^* [S_l^z S_m^z]_{ii'} \psi_{i'j} \quad (2.28)$$

Chapitre 3

Magnétisme et modèle d'Heisenberg

L'élaboration de ce chapitre a été inspirée de quatre livres de physique : materials science de Callister [10], quantum mechanics de Cohen-Tanoudji [11], magnetism de C. Daniel Mattis [12] et an encyclopedia of exactly solved models de C. Daniel Mattis [13].

1 Moment magnétique atomique :

Le magnétisme, connu depuis l'antiquité, désigne le phénomène par lequel certains matériaux présentent des forces d'attraction ou de répulsion ou encore d'influence sur d'autres matériaux. Cependant, les principes sous-jacents et les mécanismes qui expliquent le phénomène magnétique sont complexes et subtiles. Leur compréhension a échappé aux scientifiques jusqu'à des temps relativement récents. Le fer, certains aciers et la magnétite minérale naturelle sont connus comme des matériaux ayant des propriétés magnétiques. Il est utile de noter que toutes les substances sont influencées à un degré ou à un autre par la présence d'un champ magnétique. Les forces magnétiques sont générées par des particules électriquement chargées en mouvement. Ainsi, un dipôle magnétique créé par ce mouvement peut être considéré comme un petit barreau composé d'un pôle nord et un pôle sud, auquel on associe un moment magnétique (la flèche sur la figure (3.1)). Le dipôle magnétique est, à certains égards, analogue au dipôle électrique, et par conséquent, il est influencé par un champ magnétique d'une manière similaire à la façon dont un dipôle électrique est affecté par un champ électrique.

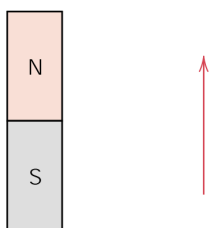


FIGURE 3.1 – Un dipôle magnétique est représenté par un aimant et auquel on associe un moment dipolaire magnétique, représenté sur la figure par une flèche (figure tirée de [10]).

La force du champ magnétique \vec{H} et la densité du flux magnétique \vec{B} sont liées par :

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (3.1)$$

où μ (mesurée en webers par ampère-mètre ($Wb/A \cdot m$) ou des Henries par mètre (H/m)), est la perméabilité qui caractérise (moyennement) le milieu à travers lequel passe le champ \vec{H} et

dans lequel \vec{B} est mesurée. Dans le vide, la densité du flux magnétique est donnée par :

$$\vec{B}_0 = \mu_0 \vec{H} \quad (3.2)$$

où $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H/m}$ est la perméabilité du vide (une constante universelle).

On définit la perméabilité relative (sans unité) comme le rapport de la perméabilité dans un matériau à la perméabilité dans le vide :

$$\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0} \quad (3.3)$$

La perméabilité relative d'un matériau est une mesure du degré auquel le matériau peut être aimanté, ou la facilité avec laquelle un champ \vec{B} peut être induit en présence d'un champ \vec{H} externe.

Aussi, on définit un champ d'aimantation \vec{M} du solide, définie par l'expression suivante

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \mu_0 \vec{M} \quad (3.4)$$

En présence d'un champ \vec{H} , les moments magnétiques dans un matériau tendent à s'aligner avec ce dernier et le renforcer grâce à leurs champs magnétiques.

Le terme $\mu_0 \vec{M}$ dans l'équation (3.4) est une mesure de cette contribution. Le champ d'aimantation \vec{M} est proportionnel au champ appliqué \vec{H} comme suit :

$$\vec{M} = \chi_m \vec{H} \quad (3.5)$$

où χ_m est la susceptibilité magnétique (sans unité), liée à la perméabilité relative selon la formule $\chi_m = \mu_r - 1$.

Les propriétés magnétiques macroscopiques des matériaux sont une conséquence de moments associés à des électrons individuels. Chaque électron dans un atome a des moments magnétiques qui proviennent de deux sources :

1. **Le moment magnétique orbital** : lié au mouvement orbital de l'électron autour du noyau. Étant une charge en mouvement, un électron peut être considéré comme une petite boucle de courant, générant un très petit champ magnétique, avec un moment magnétique le long de son axe de rotation, schématiquement illustré sur figure (3.2.a).
2. **Le moment magnétique de spin** : qu'on peut attribuer (pas vraiment) à la rotation d'un électron autour de lui même, donnant ainsi un second moment magnétique appelé **moment de spin**, dirigé le long de l'axe de rotation comme indiqué sur la figure (3.2.b).

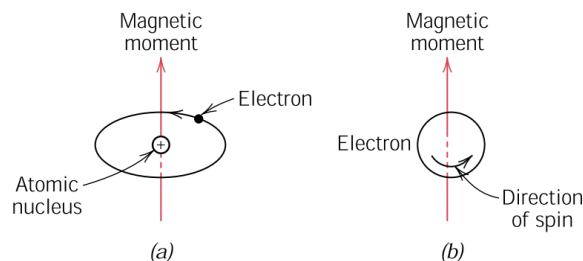


FIGURE 3.2 – a) moment magnétique orbital, b) moment magnétique de spin (figure tirée de [10]).

Ainsi chaque électron dans un atome peut être considéré comme étant un petit aimant ayant deux moments magnétiques permanents : **orbital** et de **spin**. Les moments magnétiques de

spin peuvent être seulement dans une direction en **haut** (up) ou en **bas** (down). Pour chaque électron dans un atome, le moment magnétique de spin est désigné par $\pm\mu_B$ (magnéton de Bohr égal à $9.27 \times 10^{-24} A \cdot m^2$) (plus pour la rotation vers le haut, moins pour la rotation vers le bas). De plus, le moment magnétique orbital est égal à $m_l \mu_B$, m_l étant le nombre quantique magnétique de l'électron. Dans chaque atome individuel, les moments orbitaux de certaines paires d'électrons s'annulent mutuellement ; cela est également vraie pour les moments de spin (par exemple, le moment de spin **haut** d'un électron annulera celui de spin vers le **bas**). Le moment magnétique net pour un atome est juste la somme des moments magnétiques de chacun des électrons constitutifs, y compris les contributions orbitales et de spin, avec l'effet d'annulation mutuelle. Pour un atome ayant une couche ou une sous-couche complètement remplie en électrons, les moments orbitaux et de spin s'annuleront mutuellement. Ainsi les matériaux composés d'atomes avec des couches complètement remplies ne peuvent pas être aimantés de façon permanente. Cette catégorie comprend les gaz inertes (He, Ne, Ar, etc.) ainsi que certains matériaux ioniques.

2 Magnétisme dans les solides :

Le magnétisme dans les matériaux existe sous les formes suivantes :

1. Le **diamagnétisme** : Une forme très faible de magnétisme qui est non permanente et persiste seulement lorsqu'un champ externe est appliqué. Il est induit par un changement de l'orbitale de mouvement des électrons dû à un champ magnétique appliqué. L'intensité du moment magnétique induit est extrêmement petit et est dans une direction opposée à celle du champ appliqué. Ainsi, la perméabilité relative μ_r est inférieure à l'unité (cependant, seulement très légèrement), et la susceptibilité magnétique est négative (de l'ordre de -10^{-5}) : l'ampleur du champ \vec{B} dans un solide diamagnétique est inférieure à celui dans un vide. La Figure (3.3) illustre schématiquement les configurations dipolaires

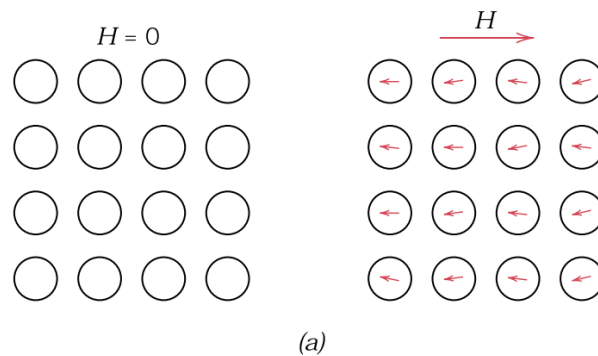


FIGURE 3.3 – Configuration de dipôles magnétiques atomiques pour un matériau diamagnétique avec et sans champ externe (figure tirée de [10]).

magnétiques atomiques pour un matériau diamagnétique en présence et en absence d'un champ magnétique externe. Il est utile de noter que le diamagnétisme existe dans tous les matériaux ; mais parce qu'il est si faible, il ne peut être observé que lorsque d'autres types de magnétisme sont totalement absents.

