HAL
open science

Etude numérique de systèmes magnétiques et supraconducteurs

Fabien Alet

To cite this version:

Fabien Alet. Etude numérique de systèmes magnétiques et supraconducteurs. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2002. Français. NNT : . tel-00002275

HAL Id: tel-00002275

https://theses.hal.science/tel-00002275v1

Submitted on 15 Jan 2003

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université Paul Sabatier
Toulouse III

Thèse

présentée
pour obtenir

le grade de Docteur en Sciences
Spécialité Physique Théorique

par

Fabien Alet

Étude numérique de systèmes magnétiques et supraconducteurs

Soutenue le 7 juin 2002 devant la commission d'examen :

Monsieur Fakher Assaad	Rapporteur
Monsieur Robert Fleckinger	Président
Monsieur Thierry Jolicœur	Rapporteur
Monsieur Mladen Horvatić	
Monsieur Didier Poilblanc	
Monsieur Erik Sørensen	Directeur de thèse
Monsieur Matthias Troyer	

Remerciements

Cette thèse a été effectuée au sein du groupe de physique théorique du Laboratoire de Physique Quantique de l'Université Paul Sabatier. Que tous ses membres soient remerciés pour l'ambiance chaleureuse et amicale que j'y ai trouvée tous les jours.

Cette thèse a été dirigée par Erik Sørensen, que je remercie pour son enthousiasme, sa gentillesse et sa compétence scientifique. Bien que suivant de près mon travail, Erik m'a toujours laissé libre tant dans le choix des sujets traités que dans celui des méthodes. Je lui suis très reconnaissant pour la confiance qu'il m'a accordée.

Je remercie très vivement Mladen Horvatič, Didier Poilblanc et Matthias Troyer d'avoir accepté de participer à mon jury de thèse, Robert Fleckinger de l'avoir présidé et les rapporteurs Fakher Assaad et Thierry Jolicœur pour leur lecture attentive ainsi que leurs remarques et conseils. Merci à tous.

J'ai pu profiter de discussions enrichissantes avec plusieurs personnes avec lesquelles j'ai eu la chance d'interagir durant cette thèse : Fabio Tedoldi, Mladen Horvatič et Julien Bobroff pour les discussions au sujet des expériences de RMN, et Hajime Takayama, Synge Todo et Matthias Troyer pour celles concernant les aspects numériques. Je tiens tout particulièrement à remercier Matthias Troyer et Hajime Takayama de m'avoir accepté comme visiteur dans leur groupe, et je passe un salut amical aux membres de leurs groupes à Zürich et à Tokyo.

Commencer une thèse est toujours une gageure et les petits et grands conseils de Matthieu et Sylvain ont toujours été de grand secours. Merci aux vénérables anciens ! Une thèse, c'est aussi et surtout des compagnons de labo, je salue donc Alex, Chico, Florent, Gaëtan, re-Matthieu et re-Sylvain pour leur bonne humeur.

Venons-en aux remerciements plus personnels. Tout d'abord, il m'est impossible d'omettre les autres membres du club des cinq : Jérôme, Julie, Mika et Nordine pour

leur amitié indéfectible au cours de ces années. Merci pour la joie, merci pour les rires, merci pour tout.

Ensuite, je tiens à passer un coucou à tous les autres qui ont su me supporter pendant ces trois ans, voire plus. La liste des remerciements est trop longue, donc je les passerai en privé !

Mes remerciements vont enfin et surtout à mes parents, à mon frère et à Nathalie.

Ring the bells that still can ring
Forget your perfect offering
There is a crack in everything
That's how the light gets in.

Leonard Cohen, *Anthem*

Si cela vous semble dénué de sens, laissez-moi vous rappeler, lecteur, quelques exemples de théories qui furent dénuées de sens :
La terre est ronde - Eratostène. 300 av. J.-C.
Un jour l'homme volera - Leonard de Vinci. XVe siècle.
La terre n'est pas le centre de l'univers - Nicolas Copernic. XVIe siècle.
Le mouvement est relatif - Albert Einstein. Début XXe siècle.
Les filles veulent seulement s'amuser - Cindy Lauper. Fin XXe siècle.

A.C. Weisbecker, *Cosmix Banditos*

Table des matières

I Introduction **11**
1 Systèmes fortement corrélés 11
2 Simulations numériques de systèmes fortement corrélés 12
2.1 Diagonalisation Exacte 12
2.2 Density Matrix Renormalisation Group 13
2.3 Séries Hautes Températures 14
2.4 Monte Carlo Quantique 14
3 Plan de thèse 15

II Algorithme de boucle en temps continu **17**
1 Monte Carlo Classique 17
1.1 Monte Carlo Classique Standard 17
1.2 Algorithmes de blocs classiques 18
1.3 Estimateurs améliorés 21
2 Monte Carlo Quantique Worldline 21
2.1 Formule de Trotter-Suzuki 22
2.2 Exemple de la chaîne antiferromagnétique 22
2.3 Représentation en damier et worldlines 24
a) Les worldlines 25
b) Mouvements permis 25
3 Algorithme de boucle 27
3.1 Construction de la boucle 28
a) Cas général 28
b) Cas particulier : application d'un algorithme de boucle unique à la chaîne de spins 1/2 28
4 Algorithme de boucle en temps continu 30
4.1 Passage à la limite continue 31
4.2 Description de l'algorithme 32
5 Valeurs moyennes d'observables, estimateurs améliorés 34
5.1 Exemple de l'énergie 35
5.2 Autres observables 37
a) Chaleur spécifique 37
b) Aimantation 37
c) Susceptibilité 37
5.3 Estimateurs améliorés 38

a) Boucles multiples *vs* boucle unique 38
b) Susceptibilités 38
c) Longueur de corrélation 40
d) Autres observables 40
6 Généralisations, trucs et astuces 40
6.1 Dimension, signe et désordre des liens 40
6.2 Valeur du spin 41
6.3 Champ magnétique 43
6.4 Réseau infini 44
6.5 Autres systèmes, problème de signe 45

III Développement en séries stochastique 47
1 Préliminaires généraux 47
1.1 Développement de la fonction de partition 47
1.2 Limitation de la puissance de développement 49
1.3 Représentation de la chaîne d'opérateurs 49
1.4 Décalage des éléments diagonaux 51
2 Mouvements possibles 51
2.1 Mouvement diagonal 51
2.2 Loop operator update 52
2.3 Un pas Monte Carlo SSE 54
3 Étude de cas : hamiltonien de Heisenberg 55
3.1 Cas général 55
3.2 Modèle de Heisenberg isotrope ferromagnétique 57
3.3 Modèle de Heisenberg isotrope antiferromagnétique 58
3.4 Modèle XY sans champ magnétique 58
4 Observables 60
4.1 Quantités statiques 60
a) Énergie et chaleur spécifique 60
b) Opérateurs diagonaux, corrélations statiques 60
4.2 Quantités dynamiques 60
5 Comparaison avec l'algorithme de boucle 61
5.1 Points communs 62
5.2 Différences 62
6 Application au modèle de Heisenberg ferromagnétique tridimensionnel 63

IV Spectres RMN de chaînes de Haldane dopées 65
1 Systèmes unidimensionnels, chaîne de Haldane 65
1.1 Conjecture de Haldane 65
1.2 Confirmations expérimentales 66
1.3 Approche Solide de Liens de Valence 67
1.4 Chaînes ouvertes, excitations de spin 1/2 68
1.5 Mises en évidence expérimentales des spins 1/2 effectifs 70
2 Profils d'aimantation de chaînes de Haldane ouvertes 72
2.1 Considérations techniques 72

2.2 Influence de la température 72
2.3 Influence du champ magnétique 73
2.4 Estimation de la longueur de corrélation 75
3 Spectres RMN 75
3.1 Reconstruction du spectre numérique 76
3.2 Spectres numériques - résultats 77
3.3 Discussion 80
3.4 Dépendance au dopage des spectres RMN 82
3.5 Perspectives 83

V Chaînes de Haldane couplées 85
1 En route vers l'ordre magnétique 85
1.1 Contexte général de cette étude 86
1.2 Contexte des transitions de phase quantiques 87
2 Méthodes auto-adaptantes 88
2.1 Méthodes auto-adaptantes dans le cas classique 89
2.2 Description de la méthode 90
a) Procédure détaillée 90
b) Choix d'un critère 91
3 Résultats et discussion 92
3.1 Application aux chaînes de Haldane couplées 92
3.2 Résultats 93
3.3 Discussion et perspectives 95

VI Algorithme non local pour le modèle de Hubbard bosonique 99
1 Motivations 99
2 Le modèle de Hubbard bosonique 101
2.1 Présentation du modèle 101
2.2 Simulations numériques 101
3 Modèle de liens classique 102
3.1 Dérivation et approximations 102
3.2 Description du modèle 103
3.3 Diagramme de phase 104
a) Cas non désordonné 104
b) Cas désordonné 106
3.4 Théorie d'échelle 108
a) Rigidité 108
b) Compressibilité 109
c) Définitions Monte Carlo 109
4 Simulations Monte Carlo 109
4.1 Algorithme local 110
4.2 Nouvel algorithme non local 111
4.3 Preuve du bilan détaillé 112
4.4 Performances 114
5 Résultats 116

6 Perspectives d'études et conclusion 118
6.1 Perspectives d'études dans le cas pur 119
a) Potentiel chimique non nul 119
b) Interactions à plus longue portée 120
6.2 Perspectives d'étude en présence de désordre 120
a) Désordre faible 120
b) Désordre fort 122
c) Désordre intermédiaire? 123

Conclusion **125**

Bibliographie **126**

Publications **139**

Chapitre I

Introduction

1 Systèmes fortement corrélés

Les systèmes dit fortement corrélés constituent pour les physiciens du solide un terrain d'études privilégié, autant d'un point de vue théorique qu'expérimental. En effet, les interactions sont à la base de propriétés électriques et magnétiques totalement uniques de composés très étudiés ces dernières années. Pour ne citer que ceux-là, les supraconducteurs à haute température critique [1] ou les manganites à magnétorésistance colossale [2] sont des matériaux aux capacités technologiques extrêmement prometteuses.

Ce sont les effets à N corps qui donnent lieu à ces manifestations macroscopiques spectaculaires mais ce sont eux aussi qui rendent cette gamme de problèmes particulièrement complexe d'un point de vue théorique. En effet, les interactions électroniques étant loin d'être négligeables, l'image de particules libres ou quasi-libres ne peut plus être le point de départ d'une description correcte de ce genre de matériaux. En particulier, toutes les approches perturbatives de type diagramme de Feynman ne sont pas valides ici.

Les prototypes de modèle représentatif des systèmes de fermions fortement corrélés se nomment modèles de Hubbard, $t-J$ ou de Heisenberg. Ces modèles, sensés capturer la physique de basse énergie d'un grand nombre de composés, présentent des diagrammes de phase extrêmement riches dès que l'on varie un de leurs paramètres (dimensionnalité, importance des interactions, du désordre ...). Ces modèles font depuis des années l'objet d'études de plus en plus sophistiquées. La raison principale en est qu'il n'existe pas, derrière leur apparente simple formulation, de méthode générale pour pouvoir les résoudre. Plus précisément, il n'existe que de rares cas particuliers où ces modèles présentent une solution exacte que l'on peut obtenir de façon analytique. Bien sûr, nous avons maintenant un grand répertoire de raisonnements de type champ moyen qui permettent de donner d'un point de vue qualitatif une bonne vision des diagrammes de phase. Cependant, il apparaît plus intéressant, dans le but d'interpréter, de comprendre et de prévoir des résultats expérimentaux, de fournir une analyse quantitative de ce genre de modèle. C'est pourquoi les simulations numériques sont devenues des outils indispensables de la physique des solides modernes. L'un des exemples les plus célèbres et anciens est

celui du travail de Bonner et Fisher qui, au début des années 60, consista en la diagonalisation numérique du hamiltonien d'une chaîne de spins 1/2 couplant jusqu'à onze sites puis au calcul de la susceptibilité magnétique de ce système en fonction de la température [3]. Aujourd'hui encore, certains expérimentateurs comparent leur mesures de susceptibilité avec les études de Bonner et Fisher pour comprendre et interpréter les résultats de leurs expériences.

Plus généralement, les simulations numériques permettent de traiter avec précision les hamiltoniens modèles de systèmes fortement corrélés en traitant sur un pied d'égalité tous les types d'interaction (c'est-à-dire sans approche perturbative), se rapprochant ainsi des vrais systèmes physiques considérés.

Tout au long de ce mémoire, nous présenterons, discuterons et analyserons des simulations numériques sur de tels hamiltoniens modèles. Nous nous intéresserons aux systèmes magnétiques quantiques autour de la physique des chaînes de spin 1 (chapitres IV et V), et étudierons la transition supraconducteur-isolant dans un système modèle (chapitre VI). Une grande partie du travail de thèse a consisté en l'apprentissage, le développement et le perfectionnement de ces méthodes de simulation. C'est pourquoi l'aspect purement numérique occupera une part importante de ce mémoire (chapitres II et III). Cependant, nous essaierons, à la fois dans le choix des systèmes traités et des résultats présentés, de dégager les aspects physiques les plus pertinents.

2 Simulations numériques de systèmes fortement corrélés

Les simulations numériques jouent un rôle majeur dans l'étude de hamiltoniens modèles de systèmes fortement corrélés. Plusieurs méthodes ont vu le jour, et nous allons tenter de décrire les principales de façon sommaire. Il est impossible d'expliciter la nature de ces différentes méthodes, et nous nous contenterons d'indiquer au lecteur intéressé quelques références clés. La première méthode que nous évoquerons est la Diagonalisation Exacte (DE) du hamiltonien, la deuxième tirée des idées du groupe de renormalisation est appelée DMRG (*Density Matrix Renormalization Group*), la troisième concerne le développement en séries haute température (SHT) et la dernière classe de méthodes qui sera évoquée est le Monte Carlo Quantique (MCQ).

2.1 Diagonalisation Exacte

La méthode de Diagonalisation Exacte (DE) [4, 5] est la plus simple à mettre en œuvre, tout du moins dans le principe. Elle consiste à écrire la matrice du hamiltonien et à la diagonaliser numériquement pour obtenir le spectre entier et les quantités désirées. Par essence exacte (aucune barre d'erreur), la DE est bien sûr limitée par la taille des matrices à diagonaliser, qui croît exponentiellement avec la taille du système. Prenons comme exemple une chaîne de Heisenberg. Si l'on considère que la taille des matrices que l'on peut diagonaliser entièrement est de l'ordre de 10^4, la version la plus naïve d'un programme de DE peut traiter des chaînes

de longueur maximale $L = 14$. Remarquons maintenant que nous pouvons utiliser toutes les symétries possibles de notre modèle pour réduire la taille de la matrice à diagonaliser [4, 5]. Dans l'exemple de la chaîne de spins précité, il est possible de diagonaliser indépendamment chaque secteur S^z du spin total (puisqu'il commute avec le hamiltonien); d'utiliser la symétrie de translation dans le cas d'une chaîne périodique (il y a L secteurs d'impulsion k différents) et de se servir encore d'autres symétries dans des cas particuliers (par exemple la symétrie d'inversion de spin dans $S^z = 0$ ou la réflexion perpendiculaire à la chaîne pour les secteurs $k = 0,\pi$). Finalement, la taille des matrices à diagonaliser est *grosso modo* divisée par le nombre de symétries du système (de l'ordre de L dans le cas de la chaîne). Grâce à ces "astuces", nous pouvons obtenir à l'heure actuelle tout le spectre d'une chaîne de $L = 22$ sites.

