

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



**Université Dr. Tahar Moulay de Saïda**

Faculté *des* Sciences  
Département *de* Physique

*Mémoire*

*Présenté pour l'obtention du diplôme de Master*

*Présentée par : Mr SAADA MOHAMMED AMINE*

*Spécialité : PHYSIQUE*

*Option : PHYSIQUE DES MATÉRIAUX*

*Intitulé*

*Ansatz de Bethe pour le XXX  
Modèle de Heisenberg*

**Soutenu le :\_jeudi 29 Octobre 2015**

**Devant le jury Composé de :**

**Président : Djaafri Tayeb**

**Rapporteur : Sehabi Toufik**

**Examineur : Djedid Ahmed**

**Examineur : Boudali Abdelkader**

*Année universitaire 2014-2015*

# Sommaire

<b>Introduction Générale</b> .....	02
<b>Chapitre I: Quelques notions de physique statistique et mécanique quantique</b>	
I. 1. Introduction.....	04
I. 2. Rappel de quelques notions .....	04
I. 2.a Etat physique .....	04
I. 2.b Fonction d'onde.....	04
I. 2.c Principe de superposition .....	05
I. 2.d Observables et opérateurs .....	05
I. 3. Description Statistique .....	08
I.4 Matrice de Transfert .....	11
<b>Chapitre II : Le modèle d'Heisenberg</b>	
II. 1. Introduction .....	15
II. 2. Définition du modèle .....	15
<b>Chapitre III : Détermination des valeurs d'énergie du modèle XXXI/2 d'Heisenberg pour M excitations</b>	
III. 1. Introduction .....	19
III. 2. Le modèle d'Heisenberg pour un type d'excitation .....	19
III. 3. Les excitations dans le modèle d'Heisenberg .....	21
III. 4. Ansatz de Bethe .....	22
III. 5. Déterminations des valeurs propres de l'Hamiltonien .....	23
a)- Cas d'une excitation (de type (3.11)) .....	23
b)- Cas de deux excitations (de type (3.12)).....	25
<b>Conclusion</b> .....	29
<b>Références</b> .....	31

# *Introduction Générale*

## ***Introduction Générale:***

Dans la physique statistique, les modèles sur réseaux font une grande partie de recherche grâce aux simplicités qu'ils présentent d'une part dans le calcul analytique des quantités physiques comme l'énergie, les fonctions d'onde, fonctions de corrélation, les exposants critiques,...et d'autre part dans la possibilité de simuler numériquement ces modèles.

Dans cette mémoire, on va considérer un modèle important dans ce domaine qui est le modèle d'Heisenberg à une dimension de spin  $\frac{1}{2}$  pour déterminer les valeurs propres de son Hamiltonien moyennant ce qu'on appelle l'Ansatz de Bethe fondé par Bethe en 1931.

Cette technique nous permet de tirer les valeurs propres de l'énergie pour chaque état de la chaîne quantique ainsi que la détermination de la forme des fonctions d'onde appropriées.

On va suivre le chemin suivant pour arriver à notre but : Le chapitre I sera des appels aux quelques notions de la physique statistique et la mécanique quantique. Le deuxième chapitre est une description détaillée du modèle d'Heisenberg. Le troisième chapitre représente le thème de cette mémoire où on définit l'Ansatz de Bethe et comment l'implémenter pour déduire les valeurs propres de l'énergie. Après on va donner une conclusion.

## **Chapitre I :**

### *Quelques notions de physique statistique et mécanique quantique*

## **I.1 Introduction :**

La matière condensée se définit par la propriété qu'un très grand nombre de particules interagissent entre elles fortement. Il n'est pas possible d'ignorer ces interactions ou de les considérer comme une petite perturbation. Pour définir des quantités macroscopiques, comme l'énergie libre, l'entropie, il faut, bien sûr, faire appel à la mécanique statistique quantique qui sera notre objectif dans ce chapitre. Voir les références dans [a].

## **I.2 Rappel de quelques notions:**

### **I.2.a Etat physique :**

Un état parfaitement connu est caractérisé en Mécanique Classique par la donnée des positions et des impulsions des  $N$  particules  $(q_i, p_i)$ , en Mécanique Quantique par un vecteur de l'espace de Hilbert  $|\psi\rangle$  en Mécanique Statistique, les états sont imparfaitement connus, d'où la nécessité d'un formalisme probabiliste. En Mécanique Quantique, à chaque système physique est associé un espace de Hilbert représentant l'ensemble des états possible de notre système.

### **I.2.b Fonction d'onde :**

A tout système quantique, on peut associer une fonction d'onde,  $\psi$ , qui décrit l'état de ce système en respectant les contraintes imposées par les relations d'Heisenberg.

Cette fonction peut être complexe et on l'exprime généralement en fonction des coordonnées d'espace et du temps.