2. Le **paramagnétisme** : Pour certains matériaux solides, chaque atome possède un moment dipolaire permanent en vertu d'une annulation incomplète de spins électroniques et / ou des moments magnétiques orbitaux. En l'absence d'un champ magnétique externe, les orientations des moments magnétiques de ces atomes sont aléatoires, de sorte qu'une

pièce de matériau ne possède pas d'aimantation macroscopique nette. Ces dipôles ato-

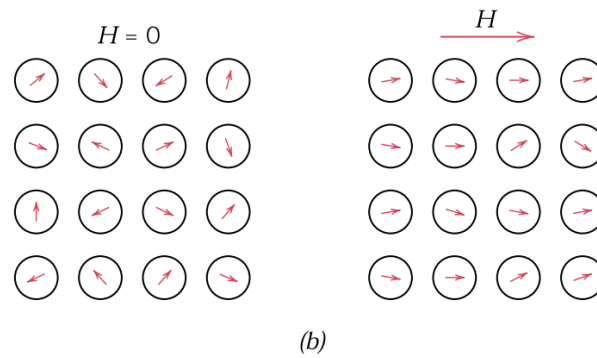


FIGURE 3.4 – Configuration de dipôles magnétiques atomiques pour un matériau paramagnétique avec et sans champ externe (figure tirée de [10]).

miques sont libres de tourner et le paramagnétisme de ces matériaux a lieu lorsque ces dipôles s'alignent préférentiellement, par rotation, le long d'un champ externe, comme c'est montré sur la figure (3.4). Ces dipôles magnétiques subissent des actions externes de manière individuelle sans interaction mutuelle entre dipôles adjacents. En s'alignant avec le champ externe, les dipôles améliorent ce dernier, donnant ainsi naissance à une perméabilité relative μ_r supérieure à l'unité, et une susceptibilité magnétique relativement faible mais positive (de l'ordre $+10^{-5}$ à $+10^{-2}$).

3. Le **ferromagnétisme** Certains matériaux métalliques possèdent un moment magnétique permanent en l'absence d'un champ externe, et développent des aimantations très grandes et permanentes. Ce sont là les caractéristiques du ferromagnétisme, qui se manifestent dans les métaux ferreux de transition : fer (ferrite en BCC), nickel, cobalt et certains métaux des terres rares tel que le gadolinium (Gd). Les matériaux ferromagnétiques présentent des susceptibilités magnétiques (très élevées) de l'ordre de 10^6 . Par conséquent, $|\vec{H}| \ll |\vec{M}|$, et il est possible d'écrire :

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \mu_0 \vec{M} \cong \mu_0 \vec{M} \quad (3.6)$$

La contribution des moments magnétiques orbitaux est petite comparée au moment de spin. Les moments magnétiques permanents dans les matériaux ferromagnétiques résultent des moments magnétiques dus à des spins d'électrons - non annulation de spins dans la structure électronique. En outre, dans un matériau ferromagnétique, les interac-

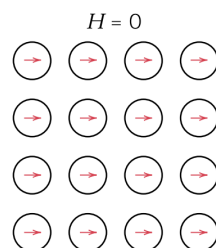


FIGURE 3.5 – Les moments magnétiques atomiques dans un matériau ferromagnétique sont mutuellement alignés sans même qu'un champ magnétique externe soit appliqué (figure tirée de [10]).

tions de couplage entre atomes adjacents font que les moments de spin de ces atomes

tendent à s'aligner les uns avec les autres, même en l'absence de champ externe (voir figure (3.5)). Cet alignement mutuel de spin existe sur des régions de volume relativement important du cristal appelés domaines.

4. L'**anti-ferromagnétisme** : Ce phénomène de couplage de moment magnétique entre des atomes ou des ions adjacents se produit dans d'autres types de matériaux autres que ceux qui sont ferromagnétiques. Dans un type de matériaux appelés, le couplage qui donne un alignement **antiparallèle** des moments de spin des atomes voisins ou les ions dans des directions exactement opposées est appelé **anti-ferromagnétisme**. Par exemple, l'oxyde de manganèse (MnO), un matériau céramique, est anti-ferromagnétique, dans lequel les ions O^{2-} ne présentent aucun moment spin, car il y a une annulation totale des moments de spin et orbitaux. Cependant, les ions Mn^{2+} possèdent un moment magnétique net qui est principalement d'origine spin. Ces ions Mn^{2+} sont disposés dans la structure cristalline de telle sorte que les moments des ions adjacents sont antiparallèles (voir figure (3.6)). Évidemment, les moments magnétiques opposés s'annulent mutuellement et, par

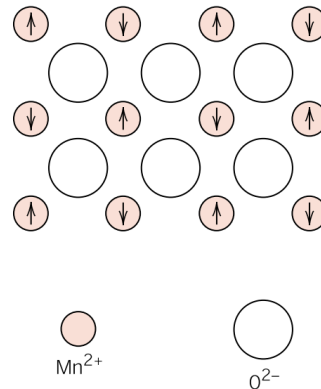


FIGURE 3.6 – Les moments magnétiques atomiques de spin de l'oxyde de manganèse sont alignés de manière antiparallèle (figure tirée de [10]).

conséquent, le solide dans son ensemble ne possède aucun moment magnétique net.

5. Le **ferrimagnétisme** : Certains céramiques présentent également une aimantation permanente, appelée ferrimagnétisme. Les caractéristiques magnétiques macroscopiques des matériaux ferromagnétiques et ceux ferrimagnétiques sont similaire ; la distinction réside dans la source des moments magnétiques nets. Les principes du **ferrimagnétisme** sont illustrés avec les ferrites cubiques. Par exemple, dans la ferrite Fe_2O_4 les ions Fe existent dans les deux états de valence +2 et +3 dans un rapport de 1 :2. Un moment magnétique de spin net existe pour chaque ion Fe^{2+} ou Fe^{3+} , qui correspond à 4 et 5 magnétons de Bohr, respectivement, pour les deux types d'ions. En outre, les ions O^{2-} sont magnétiquement neutres. Il existe des interactions antiparallèles de couplage par spin entre les ions Fe , de même nature que l'anti-ferromagnétisme. Cependant, le moment ferrimagnétique net provient de l'annulation incomplète des moments de spin. Les moments de spin de tous les ions Fe^{3+} dans les positions octaédriques sont alignés parallèlement les uns aux autres ; cependant, ils sont dirigés en opposition aux ions Fe^{3+} disposés dans les positions tétraédriques, qui sont également tous alignés. Cela résulte du couplage antiparallèle des ions de fer voisins. Ainsi, les moments de spin de tous les ions Fe^{3+} s'annulent et ne fournissent aucune contribution nette à l'aimantation du solide. Tous les ions Fe^{2+} ont leurs moments alignés dans la même direction, dont le moment magnétique total est responsable de l'aimantation (voir figure (3.7)).

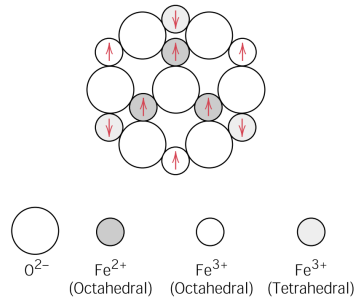


FIGURE 3.7 – Disposition des moments dipolaires magnétiques des ion Fe^{2+} ou Fe^{3+} dans le composé Fe_3O_4 (un matériau ferrimagnétique) (figure tirée de [10]).

3 Spin :

Un problème majeur que rencontrait le modèle de Bohr, et relevé par les physiciens de son temps, était la possibilité que tous les électrons viennent s'accumuler dans la couche la plus profonde, de manière à réaliser un minimum d'énergie, et auquel Bohr lui-même ne pouvait pas répondre. En proposant le principe d'exclusion, Pauli a pu répondre à cette question. En effet, selon le principe d'exclusion de Pauli deux électrons, aux plus, peuvent partager les mêmes nombres quantiques (n, l, m) . Mais, un autre problème ressortait de ce principe : pourquoi justement deux électrons. En plus, quelle explication donner aux nombres quantiques demi-entiers rencontrés dans l'effet Zeeman, et comment expliquer les résultats de l'expérience de Stern-Gerlach sur l'atome d'argent ? La réponse à ces questions a été apportée par deux jeunes hollandais, George Uhlenbeck et Samuel Goudsmit [13], en proposant que l'électron aurait un moment cinétique propre (intrinsèque), ou spin, correspondant à la valeur $j = \frac{1}{2}$ et dont la projection selon un axe de coordonnée quelconque ne peut prendre que les valeurs $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Dorénavant, un état quantique (n, l, m, m_s) ne peut être occupé que par un seul électron.

Cependant, il était temps de renoncer à l'image classique de la mécanique selon laquelle le spin ne serait autre que le moment cinétique de rotation d'un électron, considéré comme une sphère de matière de rayon de l'ordre de 10^{-15} mètre (rayon pour lequel l'énergie électrostatique de la sphère chargée est égale à l'énergie de masse $m_e c^2$). En effet, si le spin de l'électron correspond à une rotation de cette sphère, la vitesse à la surface de celle-ci devrait être supérieure à celle de la lumière ! Finalement, l'idée d'un spin d'électron a fini par être acceptée par la communauté scientifique, confortée dans cela par son utilité majeure dans l'explication de nombreux résultats empiriques. Par exemple, les propriétés magnétiques de certaines substances, en particulier des métaux ferromagnétiques, ne peuvent être expliquées qu'en tenant compte du concept de spin.

L'interprétation des résultats expérimentaux (Stern-Gerlach) passait par la supposition d'un moment magnétique \vec{M}_S associé à un moment angulaire S :

$$\vec{M}_S = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S} \quad (3.7)$$

où μ_B est le magnéton de Bohr.