Si l'on ne s'intéresse qu'à la physique de basse énergie, on peut ne retenir que les états du bas du spectre. Il existe alors des algorithmes efficaces adaptés à ce problème, par exemple l'algorithme de Lanczos [6], particulièrement intéressant pour des matrices creuses (comme c'est souvent le cas pour les hamiltoniens de systèmes ayant des interactions à courte portée). L'idée de la méthode de Lanczos est de réécrire par itérations successives le hamiltonien considéré dans une base tronquée où il est tridiagonal, ce qui devient beaucoup plus facile à traiter. Les valeurs propres extrémales de cette matrice tridiagonale convergent exponentiellement vers celles du hamiltonien étudié avec le nombre d'itérations. On peut alors obtenir l'état fondamental et quelques états excités avec une précision exceptionnelle[1] pour des tailles de réseaux plus importantes, jusqu'à $L = 40$ pour la chaîne de Heisenberg.

En résumé, la méthode de DE, qui permet *a priori* d'obtenir toutes les quantités physiques avec une extrême précision quel que soit le type de modèle, est limitée à des tailles de systèmes relativement faibles à cause de la limitation en mémoire des ordinateurs actuels. Ainsi, rajouter un spin supplémentaire à une chaîne de spins 1/2 nécessite de doubler la puissance de l'ordinateur. L'obtention numérique du spectre en son entier donne accès à toute la thermodynamique du système alors que la sélection par l'algorithme de Lanczos du fondamental et de quelques états excités nous renseigne uniquement sur la physique de basse température.

2.2 Density Matrix Renormalisation Group

La méthode appelée *Density Matrix Renormalisation Group* (DMRG) proposée par White [7, 8] est une combinaison entre la méthode de DE et les principes du groupe de renormalisation. L'idée est de diagonaliser exactement un petit système (par DE), et de passer itérativement à un système de taille légèrement plus grande en ne gardant que les états les plus "importants" du bloc initial. La sélection des états s'effectue en choisissant les états propres les plus probables de la matrice densité (d'où le nom de la méthode) et non pas du hamiltonien (voir une discussion dans la référence [8]). Bien qu'assez difficilement contrôlables, les erreurs systématiques sont faibles; les états éliminés à chaque itération étant "peu" importants au sens de la matrice densité.

Cette méthode, qui est donc quasiment exacte, traite aussi bien les systèmes frus-

1. La précision des calculs est très souvent limitée par la précision machine.

trés que désordonnés. Elle a cependant ses limitations : elle se borne essentiellement, par la construction du "superbloc" succédant au bloc initial, à des systèmes unidimensionnels. Les multiples tentatives de l'étendre à des dimensions plus grandes sont en général peu fructueuses. Par contre, il est possible d'étendre la méthode DMRG à des systèmes bidimensionnels classiques par l'intermédiaire des matrices de transfert [9].

La méthode DMRG originelle est très efficace pour calculer le fondamental mais beaucoup moins pour les premières excitations : on obtient essentiellement la physique à $T \simeq 0$. Par contre, en renversant les directions d'espace réel et de temps imaginaire dans une décomposition de Trotter-Suzuki (voir chapitre II), il est possible d'obtenir des résultats à température finie. Cependant, la précision se dégrade cette fois-ci à mesure que l'on se rapproche de $T \simeq 0$ (voir par exemple les références [10, 11]).

Enfin, autant les corrélations spatiales dans l'espace réel sont accessibles avec une grande précision, autant celles dynamiques ou dans l'espace réciproque sont très difficiles à sonder.

2.3 Séries Hautes Températures

Comme son nom l'indique, la méthode des Séries Hautes Températures (SHT) est basée sur l'idée très simple de développer en puissances de β (la température inverse) les quantités thermodynamiques d'intêret, par exemple l'énergie libre. En pratique, il est possible d'aller jusqu'aux premières puissances de β analytiquement, mais il faut recourir pour les ordres plus grands à un calcul numérique. Le terme d'ordre n concerne au plus $n+1$ sites et peut être calculé sur des réseaux de taille finie (voir la publication [12] et références incluses). En effet, si l'on effectue ce développement sur un réseau, seuls les sous-graphes connectés vont contribuer aux quantités thermodynamiques. La méthode SHT permet de traiter *a priori* tous les modèles possibles directement dans la limite thermodynamique. Malheureusement, le développement est très vite limité par la mémoire de l'ordinateur et se trouve en pratique restreint aux hautes températures ou, dans le meilleur des cas, à une gamme de températures intermédiaires. Dans la même direction, il est possible d'effectuer des séries sur un paramètre du hamiltonien à $T = 0$ [13].

2.4 Monte Carlo Quantique

Le terme Monte Carlo Quantique (MCQ) regroupe plusieurs types d'algorithmes assez divers. Leur point commun est d'échantillonner la fonction de partition en visitant les points de l'espace des phases les plus représentatifs. Dans les méthodes à température finie, par exemple l'algorithme de boucle (*loop algorithm*) [14] ou le Développement en séries stochastique (*Stochastic Series Expansion* ou SSE [15, 16]), la "balade" s'effectue conformément au poids de Boltzmann $e^{-\beta H}$ de la configuration. Dans les méthodes à $T = 0$ (*Projector Monte Carlo* [17], *Green Function Monte Carlo* [18] entre autres) qui nécessitent généralement une fonction d'essai initiale, la marche est liée à un paramètre de projection vers le fondamental. Pour les systèmes de fermions et les systèmes de spins quantiques frustrés, toutes ces méthodes

souffrent en général du *problème de signe*: la probabilité de visiter un point de l'espace des phases n'est pas positive et l'algorithme est complètement inefficace. Quelques solutions permettant de se débarrasser ou d'alléger le problème de signe ont été proposées dans certains cas particuliers, mais il n'existe pas à l'heure actuelle de solution générale satisfaisante. Gageons que les méthodes MCQ deviendront celles de choix pour les simulations numériques de systèmes quantiques si ce problème est résolu. Au cours de cette thèse, nous avons développé et utilisé deux méthodes MCQ particulièrement adaptées à l'étude de spins quantiques non frustrés: l'algorithme de boucle en temps continu et la méthode de Développement en séries stochastique. Ces deux méthodes inspirées des algorithmes de blocs (*cluster algorithms*) classiques [19, 20], effectuent des mouvements non locaux dans l'espace des phases. Il n'existe pas d'erreur systématique de discrétisation dans le temps imaginaire, la seule source d'erreur est statistique. Grâce à la puissance de ces algorithmes qui fonctionnent en principe à $T \neq 0$, nous pouvons simuler de très grands systèmes à des températures très faibles et donc se situer principalement dans le fondamental. Il existe même une version de ces algorithmes qui, dans certaines conditions, simule directement un système dans la limite thermodynamique et/ou à $T = 0$ [21]. Pour quantifier la puissance de ces algorithmes, disons que le produit $\beta.N_t$, où N_t est le nombre de termes du hamiltonien, peut valoir jusqu'à 10^7. Le "record" actuel a été établi dans la référence [22] avec un produit de l'ordre de 2.10^8. L'algorithme de boucle et la méthode de Développement en séries stochastique sont présentés dans les deux premiers chapitres de cette thèse, avec un accent particulier sur la manière de simuler le hamiltonien de Heisenberg. Comme indiqué dans l'introduction de ces chapitres, cette présentation reflète la démarche de compréhension et d'apprentissage de l'auteur. Nous espérons que le lecteur intéressé y trouvera à la fois la base théorique, les références et la "boîte à outils" nécessaires pour construire lui-même son propre code MCQ.

3 Plan de thèse

Au cours de cette thèse, nous nous sommes appliqués à étudier divers problèmes liés aux systèmes fortement corrélés d'un point de vue numérique. Toutes nos études sont basées autour d'algorithmes non locaux de Monte Carlo Quantique; cela constitue le fil conducteur de ce travail. Ces méthodes sont actuellement les plus performantes dans ce domaine.

Il est important de développer et d'améliorer les performances de telles méthodes pour obtenir une compréhension de plus en plus poussée des systèmes physiques. C'est pourquoi dans ce mémoire, en parallèle de l'étude de systèmes physiques aux propriétés remarquables, un accent particulier a été posé sur la méthodologie et le développement de telles techniques.

Les prochains chapitres présentent en détail les algorithmes de Monte Carlo Quantique que nous avons développés et utilisés, l'algorithme de boucle en temps continu et la méthode de Développement en séries stochastique (*Stochastic Series*

Expansion)[2]. Les résultats des calculs présentés dans les deux chapitres suivants ont été obtenus avec ces outils très puissants. Le lecteur non intéressé par les aspects techniques de ces méthodes pourra passer ces chapitres en première lecture.

Les chapitres IV et V traitent de magnétisme quantique en relation avec la physique des systèmes de Haldane. Après une introduction à la physique de Haldane, nous étudions dans le chapitre IV les effets de température et de champ magnétique sur les profils d'aimantation de chaînes de spin 1 ouvertes. Nous reconstruisons ensuite numériquement les spectres de Résonance Magnétique Nucléaire de ces chaînes et les comparons aux spectres expérimentaux réels obtenus sur $Y_2BaNi_{1-x}Mg_xO_5$. Les simulations numétiques sont en excellent accord avec les résultats expérimentaux.

Le chapitre V propose l'étude de chaînes de spin 1 faiblement couplées et s'intéresse à la transition de phase quantique entre la phase de Haldane et celle de Néel. Une méthode originale est développée pour localiser et étudier les points critiques quantiques dans le cadre de simulations Monte Carlo Quantique. Le résultat de cette étude montre que le couplage interchaîne critique est étonnamment faible, comparé au gap de Haldane.

Enfin, dans le chapitre VI, nous quittons le magnétisme quantique pour nous intéresser à la transition supraconducteur-isolant dans le modèle de Hubbard bosonique. Pour l'étude de ce modèle, un nouvel algorithme Monte Carlo non local de type algorithme de ver (*worm algorithm*) est introduit, permettant la simulation de systèmes beaucoup plus grands que dans les études précédentes. La transition de phase supraconducteur-isolant d'un système pur pour une valeur du potentiel chimique est étudiée avec grande précision. L'efficacité de cet algorithme promet d'ouvrir une nouvelle voie dans l'étude de ce modèle en présence de désordre, là où les simulations numériques étaient limitées à cause de la petite taille des systèmes étudiés.

2. Il est apparu pendant l'écriture de cette thèse qu'il était difficile de limiter l'emploi d'anglicismes dans la description technique des méthodes numériques. Nous avons choisi de franciser, souvent avec malheur, certains termes et d'en laisser certains autres en anglais selon une logique totalement arbitraire. Je prie par avance le lecteur de bien vouloir m'excuser d'un excès dans un sens ou dans un autre.

Chapitre II

Algorithme de boucle en temps continu

Ce chapitre décrit la méthode de Monte Carlo Quantique d'algorithme de boucle en temps continu (*continuous time loop algorithm*). Il ne s'agit pas d'effectuer une revue exhaustive de cette méthode pour laquelle existent de très bons écrits [14, 23]. Ce chapitre se veut plutôt pédagogique et reflète la démarche d'apprentissage et de compréhension de l'auteur; il peut à ce titre être utile comme introduction au sujet. Nous allons dans un premier temps rappeler brièvement la méthode de Monte Carlo classique en évoquant les algorithmes de blocs (*cluster algorithms*) qui permettent d'éviter les problèmes de ralentissement critique. Puis nous passerons au cas quantique à travers l'exemple le plus traité (chaîne de Heisenberg antiferromagnétique) et décrirons comment les idées des méthodes de blocs classiques ont ressurgi dans l'algorithme de boucle. Ensuite, nous présenterons la méthode en temps continu [24] qui correspond à une discrétisation infinie dans la direction de Trotter. Après une section consacrée aux valeurs moyennes d'observables, nous terminerons en évoquant les généralisations possibles de l'algorithme de boucle.

1 Monte Carlo Classique

1.1 Monte Carlo Classique Standard

La méthode de Monte Carlo en physique statistique (voir références [25, 26, 27]) consiste à évaluer une intégrale[1] dans l'espace des phases par une somme finie sur un certain nombre N de points x_l de l'espace des phases pris avec une certaine probabilité $P(x_l)$. La moyenne thermique d'une observable s'évalue ainsi :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int e^{-\beta H(x)} \mathcal{O}(x) dx \simeq \frac{\sum_{l=1}^{N} e^{-\beta H(x_l)} \frac{\mathcal{O}(x_l)}{P(x_l)}}{\sum_{l=1}^{N} e^{-\beta H(x_l)} \frac{1}{P(x_l)}}. \tag{1}$$

Prenons comme exemple le modèle d'Ising : à une température non nulle, toutes les configurations de spins sont possibles avec une probabilité de type Boltzmann

1. ou une somme discrète dans le modèle d'Ising par exemple.

$\exp(-\beta E)$ où E est l'énergie de la configuration. Pour connaître l'aimantation moyenne, on pourrait engendrer aléatoirement plusieurs configurations en prenant $P(x_l)$ uniforme puis calculer l'aimantation moyenne en sommant les différentes aimantations pondérées par leurs poids de Boltzmann. Cette méthode est correcte mais s'avère trop coûteuse dans le cas où le nombre de spins est grand, car elle traite de manière uniforme toutes les configurations. En fait, seule une petite partie de l'espace des phases contribue de façon significative aux moyennes thermodynamiques.