Le module au carré de la fonction représente la densité de probabilité de trouver le système dans un volume  $dv$  de l'espace au temps  $t$  lorsqu'il se trouve dans l'état  $\psi$ .

$$|\psi|^2 = \psi^* \psi = \text{densité de probabilité}$$

Où  $\psi^*$  est la fonction complexe conjuguée de  $\psi$ .

À partir de la densité de probabilité, on peut calculer la probabilité de trouver le système dans un volume,  $V$ , donné :  $P_V = \int_V \psi^* \psi dv$

Comme le système existe quelque part dans l'espace représenté par les coordonnées, sa probabilité de présence doit être égale à 1 si on intègre sur tout l'espace.

$$P_V = \int_V \psi^* \psi dv = 1$$

$V = \text{tous l'espace}$

(1.1)

Cette relation porte le nom de relation de normalisation des fonctions d'ondes

On dira que deux fonctions d'ondes,  $\psi_1$  et  $\psi_2$ , exprimées dans le même système de coordonnées, sont orthogonales si la relation suivante est vérifiée :

$$\int_{\text{tous l'espace}} \psi_1^* \psi_2 dv = \int_{\text{tous l'espace}} \psi_2^* \psi_1 dv = 0$$

(1.2)

Si ces fonctions sont normalisées on a donc :

$$\int_{\text{tous l'espace}} \psi_1^* \psi_2 dv = d_{ij}$$

$$d_{ij} = d_i^j = d^{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

(delta de Kronecker)

(1.3)

Notons que cette relation est semblable à la relation que vérifient deux vecteurs unitaires,  $i$  et  $j$ , d'une base orthonormée :

$$\vec{i} \cdot \vec{j} = d_{ij}$$

### **I.2.c Principe de superposition :**

Soient  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, n$  fonctions d'ondes orthonormées représentant  $n$  états possibles d'un système.

Toute fonction  $j$ , combinaison linéaire des  $n$  fonctions précédentes est aussi une fonction d'onde possible du système.

$$j = a_1 y_1 + a_2 y_2 + \dots + a_n y_n \quad (1.4)$$

Les  $a_i$  sont des constantes qui peuvent être complexes.

$j$  doit être une fonction normalisée et l'on montre que l'on doit avoir la relation suivante :

$$\sum_n |a_n|^2 = \sum_n a_n^* a_n = 1 \quad (1.5)$$

### **I.2.d Observables et opérateurs :**

Toute l'information sur le système est comprise dans la fonction d'onde. On utilise des opérateurs pour extraire cette information.

Opérateur: Objet mathématique agissant sur une fonction pour donner une autre fonction.



A chaque grandeur mesurable (appelée observable), on associe un opérateur différent. En général, la fonction créée par l'opérateur est différente de la fonction initiale comme la dérivée :

$$\frac{d}{dx}(f) = f' \tag{1.6}$$

Ces fonctions particulières sont appelées fonctions propres de l'opérateur. Le coefficient constant est appelé valeur propre de l'opérateur, associé à la fonction propre correspondante.

Les seules valeurs mesurables d'une observable sont données par les valeurs propres de son opérateur associé. Ces valeurs propres sont réelles. On peut néanmoins définir des opérateurs qui ne sont pas des observables et qui ont des valeurs propres complexes. Les fonctions propres d'un opérateur sont des fonction orthonormées Si l'on connaît toutes les fonctions propres,  $\psi_i \ i=1...n$ , d'un opérateur, on pourra toujours écrire la fonction d'onde,  $j$ , décrivant le système par :

$$j = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + \dots + a_n\psi_n \quad a_i = \text{coefficients complexe.} \tag{1.7}$$

Le module au carré de chaque coefficient,  $a_i$ , représente la probabilité de trouver le système dans l'état  $\psi_i$  et donc, la probabilité de mesurer une valeur égale à la valeur propre associée à  $\psi_i$ .

$$|a_i|^2 = \text{Probabilité de trouver le système dans l'état } \psi_i.$$

Et la somme des probabilités est bien égale à un par normalisation de la fonction.

### I.3. Description Statistique :

En thermodynamique statistique, la distribution de Gibbs semble être la meilleure adaptée pour l'étude des milieux thermodynamique statistiques classiques et semi-quantiques, (Landau 1968).

Cette distribution est définie par :

$$Z(E,T) = \sum_E \Omega(E,T) \quad (1.8)$$

Cette distribution dépend énormément de la forme du poids statistiques  $\Omega(E,T)$ , le poids statistique le plus adapté est sans doute celui de Boltzmann donné par :

$$\Omega(E,T) = A \exp(-b(T)E) \quad (1.9)$$

Où  $b(T) = \frac{1}{k_B T}$  et,  $T$  et  $k_B$  étant respectivement la température absolue du milieu et la constante de Boltzmann.  $A$  est la constante de normalisation et  $E$  l'énergie du milieu.