L'opérateur de Spin \hat{S} étant un moment angulaire, ses trois composants sont des observables vérifiant les relations de commutation suivantes [11] :

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z$$

et les deux autres formules déduites par une permutation cyclique des indices x, y et z . Aussi, il est possible de définir les opérateurs suivants :

$$S_{\pm} = S_x \pm i S_y \quad (3.8)$$

D'autre part, les opérateurs de spin agissent dans un espace d'état de spin \mathcal{E}_s , dans lequel \vec{S}^2 et S_z constituent un ECOC, avec les valeurs propres et les vecteurs propres suivants :

$$\vec{S}^2 |s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m\rangle \quad (3.9)$$

et

$$S_z |s, m\rangle = m\hbar |s, m\rangle \quad (3.10)$$

où s , le spin d'une particule (chaque type de particule a une valeur de spin unique), ne peut prendre que des valeurs entières ou demi-entières, alors que m aura les valeurs entre $-s$ et $+s$ avec un pas de 1. Notons que \mathcal{E}_s est de dimension finie égale à $2s+1$.

Finalement, l'espace d'états d'une particule considérée est le produit tensoriel de l'espace d'état orbitaux \mathcal{E}_r et l'espace d'états de spin \mathcal{E}_s :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s \quad (3.11)$$

Dans le cas d'un électron, une particule de spin $s = \frac{1}{2}$, l'espace d'états de spin est de dimension 2, avec une base orthonormée composée des deux vecteurs propres de \vec{S}^2 et de S_z , à savoir $|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$ et $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$, symbolisés de manière plus courte comme $|+\rangle$ et $|-\rangle$, respectivement. On écrit donc :

$$\vec{S}^2 |\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\pm\rangle \quad (3.12)$$

et

$$S_z |\pm\rangle = \pm\hbar |\pm\rangle \quad (3.13)$$

Aussi, on a

$$S_+ |+\rangle = 0, \quad S_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle, \quad S_- |+\rangle = \hbar |-\rangle, \quad \text{et} \quad S_- |-\rangle = 0 \quad (3.14)$$

D'autre part, les opérateurs S_x, S_y et S_z peuvent être représentées dans la base $|+\rangle, |-\rangle$, sous forme de matrices 2×2 , appelées matrices de Pauli :

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

4 Interaction magnétique :

Une théorie simple du paramagnétique dans les solides suppose que les moments magnétiques portés par des ions dans un isolant ou encore par les électrons de conduction, n'interagissent pas entre eux. Toutefois, cette théorie est incapable d'expliquer de nombreux phénomènes ayant lieu dans des matériaux paramagnétiques. D'autre part, les matériaux ferromagnétiques et même ceux antiferromagnétiques ont, en l'absence d'un champ magnétique externe, un ordre d'orientations de leurs moments magnétiques, attribué essentiellement à l'interaction entre leurs moments magnétiques, favorisant, dans le cas du ferromagnétisme, une orientation parallèle, et une

orientation antiparallèle, dans le cas d'antiferromagnétisme. Cette interaction entre moments magnétiques a lieu à travers leurs champs magnétiques respectifs selon trois types d'interaction : une interaction dipôle-dipôle, une interaction spin-orbite et une interaction électrostatique électron-électron. Cependant les deux premières sources d'interactions sont très faibles, alors que le troisième type d'interaction est le plus dominant.

Pour expliquer l'effet de cette interaction, il serait inutile d'utiliser l'approximation de l'électron libre débouchant sur la théorie des bandes, laquelle a permis d'expliquer les propriétés physiques des matériaux non magnétiques, en prenant en considérations les interactions entre électrons sous forme de champs auto-consistent.

5 Système à deux électrons :

L'application du principe d'exclusion de Pauli à un système d'électrons fait apparaître un effet magnétique même si l'hamiltonien d'un tel système ne contient pas de terme représentant le spin des électrons. Cela peut être illustré sur un exemple d'un système à deux électrons (par exemple, l'atome d'hélium). En effet, la forme générale de la fonction d'onde stationnaire Ψ d'un tel système peut s'écrire comme le produit d'un état stationnaire de type orbital (espace) $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, solution de l'hamiltonien indépendant du temps de deux électrons :

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right] \psi = E\psi \quad (3.16)$$

et une partie relative aux états de spin, incluant des combinaisons linéaires des quatre états de spins possible, à savoir :

$$|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$$

La contrainte que la fonction d'onde d'un système de fermions doit être antisymétrique (émanant du principe d'indiscernabilité) dicte les combinaisons linéaires appropriées, avec des valeurs bien définies du spin total S ainsi que sa composante suivant un axe S_z . Ainsi, on aura un état singulet (antisymétrique)

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad \text{avec} \quad S = 0 \quad \text{et} \quad S_z = 0$$

et un triplet à trois états (symétriques)

$$|\uparrow\uparrow\rangle \quad \text{avec} \quad S = 1 \quad \text{et} \quad S_z = 1,$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad \text{avec} \quad S = 1 \quad \text{et} \quad S_z = 0$$

et

$$|\downarrow\downarrow\rangle \quad \text{avec} \quad S = 1 \quad \text{et} \quad S_z = -1$$

Il existe donc une corrélation entre la partie spatiale (état stationnaire orbital) et la partie de la fonction d'onde du système représentant le spin : un état stationnaire orbital symétrique doit combiner avec un état singulet et une énergie propre E_s , alors qu'un état stationnaire orbital antisymétrique doit combiner avec un état triplet et une énergie propre E_t . Un théorème existe stipulant que l'état fondamental d'un système à deux électrons (n'est applicable que pour ce cas précis) doit être symétrique (état stationnaire orbital), celui qui combine avec un état singulet. E_s est donc l'énergie de l'état fondamental de ce système. Cela montre que l'alignement

antiparallèle des spins ($S = 0$) de deux électrons est énergétiquement plus favorable qu'un alignement parallèle ($S = 1$) des spins des électrons.

Une manière ingénieuse mais moins orthodoxe (montée en toute pièce!), car ne pouvant pas être dérivée à partir des calculs *ab initio*, a été proposée par Heisenberg afin d'introduire l'effet de spin dans un système à deux électrons, et plus précisément la levée de dégénérescence dans les états excités de l'atome d'hélium. En effet, Heisenberg proposa un modèle simple d'un hamiltonien de spins (en anglais, *toy model*) qui aura une valeur propre E_s une fois appliquée à un état singulet,

$$\mathcal{H}^{\text{spin}}|S = 0 \rangle = E_s |S = 0 \rangle \quad (3.17)$$

et une énergie propre E_t , une fois appliquée à un état triplet

$$\mathcal{H}^{\text{spin}}|S = 1 \rangle = E_t |S = 1 \rangle \quad (3.18)$$

Pour cela, il proposa de procéder de la manière suivante :

$$S^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \frac{3}{2} + 2 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (3.19)$$

puisque chaque opérateur de spin pour un seul électron satisfait la relation : $S_i^2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)$. Il est utile d'écrire

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2} \left(S^2 - \frac{3}{2} \right) \quad (3.20)$$

D'autre part, S^2 appliqué à un état propre de spin S aura une valeur propre égale à $S(S + 1)$. Ainsi, pour un état singulet ($S = 0$)

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 |S = 0 \rangle = \frac{1}{2} \left(S^2 - \frac{3}{2} \right) |S = 0 \rangle = -\frac{3}{4} |S = 0 \rangle \quad (3.21)$$

alors que pour un état triplet ($S = 1$)

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 |S = 1 \rangle = \frac{1}{2} \left(S^2 - \frac{3}{2} \right) |S = 1 \rangle = 2 - \frac{3}{2} |S = 1 \rangle = \frac{1}{4} |S = 1 \rangle \quad (3.22)$$

Avec un peu de perspicacité, et en se basant sur les résultats précédents, il est possible d'écrire le hamiltonien qui fait apparaître les spins du système sous la forme suivante :

$$\mathcal{H}^{\text{spin}} = \frac{1}{4} (E_s + 3 E_t) - (E_s - E_t) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (3.23)$$

Le premier terme dans $\mathcal{H}^{\text{spin}}$ étant commun aux deux types d'états, il est possible de redéfinir le zéro de l'échelle énergétique et réécrire l'hamiltonien ci-dessus sous la forme :

$$\mathcal{H}^{\text{spin}} = J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad \text{avec} \quad J = E_t - E_s \quad (3.24)$$

Pour une constante (intégrale) de couplage $J > 0$, l'hamiltonien $\mathcal{H}^{\text{spin}}$ a une valeur minimale si le produit scalaire $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = -S_1 S_2$, correspondant à deux spins antiparallèles (antiferromagnétisme). D'autre part, pour $J < 0$, $\mathcal{H}^{\text{spin}}$ a une valeur minimale si le produit scalaire $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = S_1 S_2$ correspondant à deux spins parallèles (ferromagnétisme).

Il est utile de noter que le couplage entre les deux spins ne dépend que de leur orientation relative.

6 Le modèle d'Heisenberg

Lorsque les ions magnétiques individuels possédant des moments magnétiques de spin non nuls sont suffisamment éloignés, de telle sorte que le recouvrement entre les fonctions d'onde électroniques des électrons sur des ions voisins est très faible, il est possible de généraliser l'hamiltonien à deux électrons à un système à N électrons et écrire

$$\mathcal{H}^{\text{spin}} = \sum J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (3.25)$$

appelé communément sous le nom de l'hamiltonien de Heisenberg, avec J_{ij} sont les constantes (intégrales) de couplage d'échange. L'hamiltonien ci-dessus respecte une symétrie $SU(2)$ qui peut être brisée si d'autres interactions seront prises en compte (un champ magnétique extérieur, par exemple).