L'idée de l'algorithme de Metropolis [28] est de construire une chaîne de Markov entre les configurations : on passe d'une configuration x_l à une configuration x_{l+1} avec une probabilité de transition $W(x_l \to x_{l+1})$. Pour que $P(x_l)$ tende vers la distribution d'équilibre $P_{\text{eq}}(x_l)$ (distribution de Boltzmann) lorsque $N \to \infty$, il suffit de vérifier la relation de bilan détaillé

$$P_{\text{eq}}(x_l)W(x_l \to x_{l+1}) = P_{\text{eq}}(x_{l+1})W(x_{l+1} \to x_l). \tag{2}$$

De plus, il est nécessaire de vérifier l'ergodicité de la procédure (on doit pouvoir passer d'une configuration à n'importe quelle autre en un nombre fini de pas). En pratique, deux probabilités de transition sont utilisées :

(1) Metropolis $\quad W(x_l \to x_{l+1}) = \min(1, e^{-\beta\Delta E})$

(2) Bain thermique $\quad W(x_l \to x_{l+1}) = \frac{e^{-\beta\Delta E}}{1+e^{-\beta\Delta E}}$

où $\Delta E = E(x_{l+1}) - E(x_l)$ est le changement d'énergie suscité par ce mouvement dans l'espace des phases. Dans notre exemple des spins d'Ising, le passage d'une configuration à une autre se fait en essayant de retourner un spin. Dans le cas de l'algorithme de Metropolis, ce renversement est toujours accepté si le système gagne de l'énergie ($\Delta E < 0$) et est accepté avec une probabilité $\exp(-\beta\Delta E)$ dans le cas où il en perd.

Une fois ce retournement accepté ou non, les différentes caractéristiques (aimantation, énergie, etc.) de la configuration sont stockées dans le but de calculer les valeurs moyennes thermodynamiques d'observables sans tenir compte du poids de Boltzmann (puisque la distribution des états suit elle-même une loi de Boltzmann) :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^{N} \mathcal{O}_l. \tag{3}$$

$P(x_l)$ n'étant la distribution d'équilibre que lorsque $N \to \infty$, il existe une erreur sur cette moyenne qui varie en $1/\sqrt{N}$.

1.2 Algorithmes de blocs classiques

Les algorithmes qui ne retournent qu'un seul spin à la fois (qui font passer le système d'un état à un autre état proche dans l'espace des phases) se révèlent efficaces lorsque les fluctuations sont faibles. Proche d'une transition de phase du second

ordre, ils sont beaucoup plus lents. Le système s'organise en domaines de spins corrélés dont la taille augmente avec la température s'approchant de la température critique (la longueur et le temps de corrélation divergent à T_c). Il faudra un temps $\tau \sim L^z$ pour renverser un domaine de longueur caractéristique L (z l'exposant dynamique vaut typiquement 2 pour ce genre d'algorithme). Proche de la transition, les algorithmes ne renversant qu'un spin ne vont s'attaquer qu'aux surfaces de ces domaines et vont donc être très lents : c'est le ralentissement critique (*critical slowing down*).

En réponse aux problèmes de corrélation et de ralentissement critique sont apparus à la fin des années 80 des algorithmes donnant la possibilité de retourner des blocs massifs de spins de façon cohérente : les algorithmes de blocs (*cluster algorithms*) [19, 20]. On pourra consulter la référence [27] pour une revue pédagogique de ces algorithmes.

Expliquons brièvement le procédé dans l'exemple des spins d'Ising : partant d'une certaine configurations de spins, on engendre à partir de celle-ci une configuration de liens entre ces spins avec une certaine probabilité. Puis une nouvelle configuration de spins est créée à partir de la configuration de liens. La démarche simple pour écrire un tel algorithme est la suivante : partant d'une configuration de spins, on établit des liens entre plus proches voisins avec une probabilité p s'ils sont parallèles et 0 s'ils ne le sont pas. Sont formés ainsi des blocs de spins ayant tous la même valeur. Ensuite, tous les spins d'un même bloc sont renversés. La probabilité p d'établir des liens est telle que la relation de bilan détaillé est vérifiée. Remarquons que le poids thermodynamique intervient dans l'algorithme de Metropolis au moment de renverser le spin alors que c'est lors de la construction du bloc lui-même qu'il intervient : on construit une boucle de façon stochastique.

Deux types d'algorithmes peuvent être distingués : les algorithmes à blocs multiples (*multi-cluster*) ou à bloc unique (*single cluster*).

L'algorithme originel de Swendsen et Wang [19] est un algorithme à blocs multiples : le réseau est entièrement décomposé en blocs (chaque spin appartient à un bloc et un seul) puis chaque bloc est renversé avec une probabilité 1/2. La probabilité d'établir des liens entre spins proches voisins identiques vaut, pour vérifier le bilan détaillé, $p = 1 - e^{-2\beta}$ (les algorithmes de blocs effectuent des changements non locaux à partir de probabilités stochastiques locales).

Wolff [20] a proposé en 1989 un algorithme très similaire où cette fois-ci un seul bloc est formé (*single cluster*) : un spin est choisi aléatoirement et marqué comme appartenant au bloc. On lui propose ensuite des liens avec ses plus proches voisins de même orientation avec la même probabilité $p = 1 - e^{-2\beta}$. Si, parmi ces voisins, des liens sont acceptés, ces spins sont marqués et on leur applique la même. Quand le processus s'arrête, le bloc est formé et est obligatoirement retourné. Cet algorithme est équivalent à celui de Swendsen et Wang mais s'avère plus rapide pour des grandes dimensions d'espace (le spin initial a plus de chances d'appartenir à un grand bloc).

De tels algorithmes de blocs sont très efficaces proches du point critique et surmontent le problème du ralentissement critique. Des grands sauts dans l'espace des phases sont effectués à chaque pas, diminuant le temps d'autocorrélation de manière spectaculaire. Ce phénomène est visible dans le tableau 1.2 où sont données les va-

Exposant dynamique z	Ising 2d	Ising 3d	Ising 4d
Metropolis	2.167(1)	2.02(2)	–
Swendsen-Wang	0.25(1)	0.54(2)	0.86(2)
Wolff	0.25(1)	0.33(1)	0.25(1)

TAB. II.1 – *Exposant dynamique pour le modèle d'Ising à deux, trois et quatre dimensions pour les algorithmes évoqués dans le texte (valeurs issues de la référence [27]).*

leurs d'exposant dynamique z pour le modèle d'Ising pour différentes dimensions.

Nous avons résumé de façon graphique sur la figure II.1 comment agissent les différents algorithmes : l'algorithme de Metropolis choisit un spin et teste s'il est énergétiquement favorable de le renverser, l'algorithme de Swendsen et Wang décompose le réseau en blocs de spins identiques puis retourne certains d'entre eux et, enfin, l'algorithme de Wolff ne construit qu'un seul bloc et le renverse.

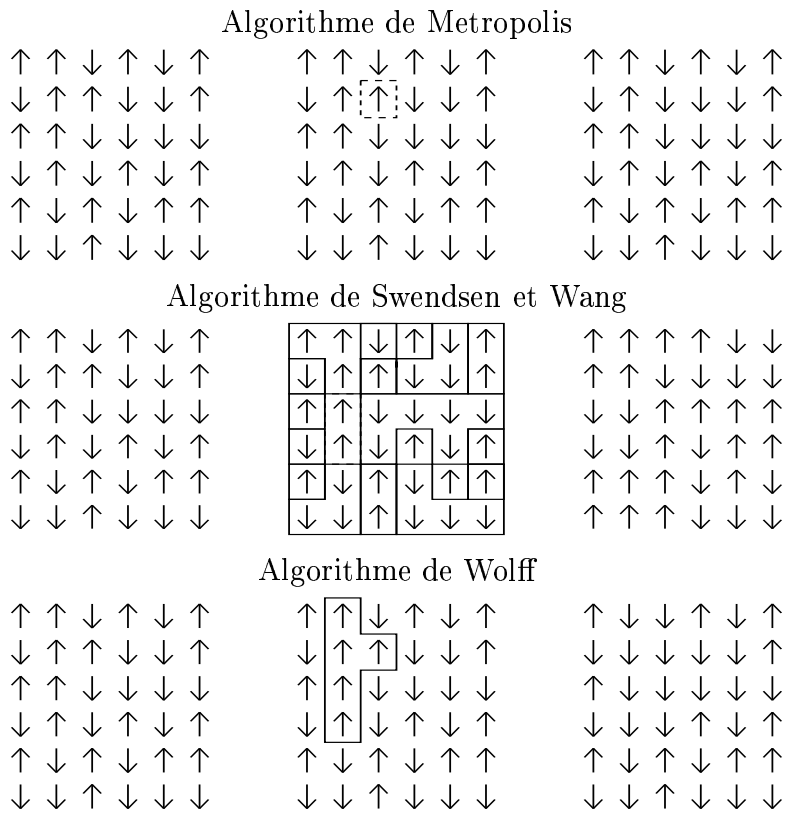


FIG. II.1 – *Actions des différents algorithmes (figure du milieu) sur une même configuration initiale (figure de gauche) de spins d'Ising et configuration obtenue (figure de droite).*

1.3 Estimateurs améliorés

Un autre avantage des algorithmes de blocs est qu'ils permettent l'utilisation d'estimateurs améliorés (*improved estimators*). Un estimateur amélioré d'une observable physique est une observable différente qui possède la même valeur moyenne que l'observable considérée mais une variance réduite [20, 27]. Les variables internes des blocs (telle que leur taille) se révèlent être des estimateurs améliorés efficaces pour de nombreuses quantités physiques intéressantes. Ainsi, dans l'algorithme de Wolff, la susceptibilité est reliée de façon très simple à la taille moyenne du bloc [20, 27] :

$$\chi = \beta \langle c \rangle. \tag{4}$$

La variance étant réduite, on a besoin d'effectuer moins de pas Monte Carlo en utilisant les estimateurs améliorés. De plus, d'un point de vue technique, il est beaucoup plus simple et rapide d'obtenir la taille du bloc, par exemple, que de recalculer après chaque pas Monte Carlo la susceptibilité de la configuration.

Plus récemment, Assaraf et Caffarel [29] ont généralisé le concept d'estimateurs améliorés en construisant des observables qui ont même valeur moyenne qu'une observable désirée mais une variance nulle.

2 Monte Carlo Quantique Worldline

Le succès de l'utilisation des méthodes de Monte Carlo pour des problèmes de physique statistique classique ainsi que leur relative simplicité nous invitent à essayer d'appliquer les mêmes méthodes à des modèles quantiques. Le problème qui se pose assez rapidement est bien sûr la non-commutativité des opérateurs du hamiltonien. Dans le calcul de la fonction de partition par exemple, il faut évaluer l'exponentielle de sommes d'opérateurs, ce qui est impossible analytiquement dans le cas général. Il existe plusieurs variantes de la méthode de Monte Carlo Quantique (MCQ), chacune adaptée à un ou des problèmes particuliers. Ici nous nous attellerons à discuter de la méthode de Monte Carlo Quantique *Worldline* (ligne d'univers), utilisée pour les problèmes de spins sur réseaux. L'idée des techniques de Monte Carlo Quantique est de ramener un problème quantique à un problème classique dans une dimension d'espace supérieure. L'outil traditionnellement utilisé pour décrire un système quantique de façon classique est l'intégrale de chemin. Les méthodes de MCQ de type Worldline utilisent la formule de Trotter-Suzuki et une décomposition astucieuse du hamiltonien pour obtenir une représentation en intégrale de chemin la plus exploitable possible dans le système classique équivalent. Nous allons dans cette partie poser les bases du MCQ Worldline, en présentant dans le détail la construction de l'algorithme, ce qui nous permettra d'introduire les notions et le vocabulaire nécessaire pour aborder l'algorithme de boucle.

2.1 Formule de Trotter-Suzuki

On reprend la présentation de De Raedt et Lagendijk [30]. La formule de Trotter [31] pour deux opérateurs H_1 et H_2 (qui ne commutent pas en général) s'écrit :

$$e^{-\beta(H_1+H_2)} = (e^{-\frac{\beta}{m}H_1}e^{-\frac{\beta}{m}H_2})^m + o(\frac{\beta^2}{m^2}). \tag{5}$$

Suzuki généralise cette formule en 1976 [32, 33] au cas où le hamiltonien du système s'écrit comme une somme de plusieurs termes $H = \sum_{i=1}^{p} H_i$:

$$e^{-\beta H} = (e^{-\frac{\beta}{m}H_1} \dots e^{-\frac{\beta}{m}H_p})^m + o(\frac{\beta^2}{m^2}) = \rho_m + o(\frac{\beta^2}{m^2}) \tag{6}$$

où $\rho_m = (\prod_{i=1}^{p} e^{-\frac{\beta}{m}H_i})^m$ est le $m^{\text{ième}}$ approximant à l'opérateur densité $\rho = e^{-\beta H}$. On définit le $m^{\text{ième}}$ approximant à la fonction de partition comme $Z_m = \text{Tr}\rho_m$. Pour avoir une forme exploitable de la fonction de partition, on insère entre chaque exponentielle la relation de fermeture d'une base orthonormée $\{|\psi_i\rangle\}$ et on obtient après quelques manipulations :

$$Z_m = \sum_{\{i_j\}} \prod_{j=1}^{m} \left\langle \psi_{i_{(1,j)}} \right| e^{-\frac{\beta}{m}H_1} \left| \psi_{i_{(2,j)}} \right\rangle \left\langle \psi_{i_{(2,j)}} \right| e^{-\frac{\beta}{m}H_2} \left| \psi_{i_{(3,j)}} \right\rangle \dots \left\langle \psi_{i_{(p,j)}} \right| e^{-\frac{\beta}{m}H_p} \left| \psi_{i_{(p+1,j)}} \right\rangle. \tag{7}$$

Si le partitionnement du hamiltonien et le choix de la base sont judicieux (on essaye en général de respecter au maximum les symétries du modèle), les éléments de matrice intervenant dans la formule (7) peuvent être assez simples à calculer. En posant $\Delta\tau = \frac{i\beta\hbar}{m}$, on remarque que (7) peut être interprété comme suit : le système initialement dans l'état $\left|\psi_{i_{(1,j)}}\right\rangle$ évolue (discrètement) dans le temps imaginaire $\Delta\tau$ par l'application de l'opérateur $e^{\frac{i\Delta\tau}{\hbar}H_1}$ pour arriver dans l'état $\left|\psi_{i_{(2,j)}}\right\rangle$ etc. La fonction de partition représente alors tous les chemins possibles : dans la limite $m \to \infty$, on se retrouve avec l'intégrale de chemin de la fonction de partition. En fait, par la formule de Trotter, nous avons arbitrairement introduit une nouvelle dimension dans le système (la direction de Trotter) qui peut, comme nous venons de le voir, être interprétée comme un temps imaginaire. C'est uniquement dans la limite $m \to \infty$ que l'approximation à la fonction de partition se révèle exacte.