Lorsque le système étudié fait intervenir des variables relevant des positions des particules dans un réseau, il est préférable de choisir l'approche basée directement sur les configurations de spins. La forme d'écriture adéquate du poids statistique de Boltzmann est donnée par :

$$\Omega(H(\{S_j\});T) = a \exp(-b(T)H(\{S_j\})) \quad (1.10)$$

Où  $H(\{S_j\})$  est l'énergie de la configuration  $\{S_j, j=1 \rightarrow N, S = 2\mathbf{S}, \mathbf{S} = \pm 1\}$  des variables de spins des atomes.

La fonction de partition du milieu est définie par :

$$Z(s, T) = \sum_{\{s_1\}} \sum_{\{s_2\}} \mathbf{K} \sum_{\{s_N\}} A \exp(-b(T) E[\{s_j\}]) \quad (1.11)$$

Pour des raisons de commodité, nous adopterons la notation suivante :

$$\sum_{\{s_i\}}^{(0)} = \mathbf{M} \sum_{\{s_1\}} \sum_{\{s_2\}} \mathbf{K} \sum_{\{s_N\}} \quad (1.12)$$

La connaissance de la fonction de partition d'un système physique permet de calculer toutes les grandeurs physiques relevant de son hamiltonien.

En magnétisme, les grandeurs d'intérêt sont celles qui permettent d'identifier le comportement magnétique de ce milieu. En plus des grandeurs connues telles que l'énergie interne, l'enthalpie, l'énergie libre d'Helmholtz, l'enthalpie libre de Gibbs, l'entropie, la capacité calorifique, nous ajoutons l'aimantation, la susceptibilité magnétique, la capacité calorifique magnétique, la magnéto-résistance.

Ces grandeurs sont définies par :

### § L'énergie interne U

$$U(S, J, B, T) = - \frac{\partial \ln Z}{\partial b} \quad (1.13)$$

### § L'énergie libre de Helmholtz F

$$F(S, J, B, T) = -k_B T \ln \frac{Z}{A} \quad (1.14)$$

## § L'entropie S

$$S(S, J, B, T) = \frac{1}{T} \left[ -k_B T \ln \left[ \frac{Z}{A} \right] + U \right] \quad (1.15)$$

## § La capacité calorifique $C_V$

$$C_V(S, J, B, T) = -k_B \left[ T \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial T^2} + 2 \right] \quad (1.16)$$

## § L'aimantation M

$$M[S, J, B_{loc}, B_{ext}, T] = \left. \frac{1}{b} \frac{\partial \ln Z}{\partial B} \right)_B \quad (1.17)$$

$B_{loc}$  et  $B_{ext}$  sont respectivement les champs magnétiques local et externe.

Nous distinguons entre l'aimantation totale due au champ magnétique total  $B_{tot} = B_{loc} + B_{ext}$  donnée par :

$$M_{tot}[S, J, B_{loc}, B_{ext}, T] = \frac{1}{b} \frac{\partial \ln Z}{\partial B_{tot}} \quad (1.18)$$

Et l'aimantation spontanée définie par :

$$M_{tot}[S, J, B_{loc}, B_{ext}, T]_{B_{ext}=0} \quad (1.19)$$

## § La susceptibilité magnétique

$$X [S, J, B_{loc}, B_{ext}, T] = \frac{\partial M}{\partial B_{tot}} \quad (1.20)$$

## § La corrélation de corrélation

$$G[S, J, B_{loc}, B_{ext}, T] = \langle S_i \cdot S_j \rangle \quad (1.21)$$

Dans ces notions de physique statistique et mécanique quantique nous avons mis en relief l'importance de la formulation du modèle théorique en essayant de tenir compte de tous les effets physiques qui sont liés au milieu étudié. Nous avons construit un hamiltonien en tenant compte de toutes les interactions de type magnétique. Cependant, la forme de ce hamiltonien est très complexe et une résolution mathématique n'est pour le moment évidente. La littérature a proposé des approches simples tel que celle d'Heisenberg mais toujours restent compliqués.