Historiquement, le modèle de Heisenberg (établi en 1926) pour un couplage antiferromagnétique avec $s = \frac{1}{2}$ était l'un des premiers modèles à plusieurs électrons (many-body problem) de la physique moderne à avoir son état fondamental résolu analytiquement. En effet, la méthode pour obtenir et énumérer les vecteurs propres de l'hamiltonien de spins à une dimension a été donnée par Bethe en 1931. L'énergie de l'état fondamental est calculée par Hulthén en 1938, en utilisant la méthode de Bethe, laquelle prédit un état fondamental non dégénéré, de type singulet décrit par le nombre quantique $S = 0$ et donc non magnétique, avec des fluctuations même à température nulle. Il est utile de rappeler que la méthode de Bethe, connue sous le nom de "Bethe ansatz" n'est valable que pour le cas de $s = \frac{1}{2}$. En plus, les excitations élémentaires dans ce modèle ne présentent pas un gap d'énergie et les fonctions de corrélations décroissent selon des lois en puissance (non pas exponentiellement).

Dans ce type de couplage, aucune direction des moments magnétiques de spin voisins n'est privilégiée, puisque les moments de spins sont exprimées en terme de scalaire. En d'autres termes, l'intensité de couplage entre deux spins ne tient pas compte de leurs directions respectives, mais seulement de la distance entre ces derniers, d'où la caractéristique d'isotrope conféré à ce modèle.

Le spin total ainsi que sa composante suivant l'axe z sont des quantités conservées. Les états propres du Hamiltonien seront donc labellisés par les nombres quantiques S_{tot} et S_z^{tot} , et dégénérés $2S_{\text{tot}} + 1$ fois.

Les opérateurs de spins obéissent aux relations de commutation suivantes :

$$S_{x,i} S_{y,i} - S_{y,i} S_{x,i} = i \hbar S_{z,i} \quad (\text{avec une permutation cyclique } x,y,z) \quad (3.26)$$

où $S_{x,i}$, $S_{y,i}$ et $S_{z,i}$ peuvent être interprétés comme les composantes du moment magnétique de spin d'un atome sur le site i . Il est utile de remarquer que les composantes correspondant à deux sites différents $i \neq j$ commutent entre elles :

$$S_{x,i} S_{y,j} - S_{y,i} S_{x,j} = 0 \quad (3.27)$$

D'autre part, les trois composantes du moment magnétique de spin obéissent à la relation suivante :

$$S_{x,i}^2 + S_{y,i}^2 + S_{z,i}^2 = \hbar s_i (s_i + 1) \quad (3.28)$$

On suppose que tous les atomes ont le même moment magnétique de spin, $s_i = s$ avec $\hbar = 1$, où $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$.

Pour le cas $s = \frac{1}{2}$, les composantes de l'opérateur du moment magnétique de spin s'écrivent :

$$S_{x,i} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_{y,i} = \frac{i}{2} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_{z,i} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.29)$$

et qui opèrent sur une base de spineurs “haut” et “bas” :

$$\text{haut} \equiv \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \text{bas} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

qui décrivent les deux états possibles pour un spin $\frac{1}{2}$.

D'autre part, les composantes de l'opérateur du moment magnétique de spin $s = 1$ s'écrivent :

$$S_i^+ = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_i^- = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix}, \quad S_i^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.31)$$

et qui opèrent sur une base de vecteurs :

$$\text{haut} \equiv \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \text{bas} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \text{nul} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

qui décrivent les trois états possibles pour un spin $s = 1$, avec $S_i^\pm = S_{i,x} \pm iS_{i,y}$.

Étudier des systèmes magnétiques à la lumière du modèle d'Heisenberg s'avère une tâche très dure. Pour cela, plusieurs variantes du modèle d'hamiltonien d'Heisenberg ont été établies. On peut citer le modèle XXZ dont l'hamiltonien s'écrit comme

$$\mathcal{H}^{\text{spin}} = \sum_{i,j} \left[\frac{1}{2} J_{i,j}^{x,y} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + J_{i,j}^{x,y} S_i^z S_j^z \right] \quad (3.33)$$

ou encore le modèle d'Ising dans sa forme la plus simple

$$\mathcal{H}^{\text{spin}} = J \sum_i S_i^z S_{i+1}^z \quad (3.34)$$

7 Conjecture de Haldane :

Avant le travail de Haldane, en 1983, on pensait que les propriétés magnétiques des chaînes antiferromagnétiques n'étaient pas sensibles aux valeurs des spins y existant. En se basant sur une approche semi-classique, Haldane a émis une conjecture selon laquelle la physique des chaînes antiferromagnétiques isotropes (Heisenberg) doit être différente selon que l'on considère des spins entiers ou demi-entiers [14]. Dans le cas de spins demi-entiers, il a trouvé que le comportement est essentiellement celui de la chaîne $s = \frac{1}{2}$: absence de gap et fonctions de corrélation décroissant selon une loi en puissance. Par contre, dans le cas de spins entiers il prédit la présence d'un gap dans le spectre d'énergie, même si l'état fondamental du hamiltonien isotrope se trouve encore être un état singulet non magnétique ($S = 0$) ; avec une longueur de corrélation et des fonctions de corrélation qui décroissent exponentiellement.

Chapitre 4

Implémentation de l'algorithme :

Dans ce chapitre nous allons illustrer à travers un exemple simple, la manière avec laquelle la méthode numérique de renormalisation par la matrice densité est appliquée à une chaîne de spins antiferromagnétique dans le cadre du modèle de Heisenberg. Cela permettra au lecteur intéressé par l'application de la méthode numérique de se mettre dans le bain et de pouvoir lui-même faire ses calculs sans peine.

On se limitera dans cet exemple au cas d'une chaîne de spins $\frac{1}{2}$ antiferromagnétique avec un couplage constant avec les plus proches voisins, dont l'hamiltonien de spins s'écrit comme :

$$H = J \sum_i S_i S_{i+1} = S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) \quad (4.1)$$

où J est pris égal à l'unité.

$$S_i^\pm = S_i^x \pm i S_i^y = \frac{1}{2}(\sigma^x \pm i\sigma^y) \quad , \quad S_i^z = \frac{1}{2}\sigma^z \quad (4.2)$$

où σ^x , σ^y et σ^z sont les matrices de Pauli données par

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

Les états de spins possibles pour un site sont $|d_1\rangle = |\uparrow\rangle$ et $|d_2\rangle = |\downarrow\rangle$ (cette notation est empruntée au travail de A. Malvezzi [15]). On représente un bloc de spins l avec une base de dimension m par $B(l; m)$ (m est le nombre d'états retenus lors de la procédure de renormalisation, qui doit être inférieure à la dimension du bloc effectif).

On commence avec deux blocs $B_L(1, 2)$ et $B_R(1, 2)$ (L pour left (gauche) et R pour right (droite)), chacun contenant un seul site. Les états possibles du bloc sont :

$$|b_1\rangle = |\uparrow\rangle, \quad |b_2\rangle = |\downarrow\rangle. \quad (4.4)$$

Après, un site est rajouté à chaque bloc. Par symétrie, le bloc à droite est obtenu par réflexion. Concentrons-nous sur le déroulement de la procédure par rapport au bloc à gauche. Ainsi, le bloc à gauche élargi s'écrit

$$\begin{aligned} |b_1^e\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |b_2^e\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle \\ |b_3^e\rangle &= |\downarrow\uparrow\rangle \\ |b_4^e\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (4.5)$$

L'hamiltonien H_e^L du bloc élargi $B_L(2,4)$ s'écrit comme un produit tensoriel des matrices représentant chaque site

$$H_e^L = H_B \otimes I_d + I_b \otimes H_B + \frac{1}{2}(S_b^+ \otimes S_d^- + S_b^- \otimes S_d^+) + S_b^z \otimes S_d^z \quad (4.6)$$

Dans l'équation (4.6) les indices b et d représentent les opérateurs agissant dans l'espace de Hilbert du bloc et du site rajouté, respectivement, et I est la matrice unité. H_B est une matrice d'éléments nuls qui représente un site isolé sans champ magnétique externe appliqué. Ainsi

$$\begin{aligned} H_e^L = & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ & + \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ & + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.7)$$

ce qui devient :

$$H_e^L = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

Dans le même esprit, le superbloc est construit comme un produit tensoriel des matrices représentant le bloc à droite et le bloc à gauche, en plus des sites extrêmes faisant office de connection entre les deux blocs. Ainsi,

$$H_s = H_e^L \otimes I_e^R + I_e^L \otimes H_e^R + \frac{1}{2} [(S_r^+)^L \otimes (S_l^-)^R + (S_r^-)^L \otimes (S_l^+)^R] + (S_r^z)^L \otimes (S_l^z)^R \quad (4.9)$$

où H_e^L et H_e^R sont les matrices représentant les blocs de droite et de gauche élargis (avec deux sites chacun), I_e^R et I_e^L des matrices unités 4×4 , $(S_r^+)^L$, $(S_r^-)^L$ et $(S_r^z)^L$ sont les matrices représentant les opérateurs du spin du site extrême sur le bloc à gauche, alors que $(S_l^+)^R$, $(S_l^-)^R$ et $(S_l^z)^R$ les matrices représentant les opérateurs du spin du site extrême sur le bloc à droite. Tous ces opérateurs sont représentés dans la base du bloc élargi. Les sites extrêmes servent à connecter les deux blocs . par exemple, la matrice $(S_r^+)^L$ s'écrit

$$(S_r^+)^L = I_b \otimes S_d^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

Ainsi, la base du superbloc contient 16 états : $\{| \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \rangle, | \uparrow\uparrow\uparrow\downarrow \rangle, \dots, | \downarrow\downarrow\downarrow\uparrow \rangle, | \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \rangle\}$. Par conséquent, tout opérateur dans le superbloc doit être représenté dans cette base.