2.2 Exemple de la chaîne antiferromagnétique

Pour illustrer de quelle manière s'utilise la formule de Trotter-Suzuki dans les méthodes de Monte Carlo Quantique, nous allons l'appliquer dans le cas d'une chaîne de spins $\frac{1}{2}$ unidimensionnelle antiferromagnétique. On considère le modèle XXZ suivant (les conditions aux bords sont choisies périodiques) :

$$H = J_x \sum_{i=1}^{N} S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + J \sum_{i=1}^{N} S_i^z S_{i+1}^z. \tag{8}$$

$J > 0$ décrit l'anisotropie d'échange dans la direction z ($J = |J_x|$ dans nos conventions correspond au cas antiferromagnétique isotrope). Notons que J_x peut être positif ou négatif[2]. En supposant le nombre de sites pair, on découpe le hamiltonien de la façon suivante [34] :

$$\begin{cases} H_A = \sum_{i=1}^{N/2} H_{2i-1,2i}, \quad H_B = \sum_{i=1}^{N/2} H_{2i,2i+1} \\ H_0 = J \sum_{i=1}^{N} S_i^z S_{i+1}^z \end{cases} \tag{9}$$

avec $H_{i,j} = J_x(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y)$. On regroupe les sites deux par deux et dans cette décomposition, chaque terme dans les deux sommes H_A et H_B commute avec les autres termes de la même somme (interaction aux plus proches voisins). On choisit alors comme base $|S\rangle = |S_1 \dots S_N\rangle$ où S_i est la valeur de la projection du spin suivant l'axe z (valeur propre de S_i^z) qui peut prendre les deux valeurs $\pm\frac{1}{2}$. H_0 est diagonal dans cette base avec pour valeur propre $E_0 = J \sum_i S_i S_{i+1}$.

Le $m^{\text{ième}}$ approximant à la fonction de partition s'écrit :

$$Z_m = \mathrm{Tr}(e^{-\frac{\beta}{2m}H_0} e^{-\frac{\beta}{m}H_A} e^{-\frac{\beta}{2m}H_0} e^{-\frac{\beta}{m}H_B})^m. \tag{10}$$

On insère alors, comme décrit précédemment, la relation de fermeture de notre base entre chaque exponentielle et on effectue la trace. Il y a en tout $2m$ itérations de la relation de fermeture qu'on indexe avec l'indice τ $|S^\tau\rangle$. On a alors :

$$Z_m = \sum_{S^1 \dots S^{2m}} e^{-\frac{\beta}{2m}\sum_{\tau=1}^{2m} E_0^\tau} \left\langle S^1 \right| e^{-\frac{\beta}{m}H_A} \left| S^2 \right\rangle \left\langle S^2 \right| e^{-\frac{\beta}{m}H_B} \left| S^3 \right\rangle \dots \left\langle S^{2m} \right| e^{-\frac{\beta}{m}H_B} \left| S^1 \right\rangle. \tag{11}$$

Les termes $e^{-\frac{\beta}{m}H_A}$ et $e^{-\frac{\beta}{m}H_B}$ sont constitués de termes commutant entre eux et qui, appliqués sur la base $|S^\tau\rangle$, ne concernent que deux spins voisins. On a donc :

$$\begin{aligned} \left\langle S^\tau \right| e^{-\frac{\beta}{m}H_A} \left| S^{\tau+1} \right\rangle &= \left\langle S^\tau \right| e^{-\frac{\beta}{m}\sum_{i \text{ impair}} H_{i,i+1}} \left| S^{\tau+1} \right\rangle \\ &= e^{-\beta \sum_{i \text{ impair}} h(i,\tau)} \end{aligned} \tag{12}$$

$$\text{où} \quad e^{-\beta h(i,\tau)} = \left\langle S_i^\tau S_{i+1}^\tau \right| e^{-\frac{\beta}{m}H_{i,i+1}} \left| S_i^{\tau+1} S_{i+1}^{\tau+1} \right\rangle. \tag{13}$$

On se rappelle ensuite que H_A (respectivement H_B) concerne les couples de spins $(i,i+1)$ où i est impair (resp. pair) et que cet opérateur est toujours compris entre des vecteurs $\langle S^\tau| \dots |S^{\tau+1}\rangle$ où τ est impair (resp. pair). Finalement, on peut écrire la fonction de partition en regroupant les deux sommes sur i pair et impair avec la somme sur τ sous la forme suivante :

$$Z_m = \sum_{S^1 \dots S^{2m}} e^{-\frac{\beta J}{2m}\sum_{i,\tau=1}^{N,2m} S_i^\tau S_{i+1}^\tau - \beta \sum_{\substack{i,\tau=1 \\ i+\tau \text{ pair}}}^{N,2m} h(i,\tau)}. \tag{14}$$

2. Nous modifierons ce signe plus loin par une transformation unitaire.

Cette fonction de partition peut être interprétée comme celle d'un problème classique à deux dimensions : on a un réseau de dimensions $N \times 2m$ constitués de spins d'Ising $S_i^\tau = \pm\frac{1}{2}$ situés aux nœuds (i,τ) du réseau. L'interaction entre spins fait intervenir quatre spins comme cela est visible dans la formule (13). La matrice de "transfert" connectant deux spins d'Ising voisins à l'instant τ à deux autres à l'instant $\tau+1$ s'écrit[3] :

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cccc} \langle\uparrow\uparrow| & \langle\uparrow\downarrow| & \langle\downarrow\uparrow| & \langle\downarrow\downarrow| \end{array} \\ & \begin{pmatrix} e^{-\frac{\beta J}{4m}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{\frac{\beta J}{4m}}\cosh(\frac{\beta|J_x|}{2m}) & e^{\frac{\beta J}{4m}}\sinh(\frac{\beta|J_x|}{2m}) & 0 \\ 0 & e^{\frac{\beta J}{4m}}\sinh(\frac{\beta|J_x|}{2m}) & e^{\frac{\beta J}{4m}}\cosh(\frac{\beta|J_x|}{2m}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\frac{\beta J}{4m}} \end{pmatrix} \begin{array}{c} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{array} \end{array} . \tag{15}$$

Notons que les termes non diagonaux sont dans un premier temps négatifs pour $J_x > 0$ (et ne pourront plus être interprétés comme des poids de Boltzmann). Dans le cas des réseaux bipartites (la chaîne en est un), on peut s'affranchir de ce problème de signe avec une transformation unitaire : on tourne un spin sur deux de 180 degrés autour de l'axe des z et J_x devient $-J_x$. Le "célèbre" problème de signe dans le Monte Carlo Quantique (voir section 6.5) pour les fermions se traduit dans les problèmes de spins sur réseaux par l'impossibilité de trouver une transformation unitaire qui rend les éléments de la matrice de transfert tous positifs[4].

L'interaction effective entre ces spins d'Ising dépend de la température et il faudra donc faire particulièrement attention lorsque nous calculerons des valeurs moyennes.

2.3 Représentation en damier et worldlines

Une représentation graphique utile pour voir quels spins interagissent est celle du damier [34]. Sur la figure II.2, on a représenté le réseau bidimensionnel. La direction horizontale représente le réseau réel : N sites sont repérés par l'indice i, le pas dans cette direction est celui du réseau réel et les conditions aux bords sont périodiques. La direction verticale est celle de Trotter : on retrouve $2m$ sites dans cette direction repérés par l'indice τ (temps imaginaire), on choisit le pas égal à $\frac{\Delta\tau}{2}$ pour que le dernier site corresponde au temps imaginaire β. Les conditions aux bords sont elles aussi périodiques (cyclicité de la trace).

Un spin sur ce réseau interagit avec tous les spins situés sur un même carreau grisé sur le damier : ces carreaux correspondent au cas $i+\tau$ pair de la somme (14). La contribution de chaque carreau grisé à la fonction de partition dépend des quatre spins qui le composent suivant les formulations de (13) et (14) : ceci est donné dans le tableau II.2. On voit en fait qu'il n'existe que six configurations possibles de spins

3. On se sert de la formule suivante :

$$e^{K(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y)} = (\frac{1}{2} + 2S_i^z S_j^z) + (\frac{1}{2} - 2S_i^z S_j^z)\cosh(\frac{K}{2}) + (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)\sinh(\frac{K}{2}).$$

4. C'est le cas des réseaux non bipartites et des systèmes frustrés.

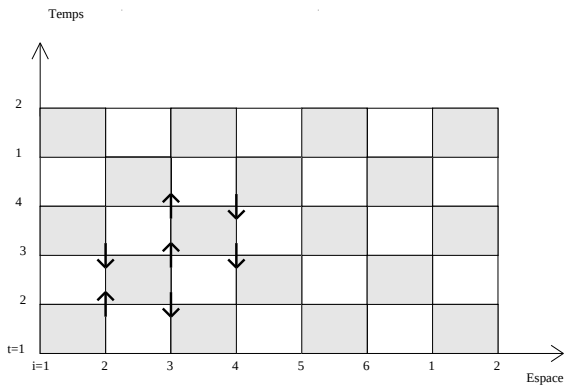


FIG. II.2 – *Représentation en damier de la fonction de partition (14). Ici m=2 et N=6. Les carreaux grisés sont ceux avec interactions : un spin sur le réseau interagit avec tous les spins qui sont sur un même carreau grisé que lui.*

Type	Configuration	Poids
Type 1		$e^{-\frac{\beta J}{4m}}$
Type 2		$e^{\frac{\beta J}{4m}} \cosh(\frac{\beta \lvert J_x \rvert}{2m})$
Type 3		$e^{\frac{\beta J}{4m}} \sinh(\frac{\beta \lvert J_x \rvert}{2m})$

TAB. II.2 – *Tableau des configurations possibles et des poids correspondants.*

sur une plaquette en interaction, ces configurations ayant en commun un nombre pair de spins de même signe.

a) Les worldlines

Sur les dessins des plaquettes du tableau II.2 sont représentées des lignes reliant les spins up : ce sont les *worldlines* (lignes d'univers). L'aimantation totale (la composante suivant z du spin total) étant conservée à chaque tranche de temps, on peut tracer verticalement des lignes (les worldlines) reliant les spins up pour chaque tranche de temps. Ces lignes sont tracées sur les carreaux grisés suivant les graphes indiqués dans le tableau précédent. Sur la figure II.3, nous avons représenté un exemple de configuration de spins et les worldlines correspondantes.

b) Mouvements permis

Dans le cas d'une simulation Monte Carlo classique d'un réseau de spins d'Ising, on essaie de retourner un spin choisi aléatoirement. Ici, ce n'est pas possible car on aboutirait à des configurations non permises (ayant des poids nuls). On va donc

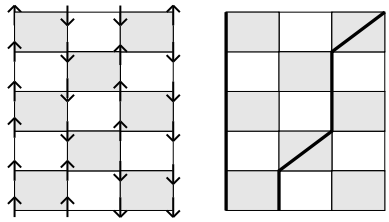


FIG. II.3 – *Exemple d'une configuration de spins sur le damier et son équivalent en termes de worldlines.*

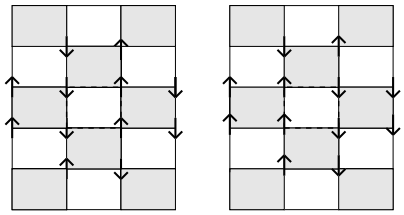


FIG. II.4 – *Exemple de mouvement local simple. On renverse les quatre spins de la plaquette sans interaction en traits brisés : on modifie ainsi deux spins sur chacune des quatre plaquettes avec interactions aux alentours.*

renverser plusieurs spins. Il est important de voir que si l'on renverse deux spins sur une seule plaquette, on intervient aussi sur deux autres plaquettes en ne renversant qu'un seul de leurs spins, ce qui les emmène dans des configurations non permises. On doit donc développer une chaîne de spins à retourner, et s'assurer qu'on retrouve en fin de chaîne les spins de début de chaîne. Ainsi, toutes les plaquettes concernées auront au moins deux spins retournés.

La chaîne fermée de spins la plus simple à réaliser est la suivante (cf. figure II.4). On renverse les quatre spins d'une plaquette blanche (sans interaction), renversant ainsi deux spins sur chacune des quatre plaquettes grisées (avec interactions) les plus proches. Ce mouvement local est accepté avec la probabilité suivante : on calcule le poids de la configuration initiale (comme produit des poids des quatre plaquettes grisées aux alentours) puis le poids de la configuration retournée de la même manière. Si le rapport du poids final sur le poids initial est supérieur à un nombre aléatoire tiré entre 0 et 1, on effectue ce changement. Ce mouvement local, qui vérifie la condition de bilan détaillé, correspond au simple renversement de spin Metropolis dans le cas classique.

On peut imaginer des mouvements plus complexes, où les chaînes de spins à retourner seraient plus élaborées que celles des mouvements locaux. On présente ici deux mouvements célèbres : les lignes de temps et d'espace. L'idée est de tracer une ligne dans le temps ou dans l'espace et de renverser tous les spins le long de

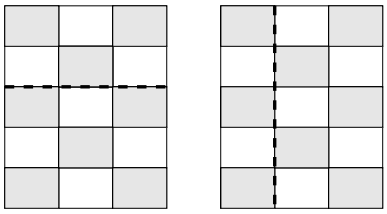


FIG. II.5 – *Exemple de mouvements non locaux. On renverse les spins situés le long d'une ligne (ici en traits brisés) dans le temps ou dans l'espace.*

cette ligne (voir figure II.5). La chaîne de spins sera fermée à cause des conditions périodiques dans les deux directions. La probabilité de transition est calculée de la même façon : produit des poids des plaquettes après renversement sur produit des poids avant. Bien évidemment, plus le réseau sera grand dans le temps ou dans l'espace, plus la probabilité sera faible. Bien que ce type de mouvement permette de se déplacer de manière assez large dans l'espace des phases, il se révèle très peu probable à basse température : on se trouve dans une situation de ralentissement critique.

3 Algorithme de boucle

Au début des années 90 est apparue une nouvelle méthode [35] très proche des algorithmes de blocs classiques s'appliquant aux systèmes quantiques. Cette méthode connue sous le nom d'algorithme de boucle (*loop algorithm*) est par bien des égards supérieure au Monte Carlo Worldline. L'algorithme de boucle effectue des changements non locaux à partir de probabilités stochastiques locales. L'idée est de construire une ou plusieurs boucles fermées de spins, et de les retourner en place de faire des changements locaux qui ne retournent que quatre spins à la fois. Les avantages de l'algorithme de boucle sont multiples : comme tous les algorithmes de blocs, le temps d'autocorrélation est réduit et le problème de ralentissement critique est évité. De plus, il est possible d'obtenir des estimateurs améliorés efficaces pour les mesures d'observables usuelles. Nécessitant moins de pas Monte Carlo (l'espace des phases est exploré plus rapidement), on peut travailler sur des réseaux plus grands, ce qui dans la dimension de Trotter revient à descendre plus bas en température. Enfin, chose très importante, il est possible dans le cadre de l'algorithme de boucle de passer à la limite continue dans le temps imaginaire (nous reviendrons sur ce point dans la prochaine partie).