### I.4 Matrice de Transfert :

Le but de cette méthode est de calculer la fonction de partition. C'est une méthode de calcul, en général puissante à une dimension, même si elle est difficile à utiliser pour des dimensionnalités plus élevées. On considère une chaîne linéaire de spins, refermée sur un cercle et on impose des conditions aux limites périodiques:

$$S_{i+N} = S_i \quad (1.22)$$

L'hamiltonien du système, en présence d'un champ magnétique extérieur s'écrit:

$$H = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - h \sum_{i=1}^N s_i \quad (1.23)$$

Décomposons  $e^{-bH}$  par la méthode suivante:

$$\begin{aligned} e^{-bH} &= e^{K s_1 s_2 + b h s_1} e^{K s_2 s_3 + b h s_2} \dots e^{K s_N s_1 + b h s_N} \\ &= T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \dots T_{s_N s_1} \end{aligned} \quad (1.24)$$

On peut représenter par une matrice 2x2 les valeurs possibles de:  $T_{s_1 s_2}$

$$T = \begin{pmatrix} T_{++} & T_{+-} \\ T_{-+} & T_{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{+K+bH} & e^{-K+bH} \\ e^{-K-bH} & e^{+K-bH} \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

Notons que:

$$\sum_{s_2} T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} = (T^2)_{s_1 s_3} \quad (1.26)$$

Où  $T^2$  est la matrice carrée de T. on peut sommer de proche en proche sur  $s_2 \dots s_N$ . On obtient ainsi la fonction de partition canonique pour N spins:

$$Z_N = \sum_{s_1 s_2 \dots s_N} T_{s_1 s_2} \dots T_{s_N s_1} = \sum_{s_1} (T^N)_{s_1 s_1} \quad (1.27)$$

C'est-à-dire:

$$Z_N = Tr(T^N) \quad (1.28)$$

Les valeurs propres de T sont les racines de l'équation:

$$l^2 - 2l e^{K} ch bh + 2sh 2K = 0 \quad (1.29)$$

Dont les racines sont:

$$I_{\pm} = e^{\kappa} \operatorname{ch} b h \pm \left[ e^{2\kappa} \operatorname{sh}^2 b h + e^{-2\kappa} \right]^{1/2} \quad (1.30)$$

Et par conséquent:

$$Z_N = (I_+)^N + (I_-)^N \quad (1.31)$$

## **Chapitre II**

### *Le modèle d'Heisenberg*



## **II. 1 Introduction :**

Dans ce chapitre, on va donner une description du modèle d'Heisenberg et son intérêt physique. Pour plus détail, voir les références dans [b].

## **II. 2 Définition du modèle :**

Le modèle d'Heisenberg est un modèle statistique sur réseau (unidimensionnel ou de dimension élevé) où on définit des spins représentant des dipôles magnétiques microscopiques orientés dans l'espace sur des nœuds qu'on appelle souvent sites. Ce modèle et tous les modèles sur réseau sont utilisés dans l'étude des propriétés magnétiques des matériaux, leurs transitions de phase, et comportement critique.

Dans l'étude de ce modèle, on se limite seulement à l'interaction entre les spins qui sont les plus proches voisins. Ceci simplifie les calculs, mais ne modifie pas qualitativement les propriétés physiques essentielles du modèle. L'Hamiltonien s'écrit

$$H = -J \sum_{j=1}^N \vec{S}_j \vec{S}_{j+1} \quad (2.1)$$

Où J est une constante de couplage, N étant le nombre total des spins avec la condition de périodicité  $\vec{S}_{N+1} = \vec{S}_1$ . Si on plus, un champ magnétique extérieur est présent (on le choisit souvent selon z), on rajoute un terme d'interaction avec ceci

$$H = -J \sum_{j=1}^N \vec{S}_j \vec{S}_{j+1} - \vec{h} \sum_{j=1}^N \vec{S}_j \quad (2.2)$$

En mécanique classique, les  $\vec{S}_j$  sont des vecteurs classiques à trois composantes  $S^x_j, S^y_j, S^z_j$  et on peut associer à chaque direction, la constante de couplage appropriée

$$H = -\sum_{j=1}^N J_x S^x_j S^x_j + J_y S^y_j S^y_j + J_z S^z_j S^z_j - h \sum_{j=1}^N S^z_j \quad (2.3)$$

Qui est le XYZ modèle (il existe aussi le cas du modèle XXZ où  $J_x = J_y \neq J_z$  qui est largement étudié). En mécanique quantique, on passe aux termes d'opérateurs et les  $\vec{S}_j$  deviennent les matrices de Pauli. Au cas de spin  $\frac{1}{2}$ , on écrit

$$S^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, S^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

L'Hamiltonien agit sur le produit tensoriel  $(C^2)^{xN}$  de dimension  $2^N$ . L'objectif est de déterminer le spectre de l'Hamiltonien et la fonction de partition et par conséquent les autres quantités thermodynamiques (l'énergie libre, chaleur spécifique, susceptibilité,...)

Le modèle d'Ising est une version simplifiée du modèle d'Heisenberg où les spins sont orientés selon la direction z.

Il existe très peu d'exemples de problèmes exactement solubles en mécanique statistique. Le modèle d'Ising est l'un de ceux-là à une dimension (calcul élémentaire par matrice de transfert) et à deux dimensions (solution d'Onsager 1944). A trois dimensions, il n'existe que des solutions approchées.