L'étape suivante consiste à diagonaliser la matrice hamiltonienne du superbloc H_s , utiliser l'état fondamental pour construire la matrice densité ρ , selon l'équation (2.5). Contrairement à un simple système, où la diagonalisation est facile, il sera utile, pour un système très grand, de pouvoir retenir un nombre considérable d'états dans la procédure de renormalisation, afin d'obtenir des résultats acceptables. Pour cela, il est impératif que le bloc avec lequel on débute la procédure soit d'une taille largement plus grande que celle utilisée dans cet exemple démonstratif, ce qui rend la diagonalisation de la matrice hamiltonienne du superbloc une tâche onéreuse.

Il est utile de noter que la base utilisée dans la représentation du superbloc contient des états correspondant à plusieurs valeurs de la composante z du spin (un nombre quantique conservé).

Ainsi, on peut choisir à partir de cette matrice 16×16 des éléments correspondant à certaines valeurs de S_z^{tot} , ce qui diminuera de façon drastique la taille des matrices à diagonaliser.

Dans l'exemple présent, il se trouve que l'état fondamental du système appartient au sous-espace $S^z = 0$ (état non magnétique), avec les états de base : $\{|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle\}$.

Par conséquent, la matrice à diagonaliser est seulement 6×6 , ce qui permettra d'accélérer les calculs numériques. De ce fait, l'hamiltonien du superbloc H_s s'écrit dans la base réduite (de 6 états) comme

$$H_s^{(0)} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & -3 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -3 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

L'état fondamental est obtenu après diagonalisation

$$|\Psi_0\rangle = \begin{pmatrix} 0.1494 \\ 0.4082 \\ -0.5571 \\ -0.5571 \\ 0.4082 \\ 0.1494 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Cela nous permet d'écrire la matrice ρ correspondant au bloc de gauche, sous la forme

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 4.7790 & -4.5562 & 0 \\ 0 & -4.5562 & 4.7790 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

Notons que la matrice densité ρ et la matrice hamiltonien H_e^L dans l'équation (4.8)) sont du même ordre, et partagent la même structure matricielle.

Dans cet exemple, les valeurs propres de ρ sont obtenues par diagonalisation de la matrice densité : $\omega_1 = 0.933$ et $\omega_2 = \omega_3 = \omega_4 = 0.022$. Nous avons décidé de retenir trois états $m = 3$ pour la procédure de renormalisation, pour cela on utilise les trois premiers vecteurs propres de ρ correspondant aux plus grandes valeurs propres, à savoir :

$$|u_1\rangle = \begin{pmatrix} 0.0000 \\ -0.7071 \\ 0.7071 \\ 0.0000 \end{pmatrix}, \quad |u_2\rangle = \begin{pmatrix} -0.5499 \\ 0.3940 \\ 0.3940 \\ -0.6222 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |u_3\rangle = \begin{pmatrix} 0.8076 \\ 0.1164 \\ 0.1164 \\ -0.5663 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Dans ce cas, l'exactitude de troncature est donnée par la soustraction de 1 des valeurs propres écartées, à savoir :

$$1 - 0.022 = 0.988 \quad (4.15)$$

Nous formons maintenant la matrice de troncature O , dont les rangées sont les trois états

propres ci-dessus.

$$0 = \begin{pmatrix} 0.0000 & -0.7071 & 0.7071 & 0.0000 \\ -0.5499 & 0.3940 & 0.3940 & -0.6222 \\ 0.8076 & 0.1164 & 0.1164 & -0.5663 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

$$H_e^L(B(2,3)) = O^{(1)} H_e^L(B(2,4)) O^{\dagger(1)} \quad (4.17)$$

où $H_e^L(B(2,4))$ est l'hamiltonien du bloc élargi de gauche dans la base (effective) à quatre états transformé à travers l'opérateur de troncature $O^{(1)}(3,4)$ (1 sur O indique la première étape de renormalisation) en une matrice 3×3 représentant l'opérateur renormalisée du même bloc $H_e^L(B(2,3))$ dans la nouvelle base à 3 états.

$$H_e^L(B(2,3)) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0.000 & -0.707 & 0.707 & 0.000 \\ -0.549 & 0.394 & 0.394 & -0.622 \\ 0.807 & 0.116 & 0.116 & -0.566 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.000 & -0.549 & 0.807 \\ -0.707 & 0.394 & 0.116 \\ 0.707 & 0.394 & 0.116 \\ 0.000 & -0.622 & -0.566 \end{pmatrix}$$

Ce qui donne

$$H_e^L(B(2,3)) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -3.000 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.998 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.998 \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

De même, les autres opérateurs sont transformés de la même manière vers la nouvelle base réduite. Par exemple,

$$S_r^+(B(2,3)) = O^{(1)}(S_r^+)_e(B(2,4)) O^{\dagger(1)} \quad (4.19)$$

L'algorithme du système infini est répétée jusqu'à atteindre la longueur désirée de la chaîne. En suite, la procédure du système fini est entamée afin d'améliorer les résultats.

Chapitre 5

Résultats et discussions :

Dans ce chapitre nous allons présenter et commenter les résultats de l'étude numérique de quelques caractéristiques physiques d'une chaîne de spins dans le cadre du modèle d'Heisenberg antiferromagnétique à température nulle. En effet, l'étude numérique présentée ci-après est basée sur l'application de deux méthodes numériques, à savoir la diagonalisation exacte de l'hamiltonien de Heisenberg et la méthode de renormalisation par la matrice densité (DMRG).

1 Diagonalisation exacte :

1.1 Spectre énergétique d'une chaîne de spin $s = \frac{1}{2}$:

La méthode de la diagonalisation exacte consiste à construire la matrice de l'hamiltonien de Heisenberg dans une base constituée de vecteurs sur lesquels agissent, respectivement, les opérateurs spins sur site. Sur la figure (5.1) on présente le spectre énergétique d'une chaîne de 8 spins $\frac{1}{2}$ pour les cas suivants :

1. une chaîne avec des conditions aux limites périodiques (CLP) avec un couplage constant $J = 1.0$ (entre plus proches voisins).
2. une chaîne avec des conditions aux limites ouvertes (CLO) et un couplage constant $J = 1.0$.
3. une chaîne avec des conditions aux limites périodiques et un couplage de valeurs aléatoires de distribution normale dans un intervalle $J = 0.5 - 1.5$.
4. une chaîne avec des conditions aux limites ouvertes et un couplage de valeurs aléatoires de distribution normale dans un intervalle $J = 0.5 - 1.5$.

Rappelons que l'hamiltonien de Heisenberg pour une chaîne de spins antiferromagnétique avec un couplage (J positif) entre spins plus proches voisins s'écrit :

$$H = J \sum_i S_i S_{i+1} = J \sum_i S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) \quad (5.1)$$

Dans le cas d'une chaîne de 8 spins $\frac{1}{2}$, la base utilisée pour construire la matrice hamiltonienne de Heisenberg est constituée de $2^8 = 256$ vecteurs :

$$\{ | \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \rangle, | \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \rangle, | \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \rangle, \dots, | \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \uparrow \rangle, | \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \rangle \}$$

où les flèches pointant vers le haut \uparrow et vers le bas \downarrow représentent des spins $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$, respectivement. Cela est dû au fait qu'un spin sur un site peut être soit \uparrow soit \downarrow .

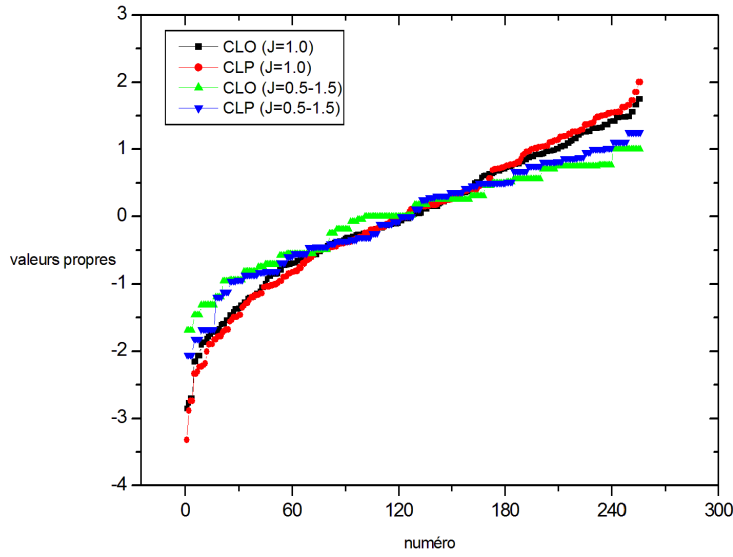


FIGURE 5.1 – Valeurs propres de l’hamiltonien de spins de Heisenberg pour une chaîne de 8 spins $s = \frac{1}{2}$ antiferromagnétique à température nulle, et ce pour deux cas de conditions aux limites (CLO : conditions aux limites ouvertes ; CLP : conditions aux limites périodiques) et deux types de couplage : constant ($J=1.0$) et aléatoire ($J=0.5-1.5$).