Représentation graphique	Découpage
	$G^{1,2}$
	$G^{2,3}$
	$G^{1,3}$
	$G^{1,1} = G^{2,2} = G^{3,3}$

TAB. II.3 – *Représentations des découpages $G^{i,j}$ (notations et schémas sont tirés de la référence [14]) où* i *et* j *sont les types de configurations (voir tableau II.2). Le découpage $G^{i,j}(i \neq j)$ s'applique aux configurations* i *ou* j *: en renversant les deux spins sur une des deux lignes représentées, on passe de la configuration* i *à la configuration* j *(et inversement). Le quatrième découpage $G^{i,i}$ (appelé gel) renverse les quatre spins sur la plaquette et ne change donc pas son type.*

3.1 Construction de la boucle

a) Cas général

Nous n'entrerons pas dans les détails de la théorie générale de l'algorithme de boucle et renvoyons le lecteur à la réfèrence [14]. Pour se fixer les idées, on utilise de nouveau la décomposition en plaquettes de la formule de Trotter-Suzuki proposée dans la référence [34]. À chaque type de plaquette en interaction (chaque plaquette grisée) est associé un découpage (*breakup*) qui permet en renversant deux ou quatre spins de passer à un autre type de plaquette (voir tableau II.3). Dans une configuration donnée, chaque plaquette peut donner plusieurs découpages différents avec des probabilités différentes (dépendant du poids de la plaquette actuelle et du poids de la plaquette après découpage). À chaque configuration on fait correspondre un graphe constitué de découpages choisis de façon stochastique. Les règles de construction des découpages assurent qu'ils se referment en boucles [14] : un graphe est donc constitué de plusieurs boucles pouvant s'entremêler. La dernière étape consiste à retourner tous les spins le long de chaque boucle avec une probabilité $p_f = 1/2$.

Ce processus de construction de graphe est tel qu'il est ergodique et que la configuration obtenue après renversement des spins sur les boucles est permise et vérifie la relation de bilan détaillé [14].

b) Cas particulier : application d'un algorithme de boucle unique à la chaîne de spins $1/2$

La présentation de l'algorithme effectuée ici est assez fidèle à la description des références [23] et [24]. Au lieu de décomposer notre réseau en plusieurs graphes (algorithme à boucles multiples), nous allons donner la procédure pour construire une seule boucle. Pour simplifier, cet algorithme à boucle unique sera présenté dans le cas isotrope ($J = J_x$).

Nous allons décrire la construction de la boucle en termes de flot de la boucle (direction de continuation de la boucle). De manière générale, la boucle avance dans la direction de Trotter (le temps) si le spin actuel est up et descend s'il est down, à moins qu'elle ne saute sur un site voisin en gardant sa position dans la direction de Trotter : ce choix dépend de la configuration de la plaquette en interaction du spin considéré. Remarquons qu'un spin fait partie de deux plaquettes en interaction : pour rester cohérent avec le fait qu'on avance dans le temps si le spin est up, on considère, pour la suite, la plaquette où le spin se trouve sur la rangée du bas s'il est up et celle où il est sur la rangée du haut pour un spin down.

Pour une plaquette de type 1 (voir tableau II.2) où les quatre spins sont de même signe (nombre de worldlines nul ou égal à deux), la boucle avance dans le temps s'ils sont tous up ($S_i^\tau \to S_i^{\tau+1}$) ou recule s'ils sont tous down ($S_i^\tau \to S_i^{\tau-1}$) : on parle de continuation (dans le temps) forcée [24].

Pour une plaquette de type 2 où l'on trouve deux spins identiques sur chaque diagonale de la plaquette en interaction (worldline diagonale), la boucle est obligée de sauter au site voisin sur la même plaquette à temps constant ($S_i^\tau \to S_{i+1}^\tau$ ou S_{i-1}^τ selon le cas) : c'est la transition forcée.

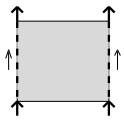
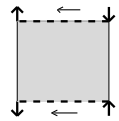
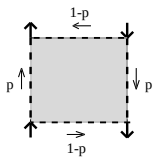
Enfin, pour le dernier type de plaquette avec deux spins identiques sur les côtés verticaux de la plaquette (une worldline verticale), on se trouve dans un régime de transition optionnelle. La boucle continue dans le temps avec une probabilité p (il avance ou il descend selon le signe du spin) ou alors saute au site voisin avec la probabilité complémentaire. Dans le cas de la chaîne de spins 1/2, cette probabilité s'exprime simplement par le rapport entre le poids d'une configuration de type 1 où tous les spins sont de même signe et celui d'une configuration 2 avec une seule worldline[5] : on obtient $p = \frac{2}{1+e^{\frac{\beta J}{m}}}$. Toutes ces variations de flot sont résumées dans le tableau II.4.

Pour les deux premiers types de plaquettes, les règles que nous venons de présenter assurent que le flot ne repassera pas par elles. Dans le cas de la transition optionnelle, cela est possible. Si la boucle repasse par une plaquette qu'elle a déjà visitée, on est forcé d'effectuer le même choix (continuation optionnelle ou transition optionnelle) que la fois précédente pour que l'algorithme reste cohérent.

Il suffit donc finalement de choisir un site initial aléatoirement et de lancer la boucle plaquette par plaquette jusqu'à ce qu'elle y revienne (c'est obligatoire par construction). De la même façon, un site ne peut être visité deux fois par la boucle. Il ne reste plus alors qu'à retourner tous les spins appartenant à la boucle fermée ainsi tracée avec une probabilité $p_f = 1$. Le bilan détaillé est assuré avec ces règles de construction.

L'algorithme de boucle ainsi décrit est très efficace et apporte une solution drastique au ralentissement critique. Le dernier problème majeur qui subsiste est celui de la limite de Trotter. En général, on effectue plusieurs simulations pour différentes valeurs du paramètre de Trotter m, puis on extrapole à la limite $m \to \infty$. Cela se

5. On le voit tout simplement avec le raisonnement suivant de changements locaux : si la boucle continue dans le temps, cela veut dire que quand la boucle sera renversée, on passera d'une configuration 2 à une configuration 1. Dans l'algorithme avec changements locaux, la probabilité d'un tel renversement est bien égale au rapport cité.

Plaquette et flot correspondant	Nom
	Continuation forcée
	Transition forcée
	Transition optionnelle

TAB. II.4 – *Plaquettes et flots correspondants figurés par les flèches minces. On obtient par symétrie entre les spins up et down les plaquettes non représentées en se rappelant que la continuation pour un spin down correspond à un recul dans le temps.*

révèle assez long, d'autant plus que techniquement la mémoire utilisée pour stocker les configurations de spins grandit avec m, ce qui ne permet pas d'utiliser des valeurs de m trop élevées.

4 Algorithme de boucle en temps continu

Nous allons décrire ici la formulation en temps continu de l'algorithme de boucle. Dans le problème qui nous intéresse, on remarque qu'à haute température, les worldlines sont constituées par un grand nombre de plaquettes de continuation forcée dans le temps. Sporadiquement, une worldline saute d'un site vers son voisin (plaquette de transition forcée ou optionnelle). L'idée est de ne s'intéresser et de ne garder en mémoire que ces temps de transition et l'endroit (le site voisin) où "saute" la worldline. Le reste du temps, la worldline est considérée comme droite (voir figure II.6). Cela revient à considérer une discrétisation de plus en plus fine où la hauteur des plaquettes dans le temps devient de plus en plus petite (limite de Trotter $m \to \infty$).

Les intérêts de cette construction en temps continu des worldlines sont nombreux. Le principal bien sûr est de s'affranchir complètement de l'erreur systématique de Trotter puisque nous travaillons directement dans la limite $m \to \infty$. Comme il est remarqué dans la référence [23], dans le cas d'extrapolation vers la limite thermodynamique, on évite de prendre les limites $m \to \infty$ et $N \to \infty$ dans le mauvais ordre. De plus, les estimateurs améliorés (voir discussion dans la section 5.3) pour les observables physiques qui existaient dans la formulation discrète se retrouvent dans la formulation en temps continu. Finalement, d'un point de vue technique, l'algorithme de boucle en temps continu est beaucoup moins gourmand en mémoire puisqu'on ne conserve que les temps de transition (ainsi que l'état initial du spin) au lieu d'une configuration entière de spins.

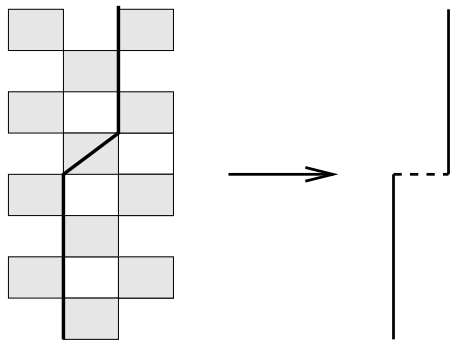


FIG. II.6 – *Discrétisation infinie du réseau : en temps continu, on ne tient compte que des temps de transition.*

4.1 Passage à la limite continue

La construction de la boucle en temps continu est en fait très similaire à celle utilisée en temps discret.

Nous avions vu que pour les plaquettes de type 1 où les quatre spins étaient identiques, la boucle devait continuer dans le sens où elle se déplaçait, c'est-à-dire dans la direction du temps positif (respectivement négatif) si les spins étaient up (resp. down)). Cette situation se retrouve dans le cas continu correspondant à plusieurs plaquettes de type 1 à la suite : la boucle continue dans le temps si les deux worldlines sont de même signe (spins voisins dans le même état).

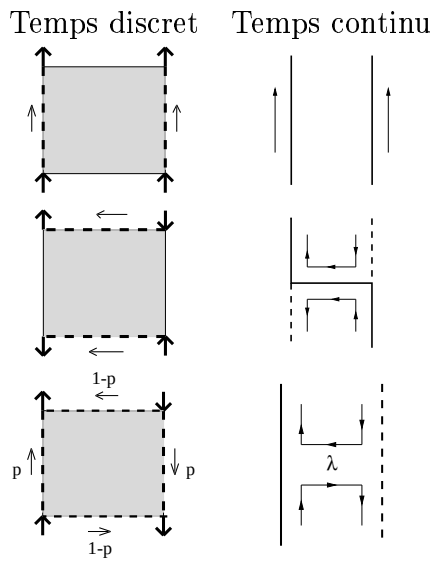
Pour les plaquettes de transition forcée (type 2) où l'on avait une worldline qui sautait d'un site à un autre, la boucle était obligée de sauter sur le spin voisin correspondant. La situation est la même dans le temps continu : à l'instant discret où il existe une discontinuité de worldline, la boucle doit sauter sur le spin voisin et continuer son chemin sur ce nouveau site dans la direction opposée.

Enfin, dans le dernier cas de la plaquette 3 où les deux spins d'un côté de signe sont de signe opposé à ceux de l'autre côté, la boucle avait le choix de continuer avec une probabilité p dans la direction du temps ou de sauter avec une probabilité $1-p$ sur le site voisin. En temps continu, on a deux worldlines d'état opposé côte à côte et la boucle va sauter sur le site voisin avec une *probabilité constante par unité de temps*. La distribution des temps de saut devient alors une distribution exponentielle. La constante de temps de saut (constante de *decay*) correspondante vaut

$$\lambda = \lim_{m\to\infty} \frac{1-p}{\Delta\tau} = \frac{J}{2},$$

où $\Delta\tau = \frac{\beta}{m}$ [6]. Finalement, la densité de probabilité des temps de saut s'écrit $P(\tau) = \frac{J}{2}e^{-\frac{J}{2}\tau}$. Le temps de saut moyen est égal à $\frac{1}{\lambda} = \frac{2}{J}$. Très souvent, les temps imaginaires sont comptés en unités de β (le réseau dans le temps imaginaire s'étend de 0 à 1) et la constante de saut (homogène à l'inverse d'un temps) sera prise égale à $\lambda = \frac{J}{2\beta}$.

6. Normalement, $\Delta\tau = \frac{\beta}{2m}$ mais il y a, pour un voisin donné, une seule plaquette en interaction sur deux de taille $\frac{\beta}{2m}$.



TAB. II.5 – *Plaquettes et flots correspondants dans le cas discret et dans le cas continu. Dans le cas continu, le trait plein (respectivement discontinu) correspond à un spin up (resp. down). Les flèches représentent le sens des boucles rencontrant ce motif.*

Nous avions vu que la boucle ne pouvait repasser par des endroits déjà visités, c'est encore le cas dans la version continue : il y aura possibilité (dans le cas antiferromagnétique) de sauter sur un spin voisin uniquement s'il est dans un état différent *et* s'il n'a pas déjà été visité par la boucle à cet instant donné.

Inspiré par les références [23, 24], nous résumons de manière graphique dans le tableau II.5 ce que deviennent les variations de la boucle en temps continu.

4.2 Description de l'algorithme

Nous allons de nouveau nous baser sur les travaux et le vocabulaire de Beard et Wiese [23, 24] pour décrire simplement comment se construit une boucle unique en temps continu. Partant d'un site initial à un temps initial t donné, on regarde tout d'abord l'état de tous ses spins voisins. Dans le cas d'un couplage antiferromagnétique, un spin voisin est accessible à l'instant t s'il est dans un état différent *et* si la boucle n'est pas déjà passée par lui à cet instant. Pour chaque spin accessible, un temps de transition (*decay time*) est calculé selon la distribution exponentielle précitée. Parmi tous ces temps de transition, n'est gardé en mémoire que le plus petit et le spin voisin correspondant. Puis, pour chaque spin voisin (accessible ou non), on regarde quel est dans la configuration actuelle le prochain temps de transition dans le sens de la boucle : il s'agit du temps de passage (*waypoint*) réseau. Se rappelant que la boucle ne peut repasser au même endroit, on regarde aussi pour chaque spin voisin quel est le temps le plus proche où la boucle est déjà passée : c'est le temps de passage boucle. On sélectionne parmi tous ces temps uniquement le plus proche (et le spin correspondant). Enfin, on regarde le prochain temps de changement sur le spin actuel : il s'agit de l'*horizon*. Il peut aussi s'agir d'un horizon réseau (dans la

configuration actuelle, il y a une transition sur ce site) ou d'un horizon boucle (la boucle est déjà passée par ce spin).

Muni de ces trois temps, le plus petit des trois va déterminer l'action à effectuer. Si le plus court est le temps de transition, on crée alors une transition vers le site correspondant à ce temps donné : la boucle saute vers le site voisin à cet instant et repart dans la direction opposée (puisque le site voisin est forcément de signe opposé dans le cas antiferromagnétique). On recommence alors la procédure (calcul des trois temps et choix de l'action) à partir de ce nouveau temps et de ce nouveau site.

Si le plus petit est le temps de passage, alors on recommence la procédure à partir du même site pour ce nouveau temps. En effet, à ce temps-ci, l'environnement du spin a changé (un voisin jusque là accessible est devenu non accessible ou inversement) et il est nécessaire de recalculer de nouveaux temps de passage et de transition.