Il existe en fait un grand nombre de systèmes physiques très variés décrits par des variables locales résultant d'un choix entre deux solutions (spin + ou spin -, site vide ou site occupé, etc....) susceptibles d'être décrit par un modèle d'Ising. Ceci confère à ce modèle un intérêt très général en Physique de la matière Condensée.

Plusieurs techniques sont développées pour résoudre le modèle d'Heisenberg. A une dimension, on s'intéresse au modèle XXX de spin  $\frac{1}{2}$  qui est résolu complètement par l'Ansatz de Bethe comme on va voir dans le chapitre suivant.

## **Chapitre III**

### ***Détermination des valeurs d'énergie du modèle XXX1/2 d'Heisenberg pour $M$ excitations***

### III.1 Introduction :

Dans ce chapitre, on va traiter deux cas dans le modèle d'Heisenberg à une dimension (ou bien le XXX modèle) pour tirer les valeurs des énergies associées. Ces deux cas correspondent respectivement à une et à deux excitations dans la chaîne quantique des spins ( $1/2$  et  $-1/2$ ). Dans un premier temps, on va définir notre modèle puis on va expliquer l'ansatz de Bethe en donnant la forme de la fonction d'onde puis comment trouver les valeurs propres pour les deux cas mentionnés.

### III.2 Le modèle d'Heisenberg pour un type d'excitation :

Dans notre cas, le modèle d'Heisenberg est une chaîne de spins quantique  $s = \pm \frac{1}{2}$  placés sur  $L$  sites (voir fig. 3.1), avec des conditions de bord périodiques

$$\mathbf{S}_{L+1} = \mathbf{S}_1 \quad (3.1)$$

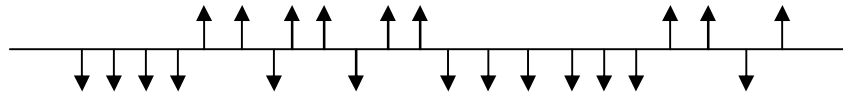


Fig. 3.1 La chaîne quantique du modèle d'Heisenberg où  $\uparrow$  correspond à  $\sigma = 1/2$  et  $\downarrow$  correspond à  $\sigma = -1/2$

L'espace d'Hilbert de ce modèle est un produit direct des sous espaces  $V_i$  associés à chaque spin  $i$

$$\mathbf{H} = \bigotimes_{i=1}^L V_i = V^{\otimes L} \quad (3.2)$$

L'Hamiltonien  $H_{xxx}$  de la chaîne de spin XXX, qui agit donc sur l'espace d'Hilbert est:

$$H_{xxx} = 2 \sum_{i=1}^L \vec{\mathbf{S}}_i \cdot \vec{\mathbf{S}}_{i+1} \quad (3.3)$$

Où les composantes  $s_i^A$  ( $A=1,2,3$ ) de  $\vec{s}_i$  sont les générateurs hermitiens de  $su(2)$ , agissant sur le  $i^{\text{ème}}$  spin. Dans notre cas  $A = 3$  (Seulement la composante  $z$  des spins est considérée). Puisque on ne s'intéresse qu'aux interactions entre les plus proches voisins, l'Hamiltonien (3) se découple

$$H_{xxx} = \sum_{i=1}^L H_{i,i+1} \quad (3.4)$$

Un état quelconque de l'espace d'Hilbert s'écrit sous la forme générale

$$|+\rangle \otimes \dots \otimes |-\rangle \otimes \dots \otimes |+\rangle \otimes \dots \otimes |-\rangle \otimes \dots \otimes |+\rangle \otimes \dots \otimes |-\rangle \otimes \dots \otimes |+\rangle \dots \quad (3.5)$$

Où  $|+\rangle$  est l'état de spin « up » et  $|-\rangle$  l'état de spin « dawn » associés respectivement aux vecteurs

$$e_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ et } e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

Les quatre produits directs sont

$$e_1 \otimes e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, e_0 \otimes e_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, e_1 \otimes e_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ et } e_0 \otimes e_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Les  $H_{i,i+1}$  sont diagonalisables, alors pour des constants  $a, b,$  et  $g$  bien définis, on peut écrire

$$H_{i,i+1} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & g & 0 \\ 0 & g & b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Utilisant cette dernière équation et l'équation (3.7), on peut donner l'action des Hamiltoniens sur les couples des spins voisins par

$$\begin{aligned} H_{i,i+1} [|-\rangle \otimes |-\rangle] &= a [|-\rangle \otimes |-\rangle] \\ H_{i,i+1} [|+\rangle \otimes |-\rangle] &= b [|+\rangle \otimes |-\rangle] + g [|-\rangle \otimes |+\rangle] \\ H_{i,i+1} [|-\rangle \otimes |+\rangle] &= b [|-\rangle \otimes |+\rangle] + g [|+\rangle \otimes |-\rangle] \\ H_{i,i+1} [|+\rangle \otimes |+\rangle] &= a [|+\rangle \otimes |+\rangle] \end{aligned} \quad (3.9)$$