L’utilisation des conditions aux limites périodiques sur une chaîne de spins a pour effet d’élargir la bande du spectre énergétique, mais aussi d’abaisser les valeurs d’énergie des états propres du système (voir tableau (5.1)). D’autre part, un couplage constant entre tous les spins a un effet double : élargir la bande énergétique du système et ouvrir un gap d’énergie entre l’état fondamental et le premier état excité. Toutefois, l’effet d’entraîner un espace entre les énergies propres est moins prononcé au milieu de la bande énergétique. Il est utile de remarquer qu’un couplage non constant entraîne une dégénérescence dans le spectre énergétique (plusieurs états propres avec la même énergie).

	CLO($J=1.0$)	CLP($J=1.0$)	CLO($J=0.5-1.5$)	CLP($J=0.5-1.5$)
Largeur de la bande	4.60372	5.32033	2.68969	3.03021
État fondamental	-2.85373	-3.32033	-1.68969	-2.05207
Premier état excité	-2.76934	-2.88581	-1.68969	-2.05206
Deuxième état excité	-2.70255	-2.73982	-1.68969	-2.05206

TABLE 5.1 – Largeur de la bande et les trois valeurs propres du spectre énergétique d’une chaîne de 8 spins $s = \frac{1}{2}$ antiferromagnétique à température nulle, et ce pour deux cas de conditions aux limites (CLO : conditions aux limites ouvertes ; CLP : conditions aux limites périodiques) et deux types de couplage : constant ($J=1.0$) et aléatoire ($J=0.5-1.5$).

D’autre part, l’état fondamental d’une chaîne de spins $\frac{1}{2}$ dans le modèle d’Heisenberg appartient au secteur $S_z^{\text{total}} = 0$. Il serait donc possible d’utiliser ce résultat théorique pour réduire la taille de la matrice hamiltonienne à diagonaliser. Ainsi, on peut obtenir l’état fondamental d’une chaîne de 12 spins $s = \frac{1}{2}$, à laquelle correspond une matrice hamiltonienne de taille

4096×4096 , en diagonalisant une matrice de seulement une taille de 924×924 , ce qui nécessite évidemment moins d'espace et de temps de calcul.

1.2 Spectre énergétique d'une chaîne de spin $s = 1$:

Sur la figure (5.2) on présente le spectre énergétique d'une chaîne de 6 spins $s = 1$ pour les mêmes cas précédents. Dans ce cas, la matrice hamiltonienne à diagonaliser est d'ordre $3^6 = 729$. Cela est due au fait qu'un spin $s = 1$ sur un site peut prendre trois valeurs : $|1 \rangle$, $|0 \rangle$ et $|-1 \rangle$.

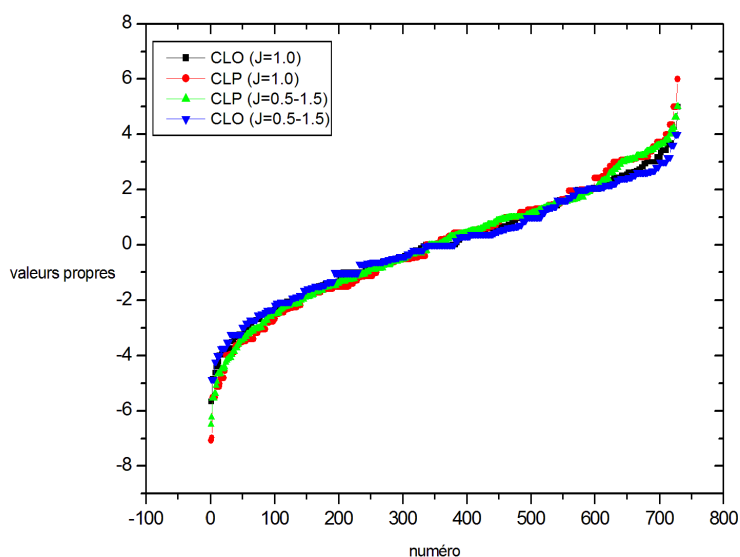


FIGURE 5.2 – Valeurs propres de l'hamiltonien de spins de Heisenberg pour une chaîne de 6 spins $s = 1$ antiferromagnétique à température nulle, et ce pour deux cas de conditions aux limites (CLO : conditions aux limites ouvertes; CLP : conditions aux limites périodiques) et deux types de couplage : constant ($J=1.0$) et aléatoire ($J=0.5-1.5$).

Encore une fois, l'utilisation des conditions aux limites périodiques sur une chaîne de spins $s = 1$ a pour effet d'élargir la bande du spectre énergétique, mais aussi d'abaisser les valeurs d'énergie des états propres du système (voir tableau (5.2)). Dans le cas d'un spin $s = 1$, les conditions aux limites périodiques ont un effet additionnel, en l'occurrence l'ouverture d'un gap d'énergie d'un système avec un couplage constant. D'autre part, un couplage constant entre tous les spins a un effet double : élargir la bande énergétique du système et ouvrir un gap d'énergie entre l'état fondamental et le premier état excité, mais cette fois-ci seulement dans un système avec des conditions aux limites périodiques. Il est utile de remarquer qu'un couplage non constant entraîne une dégénérescence dans le spectre énergétique (plusieurs états propres avec la même énergie).

1.3 Fonction de corrélation entre spins :

La fonction de corrélation entre composantes suivant z des spins sur une chaîne est définie comme

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \langle \Psi_0 | S_i^z S_j^z | \Psi_0 \rangle$$

	CLO(J=1.0)	CLP(J=1.0)	CLO(J=0.5-1.5)	CLP(J=0.5-1.5)
Largeur de la bande	10.66129	13.06885	8.84662	11.49120
État fondamental	-5.66129	-7.06885	-4.84663	-6.49120
Premier état excité	-5.66129	-6.96862	-4.84663	-6.23059
Deuxième état excité	-4.84662	-5.50710	-4.84663	-5.53062

TABLE 5.2 – Largeur de la bande et les trois valeurs propres du spectre énergétique d’une chaîne de 8 spins $s = 1$ antiferromagnétique à température nulle, et ce pour deux cas de conditions aux limites (CLO : conditions aux limites ouvertes ; CLP : conditions aux limites périodiques) et deux types de couplage : constant ($J=1.0$) et aléatoire ($J=0.5-1.5$).

où $|\Psi_0\rangle$ est le vecteur propre correspondant à l’état fondamental du système. Sur la figure (5.3), on présente la fonction de corrélation $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ entre spins $s = \frac{1}{2}$ sur deux sites i et j en fonction de la distance entre les deux sites $|i-j|$ (en unité de la distance atomique entre site). La

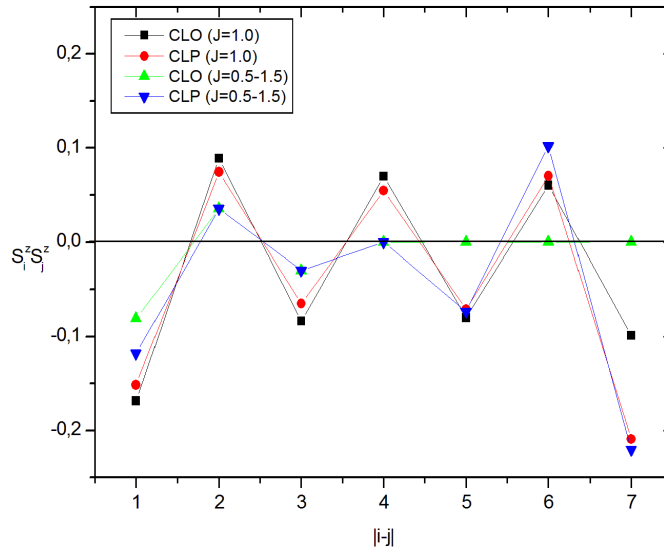


FIGURE 5.3 – Fonction de corrélation $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ entre spins $s = \frac{1}{2}$ sur deux sites i et j d’une chaîne de 8 spins en fonction de la distance entre les deux sites $|i-j|$ (en unité de la distance atomique entre site), et ce pour deux cas de conditions aux limites (CLO : conditions aux limites ouvertes ; CLP : conditions aux limites périodiques) et deux types de couplage : constant ($J=1.0$) et aléatoire ($J=0.5-1.5$)

première remarque à faire concernant la fonction de corrélation $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ est que le signe de ses valeurs s’alterne selon la distance entre les deux sites concernés. Ainsi, $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$ a un signe négatif, alors que $\langle S_i^z S_{i+2}^z \rangle$ a un signe positif, conformément aux résultats théoriques [14]. D’autre part, la fonction de corrélation $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ décroît jusqu’à s’annuler pour un système avec des conditions aux limites ouvertes et un couplage aléatoire entre sites plus proches voisins. Un couplage constant évite à la fonction de corrélation cette décroissance. Ce résultat doit toutefois être confirmé sur des chaînes plus longues. Aussi, les conditions aux limites périodiques font que la fonction de corrélation entre les deux sites extrêmes soit de valeur conséquente.