Enfin, si le plus petit des trois est l'horizon, deux cas de figures se présentent : soit l'horizon et le temps de passage (réseau ou boucle) coïncident et il s'agit d'une transition forcée, soit l'horizon en question est tout simplement le temps de départ de la boucle et dans ce cas-là, la boucle se referme et l'algorithme est fini. S'il s'agit d'une transition forcée, il peut s'agir d'une transition forcée boucle (la boucle est déjà passée par là) ou d'une transition forcée réseau (il s'agit d'une transition qui existait déjà avant le commencement de la boucle). Dans les deux cas, il faut *effacer* cette transition, faire sauter la boucle sur le site voisin correspondant et la faire repartir dans le sens opposé en recommençant la procédure.

Ainsi, avec cet algorithme, on est assuré sans mauvais jeu de mot que la boucle est bouclée. Il ne reste plus qu'à stocker ses caractéristiques (taille, sites visités) et renverser tous les spins par lesquels elle est passée avec une probabilité $p_f = 1$.

Le comportement de la boucle avec la température est le suivant : à haute température, les temps de saut sont grands (le temps de saut moyen est $2T/J$) et on a essentiellement affaire à des boucles qui renversent entièrement une worldline (pas de transition). À basse température par contre, il y a beaucoup de transitions et la boucle est constituée de petits morceaux très courts sur de nombreux spins. Nous avons représenté sur la figure II.7 un exemple de boucle obtenue avec l'algorithme de boucle pour une chaîne antiferromagnétique de dix spins 1/2.

D'un point de vue technique, on implémente l'algorithme de boucle en temps continu avec des listes doublement chaînées (ou des arbres) de pointeurs sur chaque site. Chaque pointeur contient un temps de transition, et pointe vers les temps de transition suivant et précédent ainsi que sur le pointeur du site voisin qui a le même temps de transition que lui. L'état d'un spin à un instant t est simplement donné par l'état à l'instant initial et la parité du nombre de pointeurs ayant des temps de transition inférieurs à t sur le site considéré. L'avantage de l'algorithme de boucle en temps continu est qu'on a besoin de peu de mémoire en général pour tous les pointeurs au contraire de la version en temps discret qui nécessite de garder trace de tous les spins. À noter que si la température est très faible, le nombre de pointeurs croît rapidement (puisque les temps de transition diminuent avec T) et la mémoire nécessaire augmente.

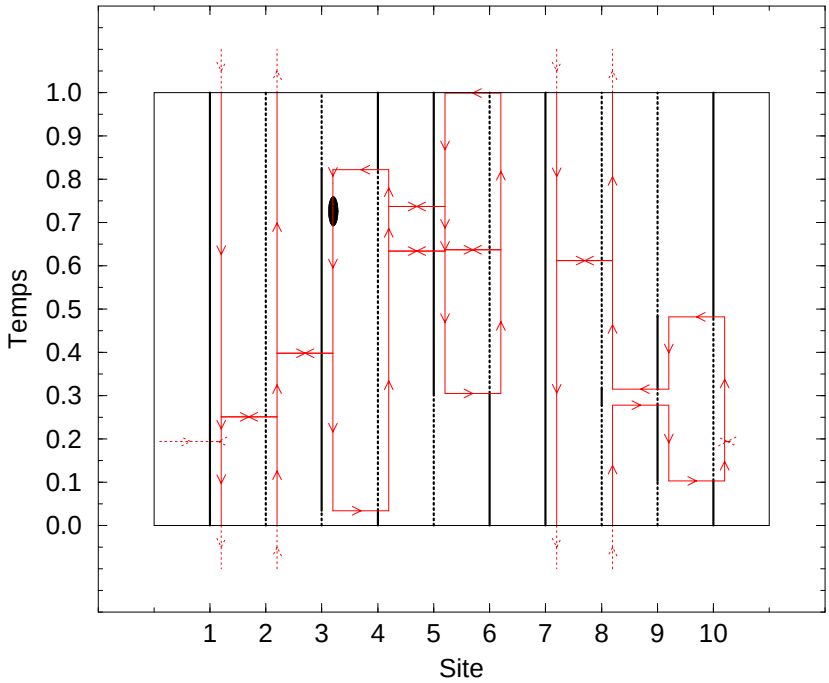


FIG. II.7 – *Exemple d'une boucle en temps continu calculée pour une chaîne antiferromagnétique de 10 spins. Les traits pleins (respectivement en pointillés) correspondent à un état up (respectivement down) et donnent la configuration* avant *que la boucle ne soit retournée. La boucle est elle representée à côté avec pour point de départ le point noir.*

5 Valeurs moyennes d'observables, estimateurs améliorés

Nous avons jusque-là énoncé les règles de construction de l'algorithme de boucle. Le but de la simulation restant tout de même de calculer des quantités physiques, nous discutons ici des manières de mesurer les différentes observables intéressantes. Il faut pour cela repasser par la décomposition de Trotter-Suzuki et la description en temps discret de ces différentes valeurs moyennes d'observables pour pouvoir effectuer correctement la limite en temps continu. Nous allons énoncer le principe dans le cas de l'énergie, puis généraliserons dans le cas d'autres observables. Une grande partie de cette section sera aussi consacrée aux estimateurs améliorés qui, comme dans le cas classique, se servent des propriétés de la boucle pour calculer ces différentes valeurs moyennes.

5.1 Exemple de l'énergie

Nous avons calculé la matrice de représentation de la fonction de partition (15). Intéressons-nous maintenant à celle de l'énergie moyenne $E = \langle H \rangle = \frac{\mathrm{Tr} H e^{-\beta H}}{Z}$ dans le cas du hamiltonien de Heisenberg antiferromagnétique. Dans la décomposition de Trotter-Suzuki de la fonction de partition, on obtient plusieurs types de plaquettes possédant chacune un poids thermodynamique P_m (une contribution à la fonction de partition Z_m) que nous avions listés dans le tableau II.2. On peut définir une énergie effective $E_m^{\mathrm{eff}} = -\frac{1}{\beta}\ln(P_m)$ pour chaque type de plaquette. Il est important de noter que ces énergies effectives listées dans le tableau II.6 dépendent de la température et donc la valeur thermodynamique moyenne de l'énergie n'est pas simplement la moyenne de ces énergies effectives [36]. En effet,

$$\langle E_m \rangle = -\frac{1}{Z_m}\frac{\partial Z_m}{\partial \beta} = \frac{1}{Z_m}\sum F_m e^{-\beta E_m^{\mathrm{eff}}} = \langle F_m \rangle \tag{16}$$

où $F_m = \frac{\partial}{\partial \beta}(\beta E_m^{\mathrm{eff}}) \neq E_m^{\mathrm{eff}}$ et par conséquent la moyenne thermodynamique (moyenne arithmétique Monte Carlo sur les configurations) s'effectue sur les quantités F_m données dans le tableau II.6 que l'on appellera dorénavant énergies. La "matrice énergie" s'écrit donc, en conservant la même base que pour la matrice (15) :

$$\begin{pmatrix} -\frac{J}{4m} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{J}{4m} - \frac{J}{2m}\tanh(\frac{\beta J_x}{2m}) & \frac{J}{4m} - \frac{J}{2m}\coth(\frac{\beta J_x}{2m}) & 0 \\ 0 & \frac{J}{4m} - \frac{J}{2m}\coth(\frac{\beta J_x}{2m}) & \frac{J}{4m} - \frac{J}{2m}\tanh(\frac{\beta J_x}{2m}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{J}{4m} \end{pmatrix} \tag{17}$$

Ainsi, si l'on veut calculer l'énergie d'une configuration donnée, il suffit de sommer sur les différentes plaquettes qui la composent la valeur de l'énergie (donnée par cette matrice) de la plaquette. Ensuite, comme dans le cas classique, la valeur moyenne thermodynamique de l'énergie est simplement donnée par la moyenne des énergies des configurations rencontrées dans la simulation Monte Carlo. Cette manière d'opérer est la même dans tous les cas, que l'on se serve de mouvements locaux ou de l'algorithme de boucle pour faire évoluer les configurations. Dans le cas discret, il faut effectuer la simulation pour différentes valeurs de m puis extrapoler vers $m \to \infty$. Généralement, dans le cas d'observables qui commutent avec H, on montre que la loi d'extrapolation est en $\frac{1}{m^2}$.

Comment calculer l'énergie dans le cas du temps continu ? Il suffit de calculer les différentes énergies des plaquettes dans la limite $m \to \infty$. Dans la description en temps continu, on a une discrétisation infinie des plaquettes, ce qui se traduit par des worldlines sur un spin sautant de temps à autre sur un spin voisin. Considérons cas par cas ce que deviennent les énergies de chaque plaquette.

Pour deux spins voisins étant dans le même état entre le temps t_1 et le temps t_2, nous avons affaire uniquement à des plaquettes de type 1. L'énergie d'un tel motif est toujours la somme des énergies de ces plaquettes : la hauteur d'une plaquette étant $d\tau = \frac{\beta}{m}$, il y a $(t_2 - t_1).\frac{m}{\beta}$ plaquettes[7]. Ceci correspond tout simplement à une

7. Pour être plus précis, la hauteur d'une plaquette est $\frac{2\beta}{m}$. Mais puisque il n'y a qu'une plaquette

intégration dans le temps continu :

$$E_1 = \int_{t_1}^{t_2} (-\frac{J}{4\beta}) d\tau = -\frac{J}{4\beta}(t_2 - t_1). \tag{18}$$

Considérons maintenant le cas où les deux spins voisins sont dans des états différents entre t_1 et t_2 : ici n'interviennent que des plaquettes de type 2. L'énergie de ces plaquettes devient au second ordre $\frac{J}{4m} - \frac{J^2\beta}{4m^2}$ dans la limite $m \to \infty$ et on s'aperçoit que, multiplié par le nombre de plaquettes $(t_2 - t_1).\frac{m}{\beta}$, le second terme s'annule dans la limite de Trotter et ne va plus contribuer à l'énergie. On se retrouve avec simplement une intégration sur le premier terme :

$$E_2 = \int_{t_1}^{t_2} \frac{J}{4\beta} d\tau = \frac{J}{4\beta}(t_2 - t_1). \tag{19}$$

Finalement, il reste le cas de la transition où une worldline saute sur un site voisin (plaquette 3) : dans le temps continu, ceci se produit à une valeur *discrète* du temps. L'énergie de cette plaquette devient dans la limite de Trotter $\frac{J}{4m} - \frac{J_x}{\beta}$. Cette fois-ci, il n'y a qu'*une* seule plaquette et il n'y a plus d'intégration sur le temps continu : le premier terme s'annule dans la limite $m \to \infty$. Finalement, l'énergie d'une telle transition vaut donc :

$$E_3 = -\frac{J_x}{\beta}. \tag{20}$$

En résumé, pour calculer l'énergie d'une configuration en temps continu, il suffit d'intégrer sur le temps continu les spins voisins en comptant $\pm\frac{J}{4\beta}$ (le signe + (respectivement −) pour des spins dans des états identiques (resp. différents)), puis de compter de façon discrète les transitions forcées et multiplier leur nombre par $-\frac{J_x}{\beta}$. Pour obtenir la valeur moyenne de l'énergie, il suffit finalement de moyenner sur les différentes configurations obtenues lors des simulations selon la formule (3).

Remarquons que dans le cas isotrope, nous avons une façon plus simple de calculer l'énergie. Puisque $\langle S_i^x S_j^x \rangle = \langle S_i^y S_j^y \rangle = \langle S_i^z S_j^z \rangle$, nous obtenons très simplement $E = -\frac{3}{2\beta}\langle n \rangle$ où $\langle n \rangle$ est le nombre moyen de transitions.

	E_m^{eff}	F_m	G_m
Plaquette 1	$-\frac{J}{4m}$	$-\frac{J}{4m}$	0
Plaquette 2	$\frac{J}{4m} - \frac{1}{\beta}\ln(\cosh(\frac{\beta J}{2m}))$	$\frac{J}{4m} - \frac{J}{2m}\tanh(\frac{\beta J_x}{2m})$	$-\frac{J^2}{4m^2\cosh^2(\frac{\beta J_x}{2m})}$
Plaquette 3	$\frac{J}{4m} - \frac{1}{\beta}\ln(\sinh(\frac{\beta J}{2m}))$	$\frac{J}{4m} - \frac{J}{2m}\coth(\frac{\beta J}{2m})$	$\frac{J^2}{4m^2\sinh^2(\frac{\beta J}{2m})}$

TAB. II.6 – *Les différentes quantités nécessaires au calcul de l'énergie et de la chaleur spécifique.*

en interaction (plaquette grisée) sur deux, il y a donc effectivement $(t_2 - t_1).\frac{m}{\beta}$ plaquettes en interaction entre t_1 et t_2.

5.2 Autres observables

On applique la technique évoquée plus haut pour l'énergie pour calculer les valeurs moyennes d'autres observables : chaleur spécifique, aimantation, susceptibilité...

a) Chaleur spécifique

Le fait que les interactions entre les spins d'Ising dépendent de la température se ressent particulièrement dans le calcul de la chaleur spécifique magnétique. On a de façon générale :

$$\langle C_m \rangle = \beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z_m}{\partial \beta^2} = \frac{\beta^2}{Z_m} \frac{\partial^2 Z_m}{\partial \beta^2} - \beta^2 (\frac{1}{Z_m} \frac{\partial Z_m}{\partial \beta})^2 = \beta^2 \left(\langle F_m^2 \rangle - \langle F_m \rangle^2 - \langle G_m \rangle \right) \quad (21)$$

où $G_m = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2}(\beta E_m^{\mathrm{e}ff})$ est la correction donnée dans le tableau II.6 à la chaleur spécifique "classique" $\beta^2 \left(\langle F_m^2 \rangle - \langle F_m \rangle^2 \right)$.

Que deviennent ces valeurs dans la limite de Trotter ? Nous avons déjà calculé les limites des différentes plaquettes d'énergie. Il ne nous reste qu'à calculer la limite de G_m pour les différentes plaquettes. On montre facilement que seules les transitions (plaquette de type 3) ont une contribution non nulle dans la limite de Trotter qui vaut $\frac{1}{\beta^2}$ pour chaque transition. Il suffit donc de calculer pour chaque configuration l'énergie (comme indiqué dans le paragraphe précédent), son carré et le nombre de transitions multiplié par le facteur $\frac{1}{\beta^2}$ pour connaître la contribution de cette configuration à la valeur moyenne de la chaleur spécifique.

b) Aimantation

Si l'on veut calculer l'aimantation sur site du spin i par exemple, on montre qu'il suffit simplement d'intégrer sur le temps continu l'état du spin $S_i^z = \int_0^1 s_i^z(\tau) d\tau$ où $s_i^z(\tau) = \pm 1/2$ si le spin i est up ou down à l'instant τ (les transitions n'interviennent pas ici) [8]. Si l'on souhaite mesurer l'aimantation totale, il faut se rappeler que c'est une quantité conservée pour chaque tranche de temps, et donc $M = \sum_i s_i^z(\tau = 0)$. On ne se sert que de l'état initial du spin.