Ou bien par notations

$$\begin{cases} H_{i,i+1} (\downarrow\downarrow) = a(\downarrow\downarrow) \\ H_{i,i+1} (\uparrow\downarrow) = b(\uparrow\downarrow) + g(\downarrow\uparrow) \\ H_{i,i+1} (\downarrow\uparrow) = b(\downarrow\uparrow) + g(\uparrow\downarrow) \\ H_{i,i+1} (\uparrow\uparrow) = a(\uparrow\uparrow) \end{cases} \quad (3.10)$$

### **III. 3 Les excitations dans le modèle d'Heisenberg :**

Par convention, l'excitation dans le modèle est considérée comme existence d'un état de spin  $\frac{1}{2}$  (up). L'état fondamental se construit par une chaîne totale de spins  $-\frac{1}{2}$  (voir fig. 3.2 et 3.3)

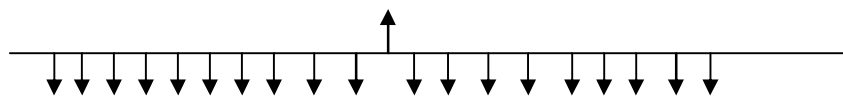


Fig. 3.2 Etat de spin à une excitation

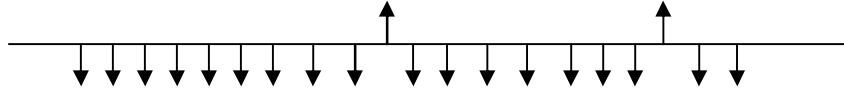


Fig. 3.2 Etat de spin à deux excitations disjointes

Un état contenant une excitation à la position  $X$  (nombre entre 1 et  $L$ ) s'écrit par convention

$$|X\rangle = |-\rangle \otimes \dots \otimes |-\rangle \otimes |+\rangle \otimes |-\rangle \otimes \dots \otimes |-\rangle \quad (3.11)$$

De même, un état de deux excitations aux positions  $X_1$ , et  $X_2$  (avec  $X_1 < X_2$ ) prend la forme

$$|X_1, X_2\rangle = |-\rangle \otimes \dots \otimes |+\rangle \otimes |-\rangle \otimes \dots \otimes |+\rangle \otimes |-\rangle \otimes \dots \otimes |-\rangle \quad (3.12)$$

### III. 4 Ansatz de Bethe :

L'Ansatz de Bethe est une méthode qui permet la diagonalisation explicite du Hamiltonien dans les modèles quantiques sur réseaux pour une résolution explicite de ceux-ci. En utilisant cette méthode, on obtient les états propres et les valeurs propres de notre modèle. Notons que cette méthode est utilisée pour d'autres modèles. En mécanique quantique, on peut développer la fonction d'onde en une somme linéaire des états de bases orthogonaux entre eux

$$|y\rangle = \sum_n a_n |j_n\rangle \quad (3.13)$$

L'Ansatz de Bethe nous propose la forme des scalaires dans le développement linéaire (3.13) selon le nombre d'excitation  $M$  qu'on a

$$|y_M\rangle = \sum_{\{x_1, \dots, x_M\}} a(x_1, \dots, x_M) |x_1, \dots, x_M\rangle$$

$$a(x_1, \dots, x_M) = \sum_{\{S(j)\} \in M} \sum_{j=1}^M A_{\{S(j)\}}(\vec{k}) e^{ik_{S(j)}x_j} \quad (3.14)$$



Ici  $|y_M\rangle$  est la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger

$$H_{xxx}|y_M\rangle = E_M|y_M\rangle \quad (3.15)$$

$|x_1, \dots, x_M\rangle$  l'état qui représente M excitations distribuées sur les positions  $x_1, \dots, x_M$  sur la chaîne quantique avec  $x_1 < x_2 < \dots < x_M$ ,  $a(x_1, \dots, x_M)$  sont les scalaires à déterminer liés aux fonctions A de paramètres K à déterminer,  $\{S(j)\}$  représente le groupe de permutation des coefficients  $S(j)$ . En injectant (3.14) dans (3.15) on obtient les valeurs propres  $E_M$  et en plus des contraintes sur les fonctions A et les paramètres K. Dans ce qui suit, on va traiter deux cas simples : Une excitation, et deux excitations

### **III. 5 Déterminations des valeurs propres de l'Hamiltonien :**

#### **(a) Cas d'une excitation (de type (3.11)) :**

Dans ce cas la forme de la fonction d'onde (3.14) se réduit à

$$\begin{cases} |y_1\rangle = \sum_x a(x)|x\rangle \\ a(x) = A(k)e^{ikx} \end{cases} \quad (3.16)$$