Sur la figure (5.4) on présente la fonction de corrélation $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ entre spins $s = 1$ sur

deux sites i et j , en fonction de la distance entre les deux sites $|i - j|$. Dans le cas présent, l'alternance en signe (indicateur d'un antiferromagnétisme) de la fonction de corrélation en fonction de la distance entre les sites est présente, sauf pour le cas d'un couplage aléatoire avec des conditions aux limites ouvertes. Toutefois, on n'a pas d'explication plausible de ce résultat. La décroissance de la fonction de corrélation en fonction de la distance entre spins n'est pas si claire. On pense que la taille très petite de la chaîne n'est pas en mesure de reproduire le résultat général théorique selon lequel la fonction de corrélation décroît exponentiellement avec la distance entre spins.

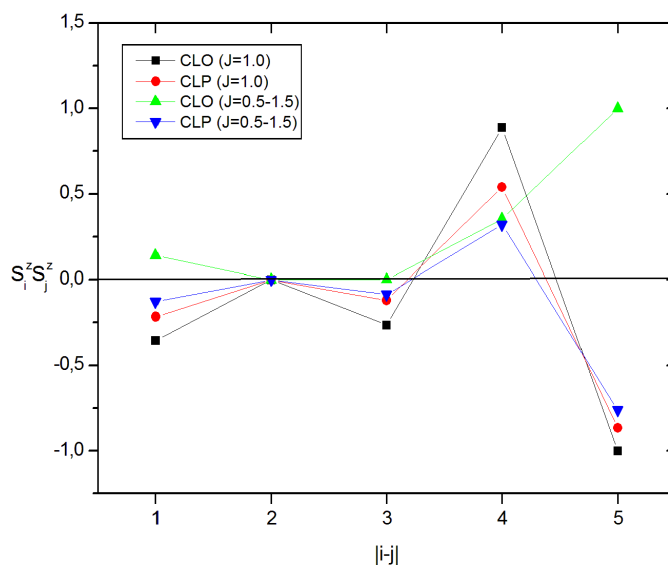


FIGURE 5.4 – Fonction de corrélation $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ entre spins $s = 1$ sur deux sites i et j d'une chaîne de 8 spins en fonction de la distance entre les deux sites $|i - j|$ (en unité de la distance atomique entre site) et ce pour deux cas de conditions aux limites (CLO : conditions aux limites ouvertes ; CLP : conditions aux limites périodiques) et deux types de couplage : constant ($J=1.0$) et aléatoire ($J=0.5-1.5$)

2 Renormalisation par la matrice densité :

Nous commençons la présentation des résultats obtenus par l'application de la méthode numérique du groupe de renormalisation par la matrice densité (DMRG) à une chaîne de spins dans le cadre du modèle de Heisenberg par un exemple simple qui consiste à construire deux blocs (à droite et à gauche) contenant chacun trois (03) sites avec des spins $s = \frac{1}{2}$. L'hamiltonien du superbloc est une matrice 64×64 avec des conditions aux limites périodiques et un couplage constant $J = 1.0$. La diagonalisation de cette matrice permet de construire, à partir de l'état fondamental, la matrice densité des deux blocs (à droite et à gauche), qui sera, à son tour, diagonalisée. A ce stade, nous avons choisi cinq (05) vecteurs propres de la matrice densité correspondant aux plus grandes valeurs propres, pour ensuite construire une nouvelle base vers laquelle seront projetés tous les opérateurs qui agissent sur les blocs à droite et à gauche respectivement, comme cela a été déjà expliqué dans les chapitres précédents. Ces opérateurs seront représentés par des matrices 5×5 au lieu de 8×8 . Ensuite, nous insérons deux sites entre les deux blocs et nous construisons la matrice hamiltonienne du nouveau superbloc,

qui sera d'une taille 100×100 , au lieu de 256×256 . Il est utile de rappeler qu'en répétant la procédure ci-dessus, la taille effective de la matrice hamiltonienne du système croit comme $2^N \times 2^N$ (où N est le nombre de sites sur la chaîne), alors que la taille des matrices obtenues par la méthode DMRG gardent leurs tailles égales à $4m^2 \times 4m^2$. A l'issue de cette procédure numérique nous avons obtenu les résultats présentés sur le tableau (5.3), tout en les comparant à ceux obtenus par diagonalisation exacte (ED).

	ED	DMRG	Erreur %
État fondamental	-3.32033	-3.57574	7.69%
Premier état excité	-2.88581	-2.97261	3.0%
Deuxième état excité	-2.73982	-2.94915	7.64%

TABLE 5.3 – Les trois valeurs propres du spectre énergétique d'une chaîne de 8 spins $s = \frac{1}{2}$ anti-ferromagnétique à température nulle avec des conditions aux limites périodiques et un couplage constant $J = 1.0$. Les valeurs des énergies sont obtenues par deux méthodes : diagonalisation exacte (DE) et méthode de renormalisation par la matrice densité (DMRG).

L'énergie de l'état fondamental obtenue par la méthode DMRG est bien différente de celle obtenue par diagonalisation exacte, quoique celles-ci soient de même ordre. Cela est dû au fait que la procédure de renormalisation n'a été appliquée qu'une seule fois, avec un nombre d'états retenus très petit par rapport à ce qui est préconisé dans ce type de calculs. En plus, la phase de balayage (sweeping) n'a pas été faite, puisque celle-ci ne s'applique qu'une fois des chaînes de spins relativement longues sont atteintes.

Pour améliorer ces résultats, il serait utile de commencer la procédure par deux blocs contenant plus de sites (4 ou 5) pour pouvoir utiliser plus d'états dans la procédure de renormalisation, à condition que les matrices de ces blocs soient facilement diagonalisées de manière exacte (Tqli) ou du moins leurs états fondamentaux (Lanczos, Davidson, voir référence [9]).

D'autre part, les valeurs des énergies des états excités (le premier et le deuxième) obtenues par la méthode DMRG sont, elles aussi, différentes de celles obtenues par la diagonalisation exacte. Cela est dû au fait que la méthode numérique a été, initialement, conçue pour calculer seulement l'état fondamental.

Pour avoir une idée sur le déroulement de la procédure de renormalisation par la matrice densité appliquée à une chaîne de spins $s = \frac{1}{2}$, nous montrons sur la figure (5.5) l'évolution de l'énergie de l'état fondamental des systèmes obtenus lors de la construction et la diagonalisation des matrices du hamiltonien de Heisenberg. En effet, lors de la phase warm-up, nous avons commencé par construire deux blocs de 3 sites chacun. En rajoutant deux sites par étape, nous pouvons atteindre la taille de la chaîne désirée ($N=24$) après 8 itérations. A ce moment, nous entamons l'étape suivante qui consiste à agrandir le bloc à gauche tout en réduisant la taille du bloc à droite de telle sorte que la taille déjà atteinte du superbloc reste fixe. Ensuite, on inverse les rôles des blocs, tout en répétant la procédure de renormalisation jusqu'à ce la convergence de la valeur de l'énergie.

Sur les figures (5.6) et (5.7) nous montrons, respectivement, la variation de l'énergie de l'état fondamental E_0 et l'énergie du premier état excité en fonction de la taille de la chaîne de spins, et ce pour trois valeurs d'états retenus pendant la procédure de renormalisation : $m = 3$, $m = 5$ et $m = 7$. Deux remarques s'imposent à ce niveau : La première concerne la variation linéaire des états énergétiques en fonction de la taille du système N . Pour bien voir la variation des états énergétiques nous avons reporté ces valeurs d'énergie dans le tableau (5.4) pour une valeur

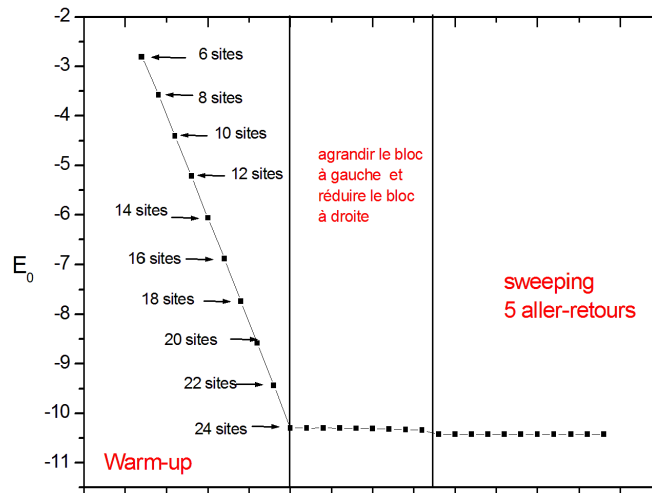


FIGURE 5.5 – Évolution de la valeur de l'énergie de l'état fondamental d'une chaîne de spin $s = \frac{1}{2}$ ($J=1.0$) avec $N = 24$ et $m = 5$, lors des étapes de renormalisation (warm-up et sweeping)

N	E_0	E_1
10	-4,28891	-3,9926
12	-5,14914	-4,8555
16	-6,90597	-6,67246
24	-10,4428	-10,24014
36	-15,7481	-15,56264
50	-21,94386	-21,75498

TABLE 5.4 – Les énergies de l'état fondamental et du premier état excité en fonction de la taille N d'une chaîne de spins $\frac{1}{2}$ avec des conditions aux limites périodiques et un couplage constant $J = 1.0$ pour un nombre d'états retenus égal à : $m = 7$.

de $m = 7$. Aussi, un fit linéaire donne les variations des énergies en fonction de N , ci-dessus :

$$E_0(N) = -0,44169 \times N + 0,14853 \quad (5.2)$$

et

$$E_1(N) = -0,44442 \times N + 0,44935 \quad (5.3)$$

La deuxième remarque concerne la convergence des valeurs des énergies vers des valeurs fixes lorsque le nombre d'états retenus augmente. Cet aspect peut être constaté sur le tableau (5.5) où nous avons reporté les valeurs d'énergie de l'état fondamental pour une chaîne de taille $N = 24$ en fonction du nombre d'états retenus.