L'aimantation alternée n'étant pas quant à elle une quantité conservée, il faut revenir à l'intégration sur le temps continu : $M_{\mathrm{alt.}} = \sum_i \sigma_i \int_0^1 s_i^z(\tau).d\tau$ où $\sigma_i = \pm 1$ est le facteur alterné au site i.

c) Susceptibilité

On montre très simplement que la susceptibilité s'obtient en calculant le carré de l'aimantation totale :

$$\chi = \frac{\beta}{N} \left\langle \left[\sum_{i=1}^{N} s_i^z(\tau = 0) \right]^2 \right\rangle . \quad (22)$$

8. Pour plus de simplicité, on compte le temps imaginaire en unités de β (la borne supérieure de l'intégrale est 1).

On calcule de la même manière la susceptibilité alternée. Jusqu'ici, nous avions calculé les valeurs d'observables sur une configuration de spins donnée, indépendamment de la méthode choisie pour passer d'une configuration à une autre. Nous allons voir que nous pouvons nous passer de ces calculs à l'aide d'estimateurs améliorés qui sont obtenus d'après les caractéristiques internes des boucles de l'algorithme.

5.3 Estimateurs améliorés

Comme nous l'avions rapidement évoqué dans le cas classique, il est possible de se servir des propriétés des boucles que nous construisons pour construire des estimateurs améliorés des valeurs moyennes d'observables.

a) Boucles multiples *vs* boucle unique

Il existe une petite différence dans le calcul d'estimateurs améliorés entre les versions de l'algorithme à boucles multiples (*multi-cluster algorithm*) et à boucle unique (*single cluster algorithm*).

Dans la version à boucles multiples, on construit plusieurs boucles recouvrant tout le réseau, puis on essaie de retourner chacune d'entre elles avec une probabilité 1/2 . La contribution d'une configuration à l'estimateur amélioré de l'observable $\mathcal{O}$ est donnée par sa valeur sur chacune de ces boucles

$$\mathcal{O}_{\text{multiple}} = \frac{1}{2^{N_b}} \sum_{\text{boucles b}} \mathcal{O}_b \tag{23}$$

où N_b est le nombre de boucles.

Dans la version à boucle unique, comme le remarque la référence [20], une boucle est choisie proportionnellement à sa taille et il faut donc pondérer par la taille c de cette boucle dans le calcul de l'estimateur amélioré :

$$\mathcal{O}_{\text{unique}} = \frac{\mathcal{O}_c}{c} \tag{24}$$

où $\mathcal{O}_c$ est la valeur de l'observable dans la boucle unique.

Comment calculer la taille de la boucle? Si une boucle est constituée de tous les spins (de toutes les worldlines) alors elle aura pour taille $c = N_s$ où N_s est le nombre total de spins. Les autres tailles de boucles se déduisent par le même raisonnement : il faut sommer la taille en temps imaginaire (en unités de β) de chaque segment occupé par la boucle.

b) Susceptibilités

Comme nous venons de le voir, la susceptibilité uniforme est donnée par le carré de l'aimantation totale. La boucle construite va dans la direction positive (respectivement négative) du temps lorsque l'état du spin est up (resp. down). Puisque toute boucle se ferme, il n'y aura aucun changement d'aimantation de la configuration lorsque nous allons retourner cette boucle *sauf* si cette boucle est passée par les conditions au bord périodiques dans le temps imaginaire : c'est ici que le nombre

d'enroulement[9] (*winding number* n_w) de la boucle va intervenir. Ce nombre peut être simplement vu comme le nombre algébrique de fois où la boucle utilise les conditions périodiques dans le temps imaginaire. On augmente ce nombre de l'unité si la boucle passe dans le sens $t = \beta \to t = 0$ et on le diminue de la même quantité dans le cas du sens $t = 0 \to t = \beta$. Le changement d'aimantation dû à la boucle va correspondre au nombre d'enroulement n_w[10] de celle-ci et finalement l'estimateur pour la susceptibilité uniforme dans la version à boucle unique s'écrit :

$$\chi = \frac{\beta}{4}\langle\frac{n_w^2}{c}\rangle. \tag{25}$$

Le calcul d'un estimateur amélioré pour la susceptibilité alternée est encore plus simple lorsqu'on remarque [23] que la boucle saute sur un spin voisin qui est toujours de facteur alterné opposé à celui du spin où la boucle se trouve : l'aimantation alternée est donc égale à la taille de la boucle (au facteur 2 près). Par conséquence, la susceptibilité alternée s'écrit :

$$\chi_{\text{alt.}} = \frac{\beta}{4}\langle\frac{c^2}{c}\rangle = \frac{\beta}{4}\langle c\rangle. \tag{26}$$

Considérons maintenant le cas de la susceptibilité généralisée que l'on peut définir comme la transformée de Fourier espace-temps de la fonction de corrélation :

$$\chi(q,\omega) = \frac{\beta}{N}\sum_{i,j}^{N}\int_0^1 dt\int_0^1 dt' s_i^z(t)s_j^z(t')e^{-i(q(r_j-r_i)+\omega(t-t'))}. \tag{27}$$

On retrouve la susceptibilité uniforme comme $\chi = \chi(0,0)$ et la susceptibilité alternée $\chi_{\text{alt.}} = \chi(\pi,0)$. On montre par les mêmes raisonnements que précédemment [37] que l'estimateur amélioré de la susceptibilité généralisée est tout à fait identique aux estimateurs précédents si l'on définit une taille de la boucle généralisée :

$$c(q,\omega) = \sum_i^N \int_0^1 dt e^{-i(qr_i-\omega t)} f(i,t). \tag{28}$$

Dans cette équation, $f(i,t)$ est simplement une fonction qui vaut 1 si la boucle est passée par le spin i à l'instant t et 0 sinon[11]. On voit ici que le nombre d'enroulement n_w de la boucle vaut $n_w = c(0,0)$ et que la taille c de la boucle vaut $c = c(\pi,0)$. Ainsi l'estimateur de la susceptibilité généralisé vaut pour un algorithme à boucle unique :

$$\chi(q,\omega) = \frac{\beta}{4}\left\langle\frac{|c(q,\omega)|^2}{c}\right\rangle. \tag{29}$$

9. Sans rentrer dans les détails, cette dénomination provient de l'analogie avec les intégrales de chemin.

10. divisé par deux pour des spins 1/2.

11. Encore une fois, nous comptons tous les temps en unités de β.

c) Longueur de corrélation

Comment estimer la longueur de corrélation ξ ? Par sa définition même, la première méthode qui vient à l'esprit est de calculer la fonction de corrélation $G(r)$ et d'extraire la longueur de corrélation de sa dépendance en r. Dans un système de taille finie L avec des conditions aux bords périodiques, la dépendance en ξ de la fonction de corrélation n'est plus exponentielle mais en cosinus hyperbolique. Cette méthode est valable mais il apparaît parfois quelques problèmes dus aux paramètres d'estimation dans cette procédure (voir une discussion dans la référence [23]).

Nous allons de nouveau pouvoir utiliser les estimateurs améliorés pour calculer d'une autre manière la longueur de corrélation par la méthode du second moment. En supposant une dépendance exponentielle de $G(r)$, on montre facilement [38] que la longueur de corrélation peut s'écrire en fonction des susceptibilités généralisées :

$$\xi = \frac{L}{2\pi}\sqrt{\frac{\chi(\pi,0)}{\chi(\pi+\frac{2\pi}{L},0)} - 1} \tag{30}$$

avec L la taille du système[12]. Nous pouvons donc obtenir un estimateur amélioré pour la longueur de corrélation en utilisant les estimateurs améliorés de la susceptibilité généralisée.

De la même manière, on peut calculer la longueur de corrélation dans le temps imaginaire comme

$$\xi_\tau = \frac{\beta}{2\pi}\sqrt{\frac{\chi(\pi,0)}{\chi(\pi,\frac{2\pi}{\beta})} - 1}, \tag{31}$$

qui sera utile dans la limite thermodynamique à basse température pour connaître le gap du système étudié [22].

Notons que l'on peut construire des estimateurs plus précis (de quatrième moment, etc.) à ces longueurs de corrélation [22].

d) Autres observables

Il est possible de construire des estimateurs améliorés pour un grand nombre d'observables. Nous n'avons jusque-là que citer les observables les plus usuelles. Notons que l'énergie moyenne ne possède pas à notre connaissance d'estimateur amélioré simple (voir une discussion dans la référence [23]).

Le dernier point important à noter au sujet des estimateurs améliorés est qu'ils peuvent être utilisés pour réduire le problème de signe dans le cas de certains systèmes frustrés (voir section 6.5).

6 Généralisations, trucs et astuces

6.1 Dimension, signe et désordre des liens

Nous avons discuté de l'algorithme pour une chaîne de spins antiferromagnétique : l'algorithme de boucle jouit de la propriété remarquable qu'il reste inchangé

12. Cette définition correspond bien sûr à un système antiferromagnétique (on calcule $\chi(q=\pi)$).

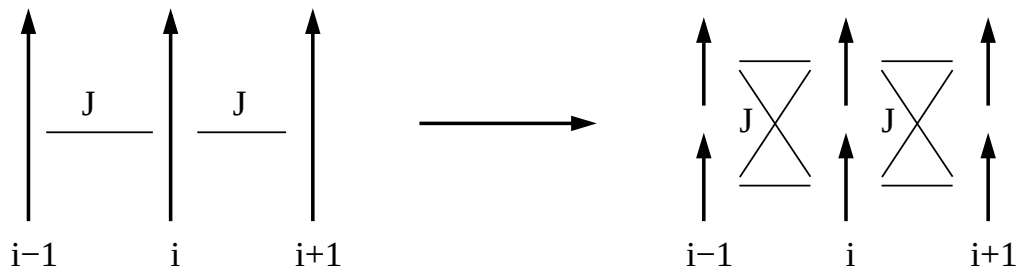


FIG. II.8 – *Décomposition d'un système de spins 1 en un système de spins* 1/2. *L'échange entre les spins* 1/2 *est le même que celui entre les spins 1.*

quelle que soit la dimensionnalité du réseau de spins considéré et quels que soient le signe et la valeur des liens tant qu'il n'existe pas de frustration dans le système.

Ainsi, si l'on souhaite traiter de systèmes autres qu'unidimensionnels, il suffit simplement de changer la coordinance (le nombre de voisins) de chaque spin, de même si l'on considère des couplages plus longs (par exemple seconds voisins) tant qu'ils ne sont pas frustrants. Si la valeur des liens dépend du site ($J \to J_i$), il suffit de changer lors du calcul des temps de transition la constante de saut ($\lambda \to \lambda_i$).

Si un lien est ferromagnétique ($J < 0$), il suffit de considérer comme constante de saut $\lambda = \frac{|J|}{2T}$. Par contre, il faut maintenant choisir comme voisin accessible un voisin étant *dans le même état (up ou down)* que le spin considéré. Puisque le sens de la boucle est dicté par l'état du spin, la boucle dans le cas d'un lien ferromagnétique repart après une transition *dans le même sens*. Exceptées ces deux considérations, l'algorithme reste exactement le même.

6.2 Valeur du spin

Nous avons jusqu'ici présenté l'algorithme de boucle pour des spins 1/2. Comment simuler des spins S plus grands ?

Diverses approches ont été proposées depuis quelques années. En premier lieu, Kawashima et Gubernatis [39, 40] proposèrent de reconstruire complètement un algorithme de boucle pour des spins 1, réeffectuant la décomposition de Trotter puis énumérant les différents plaquettes et découpages possibles. Cet algorithme est tout à fait valide, mais sa complexité (105 graphes différents) et le fait que la limite de Trotter soit mal définie le rendent difficile à employer.

Une autre solution assez souvent utilisée pour simuler des spins 1 est de considérer deux spins 1/2 que l'on force dans l'état triplet en les couplant ferromagnétiquement. Cette façon de procéder n'est valide que dans la limite d'un couplage ferromagnétique infini (ou au moins largement supérieur à tout autre couplage). Nous jugeons cette méthode peu pratique car si le couplage ferromagnétique est très fort, l'algorithme va être très lent. Par ailleurs, il est difficile de contrôler l'erreur que l'on effectue en utilisant une valeur finie du couplage ferromagnétique.

Plus récemment, la solution à ce problème à été apportée par Todo et Kato [22]. L'idée est de remplacer chaque spin S par $2S$ spins 1/2 et de symétriser leurs états en

introduisant des graphes supplémentaires reliant ces spins 1/2 effectifs uniquement pour les conditions aux bords périodiques dans le temps. Cet algorithme se situe directement dans la limite du temps continu. Explicitons-le dans le cas de spins 1. Chaque spin 1 $\mathbf{S}_i$ est vu comme deux spins 1/2 $\mathbf{s}_i^a$ et $\mathbf{s}_i^b$ que nous appellerons spins frères. Le hamiltonien effectif d'une chaîne de spins 1, par exemple, s'écrit :

$$H = J\sum_i (\mathbf{s}_i^a + \mathbf{s}_i^b).(\mathbf{s}_{i+1}^a + \mathbf{s}_{i+1}^b) = J\sum_i \mathbf{s}_i^a.\mathbf{s}_{i+1}^a + \mathbf{s}_i^a.\mathbf{s}_{i+1}^b + \mathbf{s}_i^b.\mathbf{s}_{i+1}^b + \mathbf{s}_i^b s_{i+1}^a, \quad (32)$$

et est représenté sur la figure II.8. Chaque spin 1/2 est relié par un couplage Heisenberg aux spins 1/2 qui constituent les spins 1 voisins. Notons que les deux spins frères ne sont pas couplés. Pour enlever les états non physiques (de type singulet pour les deux frères), on considère un opérateur de projection P. Sans rentrer dans les détails, il est montré dans la référence [22] que l'on peut faire correspondre des graphes à cet opérateur de projection, et que ces graphes supplémentaires n'agissent que sur les plaquettes reliant les conditions aux bords périodiques dans le temps imaginaire.

Dans la pratique, comment marche l'algorithme ? Restons dans le cas de spins 1 : on considère le système de spins 1/2 décrit par le hamiltonien précédent, et on construit avec les mêmes règles énoncées auparavant une boucle. Lorsque la boucle passe par les conditions aux bords périodiques ($t = 0$ ou $t = \beta$), il faut effectuer une opération de symétrisation pour les deux spins frères du site considéré : la boucle va continuer son chemin de l'autre côté des conditions aux bords dans le temps dans la même direction, soit en continuant sur le spin où elle se trouve actuellement si cela est possible, soit en sautant sur son frère si son état le permet. Dans le cas où la boucle a le choix (continuation sur le même spin ou sur son frère), chaque mouvement est possible avec une probabilité identique.