Calculons tout d'abord l'action de l'Hamiltonien dans l'équation de Schrödinger (3.15) sur l'état  $|x\rangle$  en utilisant les relations (3.4) et (3.10). On trouve

$$\begin{aligned} H_{xxx}|x\rangle &= \sum_{i=1}^L H_{i,i+1}|x\rangle \\ &= (L-2)a|x\rangle + (b|x\rangle + g|x-1\rangle) + (g|x+1\rangle + b|x\rangle) \\ &= [(L-2)a + 2b]|x\rangle + g(|x-1\rangle + |x+1\rangle) \end{aligned} \quad (3.17)$$

Où chaque terme  $H_{i,i+1}$  agit sur une paire de spins d'ordres  $i, i + 1$ . Par conséquent, l'action de l'Hamiltonien sur l'état  $|y_1\rangle$  s'écrit alors

$$H_{xxx} |y_1\rangle = \sum_{x=1}^L a(x) \{ [(L-2)a + 2b] |x\rangle + g(|x-1\rangle + |x+1\rangle) \} \quad (3.18)$$

Projetons cette équation sur un autre état quelconque  $\langle y|$  et en utilisant l'orthogonalité entre les états

$$\langle x | y \rangle = d_{x,y} \quad (3.19)$$

On obtient

$$\begin{aligned} \langle y | H_{xxx} |y_1\rangle &= a(y) [(L-2)g + 2b] + g [a(y+1) + a(y-1)] \\ &= a(y) \{ [(L-2)g + 2b] + g [e^{ik} + e^{-ik}] \} \\ &= a(y) \{ [(L-2)g + 2b] + 2g \cos k \} \end{aligned} \quad (3.20)$$

Cela nous donne tout de suite la valeur propre  $E_1$

$$E_1 = (L-2)g + 2b + 2g \cos k \quad (3.21)$$

Si on applique les conditions aux limites

$$a(L+1) = a(1) \quad (3.22)$$

On trouve les valeurs possibles de  $k$

$$k = \frac{2p}{L} n \quad (3.23)$$

Finalement, notons que les fonctions  $A(k)$  restent à déterminer.

**(b) Cas de deux excitations (de type (3.12)) :**

Commençons par la forme de la fonction d'onde

$$|y_2\rangle = \sum_{\{x_1, x_2\}} a(x_1, x_2) |x_1, x_2\rangle, \quad x_1, x_2 = 1, \dots, L \quad (3.24)$$

Avec

$$\begin{aligned} a(x_1, x_2) &= \sum_{\{S(j)\} \in S_2} \sum_{j=1}^2 A_{S(1), S(2)}(\vec{k}) e^{ik_{S(j)}x_j} \\ &= A_{1,2}(k_1, k_2) e^{ik_1x_1 + ik_2x_2} + A_{2,1}(k_1, k_2) e^{ik_2x_1 + ik_1x_2} \end{aligned} \quad (3.25)$$

Si les deux excitations sont suffisamment disjointes:  $1 \langle x_1 \langle \langle x_2 \langle L$  on obtient:

$$\begin{aligned} H_{xxx} |x_1, x_2\rangle &= \sum_{i=1}^L H_{i,i+1} |x_1, x_2\rangle \\ &= [(L-4)a + 4b] |x_1, x_2\rangle + g(|x_1 - 1, x_2\rangle + |x_1 + 1, x_2\rangle + |x_1, x_2 - 1\rangle + |x_1, x_2 + 1\rangle) \end{aligned} \quad (3.26)$$

Et par projection de l'état  $H_{xxx} |y_2\rangle$  sur un état quelconque  $\langle y_1, y_2 |$

$$\begin{aligned} \langle y_1, y_2 | H_{xxx} |y_2\rangle &= \langle y_1, y_2 | \sum_{\{x_1, x_2\}} a(x_1, x_2) \{[(L-4)a + 4b] |x_1, x_2\rangle + \\ &\quad g[|x_1 - 1, x_2\rangle + |x_1 + 1, x_2\rangle + |x_1, x_2 - 1\rangle + |x_1, x_2 + 1\rangle]\} \\ &= a(y_1, y_2) [(L-4)a + 4b] + g[a(y_1 + 1, y_2) + \\ &\quad a(y_1 - 1, y_2) + a(y_1, y_2 + 1) + a(y_1, y_2 - 1)] \end{aligned} \quad (3.27)$$

Qui doit être égale à:  $E_2 a(y_1, y_2)$  or

$$\begin{aligned} E_2 a(y_1, y_2) &= a(y_1, y_2) [(L-4)a + 4b] + g[a(y_1 + 1, y_2) + a(y_1 - 1, y_2) + a(y_1, y_2 + 1) + \\ &\quad a(y_1, y_2 - 1)] \end{aligned} \quad (3.28)$$