Il est utile de remarquer que l'obtention de la valeur de l'énergie fondamentale d'une chaîne de 50 spins $\frac{1}{2}$ nécessite la diagonalisation (sans l'application des symétries du système) d'une matrice d'une taille, retenez vous, de $2^{50} = 1125899906842624!!!!!!!!!!!!$.

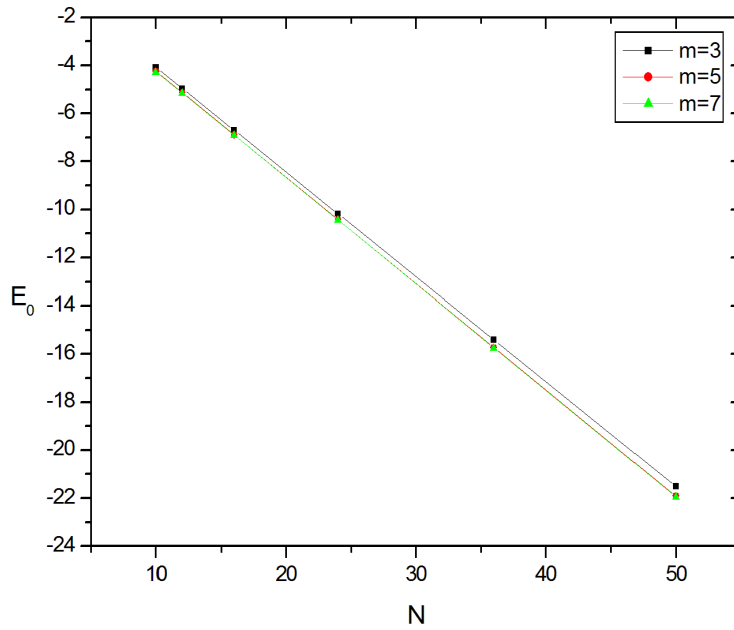


FIGURE 5.6 – L'énergie de l'état fondamental en fonction de la taille N d'une chaîne de spins $\frac{1}{2}$ avec des conditions aux limites périodiques et un couplage constant $J = 1.0$, et ce pour différents nombres d'états retenus : $m = 3$, $m = 5$ et $m = 7$.

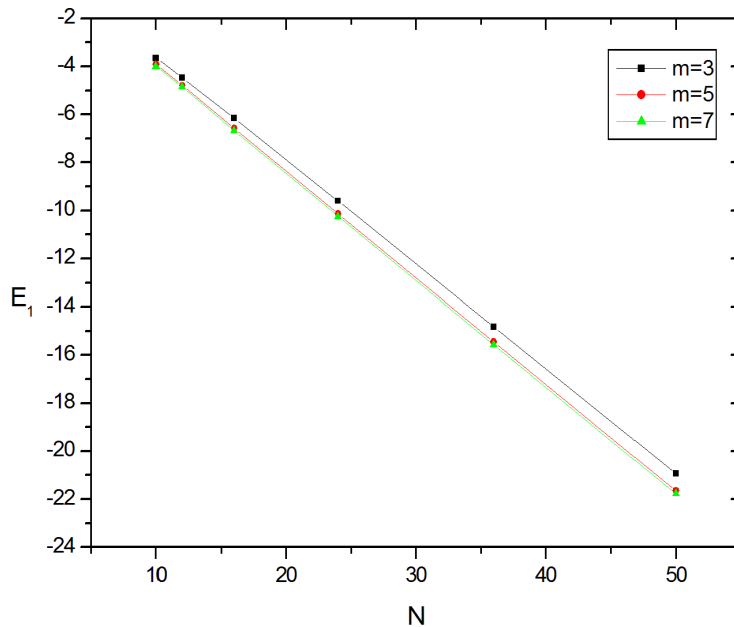


FIGURE 5.7 – L'énergie du premier état excité en fonction de la taille N d'une chaîne de spins $\frac{1}{2}$ avec des conditions aux limites périodiques et un couplage constant $J = 1.0$, et ce pour différents nombres d'états retenus : $m = 3$, $m = 5$ et $m = 7$

m	E_0
3	-10,17708
5	-10,42481
7	-10,4428

TABLE 5.5 – L'énergie de l'état fondamental en fonction du nombre d'états retenus d'une chaîne de 24 spins $\frac{1}{2}$ avec des conditions aux limites périodiques et un couplage constant $J = 1.0$.

Chapitre 6

Conclusion

Le présent travail a été principalement consacré à l'application de la méthode numérique de renormalisation par la matrice densité pour le calcul de l'énergie de l'état fondamental à une chaîne de spins $s = \frac{1}{2}$ antiferromagnétique soumise à des conditions aux limites périodiques et un couplage entre sites plus proches voisins à température nulle. C'était une occasion inouïe de se familiariser avec les techniques numériques de base de cette méthode, et j'ai pris beaucoup de temps à le faire. Un passage en revue historique des moments forts de l'application de la méthode à divers systèmes physiques fondamentaux s'est avéré nécessaire, puisqu'il nous a permis de bien assimiler les concepts fondamentaux sur lesquels se base la méthode. C'était aussi une occasion de revoir les concepts fondamentaux ainsi que l'outil mathématique relatif au modèle physique des spins sur sites voisins par Heisenberg. La recherche numérique de l'énergie de l'état fondamental de ce système s'avère une tâche très ardue et très coûteuse numériquement.

Dans le présent travail nous avons calculé l'énergie de l'état fondamental d'une chaîne de 8 spins $\frac{1}{2}$. L'effet de l'introduction des conditions aux limites périodiques et ouvertes sur la largeur de la bande d'énergie du système physique est étudié. En effet, les conditions aux limites périodiques entraînent un élargissement de la bande d'énergie. D'autre part, un couplage constant entre tous les spins a un effet double : élargir la bande énergétique du système et ouvrir un gap d'énergie entre l'état fondamental et le premier état excité. Cette étude nous a permis de confirmer un résultat important, à savoir qu'un système de spins $s = \frac{1}{2}$ dans le cadre du modèle de Heisenberg est sans gap d'énergie entre l'état fondamental et le premier état excité. La variation de la fonction de corrélation entre spins sur chaîne a été étudiée. En plus, le spectre énergétique d'une chaîne de 6 spins $s = 1$ a été étudié, ce qui nous a permis de confirmer un autre résultat relatif à ce système, à savoir l'existence d'un gap d'énergie entre l'état fondamental et le premier état excité.

L'application de la méthode de renormalisation par la matrice densité nous a permis d'obtenir l'énergie de l'état fondamental d'une chaîne de 50 spins $s = \frac{1}{2}$, chose impossible de réaliser par la méthode de la diagonalisation exacte. Un fit linéaire des résultats obtenus nous a permis d'écrire une expression de l'énergie de l'état fondamental ainsi que l'énergie du premier état excité en fonction de la longueur de la chaîne de spins.

Bibliographie

- [1] K.G. Wilson, The renormalization group : critical phenomena and the Kondo problem, Rev. Mod. Phys. 47, 4, 773-840 (1975).
- [2] Solid state physics, Neil W. Ashcroft and N. David Mermin (Harcourt), 1976.
- [3] J. Kondo. Progr. Theor. Phys., 37 :32, 1964.
- [4] S.R. White, How it all began, in Density-Matrix Renormalization ed. por I. Peschel et al. (Dresden conference in 1998), Springer (1999).
- [5] S.R. White. Real-Space Quantum Renormalization Groups. Phys. Rev. Lett. 68, 3487 (1992).
- [6] S.R. White. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. Phys. Rev. B48, 10345 (1993).
- [7] S.R. White and R.M. Noack. Density Matrix Formulation for Quantum Renormalization Groups. Phys. Rev. Lett. 69, 2863 (1992).
- [8] R.P. Feynman, Statistical Mechanics : A Set of Lectures, Benjamin (1972).
- [9] Numerical study of ground state properties of magnetic disordered systems : Application of Density Matrix Renormalization Group, Mohamed Mebrouki (thèse non publiée), 2013.
- [10] Fundamentals of materials science for engineering, William D. Callister, Jr. (John Wiley Sons, Inc.) 2001.
- [11] Quantum mechanics, C. Cohen-Tanoudji, B. Diu and F. Laloe, 1973.
- [12] The theory of magnetism made simple, Daniel C. Mattis (world scientific publishing) 2006.
- [13] An encyclopedia of exactly solved models in one dimension, Daniel C. Mattis (world scientific publishing) 1993.
- [14] F. D. M. Haldane, Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets : semiclassical quantization of solitons of the one-dimensional easy-axis N state, ? Phys. Rev. Lett. 50, 1153 (1983).
- [15] An Introduction to Numerical Methods in Low-Dimensional Quantum Systems, A. Luiz Malvezzi, Brazilian Journal of Physics, vol. 33, no. 1, March, 2003