Et puisque

$$\begin{aligned}
 a(y_1 + 1, y_2) &= A_{12}(k_1, k_2)e^{ik_1 y_1 + ik_2 y_2} e^{ik_1} + A_{21}(k_1, k_2)e^{ik_1 y_2 + ik_2 y_1} e^{ik_2} \\
 a(y_1 - 1, y_2) &= A_{12}(k_1, k_2)e^{ik_1 y_1 + ik_2 y_2} e^{-ik_1} + A_{21}(k_1, k_2)e^{ik_1 y_2 + ik_2 y_1} e^{-ik_2} \\
 a(y_1, y_2 + 1) &= A_{12}(k_1, k_2)e^{ik_1 y_1 + ik_2 y_2} e^{ik_2} + A_{21}(k_1, k_2)e^{ik_1 y_2 + ik_2 y_1} e^{ik_1} \\
 a(y_1, y_2 - 1) &= A_{12}(k_1, k_2)e^{ik_1 y_1 + ik_2 y_2} e^{-ik_2} + A_{21}(k_1, k_2)e^{ik_1 y_2 + ik_2 y_1} e^{-ik_1}
 \end{aligned}
 \tag{3.29}$$

On obtient

$$E_2 a(y_1, y_2) = a(y_1, y_2) [(L-4)a + 4b + 2g(\cos k_1 + \cos k_2)]
 \tag{3.30}$$

Et finalement

$$E_2 = [(L-4)a + 4b + 2g(\cos k_1 + \cos k_2)]
 \tag{3.31}$$

D'après les deux résultats (3.21) et (3.31), on peut prouver par récurrence la forme suivante de la valeur de l'énergie pour M excitations

$$E_M = \left[ (L-2M)a + 2Mb + 2g \sum_{j=1}^M \cos k_j \right]
 \tag{3.32}$$

Maintenant, il nous reste comment déterminer les fonctions  $A(\vec{k})$  et les valeurs de  $k_i$ . Cela revient à prendre les deux cas particuliers :

- 1) Les excitations sont proches l'une de l'autre
- 2) L'une des excitations se trouve au bord

La dernière étude ramène à ce qu'on appelle les Equations d'Ansatz de Bethe (BAE), mais le problème reste toujours ouvert ce qu'il demande toute une recherche.

# *Conclusion*

## **Conclusion :**

Dans ce travail, on a considéré un modèle statistique important qui est le modèle d'Heisenberg pour déterminer les valeurs propres de son Hamiltonien en utilisant ce qu'on appelle l'Ansatz de Bethe qui nous fixe à des scalaires pris la forme de la fonction d'onde.

Après des calculs simples, on a calculé l'énergie pour une et deux excitations et la généralisation pour  $M$  excitations.

Ce qu'il reste dans ce contexte, c'est la détermination des fonctions d'onde pour un nombre d'excitations quelconque moyennant la détermination des fonctions  $A(\vec{k})$ . Ceci nécessite un traitement détaillé basé sur le changement des positions des excitations pour chaque cas où on a un nombre fixe de ces dernières. Ça fait l'objet d'une future recherche.

# *Références*

## **Références :**

[a1] Éric Brunet, Lionel Foret, et Jérôme Beugnon, *Cours de Physique statistique*.

[a2] Jean-Marc Richard, *Notes de Physique Statistique M1*, 2007–08, module CPHYS-422.

[a2] Marie-Pierre Gaijeot, *Physique statistique et simulations numériques : introduction aux méthodes de modélisation numérique de la matière condensée (gaz, liquides, solides, molécules biologiques)*.

[b] Cédric Weber, *Etude du modèle de Heisenberg classique sur réseau carré a couplages antiferromagnétiques premiers et secondes plus proches voisins*.

[C1] N. Crampé, L. Frappat, and E. Ragoucy, *Classification of three-state Hamiltonians solvable by Coordinate Bethe Ansatz* arXiv:1306.6303v2 [math-ph].

[C2] Luc Frappat, Rafael I. Nepomechie, and Eric Ragoucy, *Complete Bethe Ansatz solution of the open spin-s XXZ chain with general integrable boundary terms* arXiv:0707.0653v2 [math-ph].

[C3] P. Z. Justin, *Quelques applications de l'ansatz de Bethe*, thèse de doctorat de l'université de Paris 6 (1998).

[C4] Michael Karbach, and Gerhard Muller, *Introduction to the Bethe Ansatz I*, arXiv cond-mat/9809162.

[C5] Michael Karbach, Kun Hu, and Gerhard Muller, *Introduction to the Bethe Ansatz II*, arXiv cond-mat/9809163.

[C6] Michael Karbach, and Gerhard Muller, *Introduction to the Bethe Ansatz III*, arXiv cond-mat/0008018.