Donnons un exemple illustré en figure II.9 : la boucle va dans la direction du temps positif (l'état du spin où elle se trouve est donc up) et arrive au temps $t = \beta^-$. Si l'état du spin frère de l'autre côté (en $t = 0^+$) n'est pas up, alors elle continue son chemin sur ce spin (partie gauche de la figure II.9). Si par contre le spin frère est up en $t = 0^+$, deux possibilités existent : soit l'état en $t = 0^+$ du spin où elle se trouve est lui aussi up, soit il est down. S'il est up, alors la boucle continue en $t = 0^+$ sur ce spin avec une probabilité 1/2 ou saute sur le spin frère (et y continue son chemin en $t = 0^+$) avec la même probabilité (partie centrale de la II.9). Si par contre l'état en $t = 0^+$ sur le spin où se trouve la boucle est down, cela signifie qu'il y a déjà eu symétrisation à cet endroit et la boucle est obligée de sauter sur le spin frère et de continuer son chemin (partie droite de la figure II.9). L'exemple que nous avons donné correspondait à un avancement de la boucle dans le temps des sens positifs et de la frontière $t = \beta^- \to t = 0^+$, on a bien sûr la même situation par symétrie pour une boucle se dirigeant dans le sens des temps négatifs arrivant sur la frontière $t = 0^+ \to t = \beta^-$.

En dehors de cette astuce de symétrisation, l'algorithme de boucle reste *inchangé* : la construction de la boucle, les estimateurs améliorés restent les mêmes.

Nous avons explicité le cas des spins 1; on généralise très facilement pour un

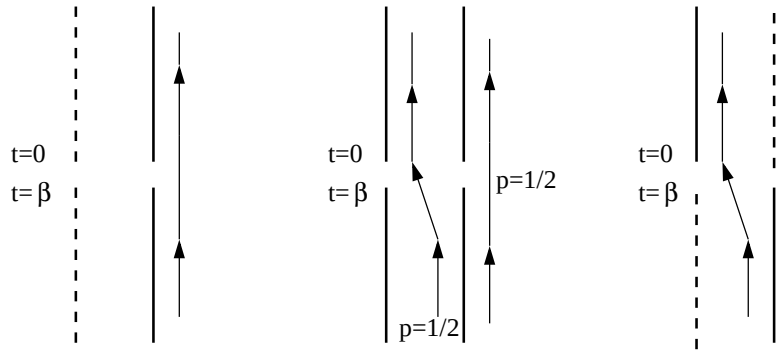


FIG. II.9 – *Les trois cas possibles de mouvement de la boucle aux conditions aux bords dans le temps imaginaire pour un système de spins 1. Dans les trois cas, la worldline de droite représente le spin* 1/2 *où se trouve la boucle à* $t = \beta^-$*, celle de gauche son frère. Les flèches représentent le mouvement possible de la boucle au niveau des conditions aux bords dans le temps.*

réseau de spins S quelconques[13]: chaque spin S est représenté par $2S$ spins frères couplés aux autres spins représentant les spins S voisins. Le processus de symétrisation est généralisé : la boucle peut sauter sur un des spins frères dans le même état avec une probabilité identique pour chaque spin frère accessible.

6.3 Champ magnétique

Comment traiter le cas d'un système soumis à un champ magnétique? Considérons pour l'instant un champ magnétique suivant la direction z.

La façon la plus simple est de ne pas tenir compte du champ magnétique lors de la construction de la boucle mais uniquement dans la probabilité de retournement de cette boucle. Dans le cas d'un algorithme à boucle unique, nous avions vu que tous les spins sur la boucle étaient retournés une fois celle-ci construite (probabilité de renversement $p_f = 1$). Avec un champ magnétique, cette probabilité est modifiée et devient $p_f = \frac{1}{1+\exp(\beta h n_w)}$ où n_w est le nombre d'enroulement de la boucle défini précédemment[14].

Cette méthode est très efficace lorsque le champ magnétique est faible. Lorsqu'il devient trop fort (typiquement $\beta h > 5$), la probabilité de renverser une boucle décroît exponentiellement avec le champ comme $p_f \sim e^{-\beta h}$ et devient vite négligeable. La simulation reste figée dans une même configuration métastable pendant un nombre important de pas Monte Carlo et le temps de corrélation augmente : on se retrouve dans une situation de ralentissement critique dû au champ magnétique.

Principalement deux méthodes ont été proposées pour résoudre ce problème. Syljuåsen [42] suggère de prendre en compte le champ magnétique directement dans le poids des plaquettes et des breakups associés de l'algorithme de boucle. Cette

13. Historiquement, l'algorithme pour des spins 1 avait été présenté pour la première fois dans la référence [41], mais ne contenait pas la généralisation à des spins S quelconques.

14. Si $h = 0$, on choisit plus simplement $p_f = 1$ au lieu de 1/2.

méthode se révèle rapidement valable lorsque le champ magnétique est très fort, mais semble nettement moins efficace à champs faible et intermédiaire.

Lorsqu'il est un peu plus faible (mais toujours dans le cas $\beta h > 5$), on peut utiliser l'astuce proposée dans la référence [43] d'imposer entre chaque pas Monte Carlo un essai de renversement d'une worldline "pure", c'est-à-dire sans transition. La probabilité de retourner une worldline pure[15] au site i s'écrit $p_f^w = \frac{1}{1+\exp(2\beta(E+hS^z))}$ où E est l'énergie de lien $JS_i^z S_j^z$ (calculée dans le temps imaginaire sur tous les voisins j du site i considéré) et S_z est le signe de la worldline en question. Cette méthode permet à moindre frais de se sortir d'une configuration métastable où le renversement de la boucle était peu probable.

Si l'on s'intéresse maintenant à des champs magnétiques transverses (suivant x par exemple), ces méthodes ne sont plus valables et il faut alors recourir à des solutions plus complexes (voir référence [14] pour une discussion).

6.4 Réseau infini

Dans un article récent [21], Evertz et Von der Linden ont proposé de se servir des propriétés de la boucle et des estimateurs améliorés pour calculer les observables *directement* dans la limite thermodynamique et/ou à température nulle. L'idée de base est très simple : on considère un algorithme de boucle unique commençant toujours au même site. On construit la boucle et dès que celle-ci s'approche des bords du réseau, on augmente la taille de celui-ci. Techniquement, on part d'un réseau de petite taille (quelques sites) qu'on agrandit dès que la boucle arrive sur un de ses côtés : pour cela, il faut utiliser des listes chaînées pour les sites du réseau. Au bout d'un moment, la boucle va finir par revenir au premier site et se refermer. Dans ce schéma, il n'y a plus de conditions aux bords : la boucle a parcouru une partie d'un réseau qu'elle considère infini (elle n'en a jamais vu les bords).

Pour mesurer des observables, on ne peut plus simplement calculer les valeurs des observables, puisque la taille du réseau varie à chaque fois. Il faut se servir des estimateurs améliorés sur la boucle pour calculer les observables intéressantes. Les observables sont calculées ainsi directement dans la limite thermodynamique. Il n'y a plus d'erreurs de taille finie : les seules erreurs restantes sont les erreurs statistiques que l'on peut réduire en effectuant un nombre de pas conséquent.

De même manière, Evertz et Von der Linden proposent d'effectuer les calculs dans la limite $\beta = \infty$ (réseau infini dans le temps imaginaire). Il n'y a plus de conditions aux bords périodiques dans le temps et les temps de transition sont tirés avec la constante $\lambda = \frac{2}{J}$, s'étalonnant maintenant entre $-\infty$ et $+\infty$ au lieu de l'intervalle $[0,\beta]$.

Cette méthode donne d'excellents résultats tant que les corrélations du système ne sont pas à trop longue portée. En effet, si ξ la longueur de corrélation (ou la longueur de corrélation dans le temps ξ_t dans le cas de la limite $\beta = \infty$) est trop grande, les boucles seront elles aussi très longues et il faudra un temps de calcul et une mémoire extrêmement importants pour pouvoir simuler un réseau infini. En pratique, on simule à la limite thermodynamique (respectivement à $T = 0$) des

15. C'est un mouvement très semblable à celui de ligne dans l'algorithme local.

systèmes présentant une longueur de corrélation (resp. dans le temps) finie. Il s'agit d'ailleurs d'une bonne manière de sonder l'ordre : si le temps de calcul est énorme avec la méthode de réseau infini, c'est qu'il y a de l'ordre dans le système !

6.5 Autres systèmes, problème de signe

Les algorithmes de boucle (en temps continu ou non) ne s'appliquent pas uniquement aux systèmes de spins purs. Des généralisations ont été effectuées sur ces algorithmes, principalement pour simuler le modèle de Hubbard [44] et le modèle $t-J$ [45, 46, 47]. Sans rentrer dans les détails de la construction et de l'efficacité de tels algorithmes, signalons simplement que ces simulations souffrent généralement du problème de signe mais qu'à basse dimension, à faible frustration ou à haute température, ces algorithmes se révèlent très efficaces.

Nous avions vu dans notre exemple de la chaîne antiferromagnétique que les termes hors diagonale de la fonction de partition étaient dans un premier temps négatifs. Nous avions utilisé une tranformation unitaire (qui revenait à retourner un spin sur deux) pour retrouver des termes positifs qui pouvaient alors être interprétés en tant que poids de Boltzmann. La raison fondamentale pour laquelle nous avions trouvé une tranformation unitaire est que le réseau était bipartite. Malheureusement, pour les réseaux non bipartites et tous les systèmes frustrés, on ne peut trouver une telle transformation : certains poids sont négatifs et la simulation souffre du célèbre problème de signe. Ce problème de signe se retrouve aussi dans les simulations de systèmes fermioniques. Notons que nous pouvons très bien utiliser une autre probabilité que le poids de Boltzmann (cf. équation (1)). Dans le cas d'un sytème présentant un problème de signe, il est possible d'utiliser $|P|$ en place de P comme probabilité de transition. Dans ce cas, la moyenne d'une observable s'écrira :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\langle \mathcal{O}\ \mathrm{sgn}(P) \rangle}{\langle \mathrm{sgn}(P) \rangle}. \tag{33}$$

Le problème majeur est que $\langle \mathrm{sgn}(P) \rangle \sim e^{-\beta V}$: il faut un temps qui croît exponentiellement avec β et V, le volume du système, pour atteindre une bonne précision. Cette manière de procéder est donc très rapidement limitée.

À l'heure actuelle, il n'existe aucune solution satisfaisante générale au problème de signe. C'est là le problème majeur de la méthode Monte Carlo Quantique. Il a été proposé pour les systèmes fermioniques [48] ainsi que pour certains systèmes de spins peu frustrés [45] une solution en termes de *mérons*. Ce type de solution reposent sur une utilisation intelligente et optimisée des estimateurs améliorés. Malheureusement, cela n'est pas généralisable à d'autres systèmes, et n'est efficace que dans une certaine gamme de paramètres.

Chapitre III

Développement en séries stochastique

La méthode de Monte Carlo Quantique baptisée Développement en séries stochastique (*Stochastic Series Expansion*)[1] que nous allons décrire dans ce chapitre a été inventée et développée par Anders Sandvik au cours des dix dernières années. Contrairement à l'algorithme de boucle principalement destiné au hamiltonien de Heisenberg, cette méthode basée sur le développement en puissances de β de la fonction de partition est *a priori* applicable *à tout type de hamiltonien sur réseau* tant que le problème de signe n'existe pas ou est faible. Par sa nature, il n'existe pas d'erreur de discrétisation ou de projection (de type erreur de Trotter). Tout d'abord constituée de mouvements locaux [15, 49, 50], une opération appelée *loop operator update* (mouvement de boucles d'opérateurs) [16, 51] effectue des mouvements non locaux dans l'espace des phases comme dans le cas de l'algorithme de boucle. Ces deux méthodes sont d'ailleurs très similaires dans le cas du hamiltonien de Heisenberg, mais nous verrons que la méthode SSE possède quelques avantages dans certains cas particuliers. Ce chapitre a pour but de présenter cette méthode mais ne saurait remplacer les travaux [15, 16, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55] desquels nous nous sommes largement inspirés (notamment les références [16, 51]). Nous allons dans un premier temps décrire les considérations générales de cette méthode, puis les mouvements permis dans l'espace des phases en insistant sur le loop operator update que nous expliciterons dans le cas du hamiltonien de Heisenberg. Nous expliquerons ensuite comment mesurer les observables (statiques et dynamiques), puis effectuerons une comparaison qualitative avec l'algorithme de boucle. Nous terminerons sur une application de la méthode SSE à l'étude de la transition à température finie du modèle de Heisenberg ferromagnétique en trois dimensions.

1 Préliminaires généraux

1.1 Développement de la fonction de partition

Considérons un hamiltonien H généralement constitué d'un nombre fini R de termes $H = -\sum_{i=1}^{R} H_i$ (le signe moins est sorti pour faciliter les expressions sui-

1. Par la suite, nous abrégerons volontiers le nom de cette méthode en SSE.

vantes).

Dans les simulations Monte Carlo Quantique, la fonction de partition $Z = \mathrm{Tr}e^{-\beta H}$ est la quantité de choix à échantillonner. Dans la méthode SSE, la fonction de partition est développée en puissances de β :

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \mathrm{Tr} H^n. \tag{1}$$

Les puissances du hamiltonien peuvent être écrites comme tous les produits possibles des R termes du hamiltonien, chaque produit contenant n termes étant repéré par une séquence S_n de n indices $i_1 \dots i_N$ pouvant prendre des valeurs $1 \leqslant i \leqslant R$. La fonction de partition s'écrit alors comme la somme sur n de toutes les séquences de taille n possibles [15] :

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{S_n} \frac{\beta^n}{n!} \mathrm{Tr} \prod_{p=1}^{n} H_{i_p}. \tag{2}$$

$\prod_{p=1}^{n} H_{i_p}$ est appelée la chaîne d'opérateurs (*operator string*) correspondant à la séquence S_n de taille n. Si la trace peut être évaluée analytiquement, la valeur moyenne statistique d'une observable peut être calculée en faisant un échantillonage Monte Carlo dans l'espace des séquences. C'est le cas pour un hamiltonien de Heisenberg de spins 1/2, et nous avons alors affaire à la méthode de Handscomb [56].

La méthode SSE est plus générale et propose d'insérer une base complète de l'espace de Hilbert $|\alpha\rangle$ pour évaluer la trace [15, 49] :

$$Z = \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{S_n} \frac{\beta^n}{n!} \langle\alpha| \prod_{p=1}^{n} H_{i_p} |\alpha\rangle . \tag{3}$$

Une configuration Monte Carlo pour une valeur de n donnée est alors constituée par une valeur de α et une séquence S_n. Le poids de cette configuration vaut $W(\alpha,S_n) = \frac{\beta^n}{n!} \langle\alpha| \prod_{p=1}^{n} H_{i_p} |\alpha\rangle$ où le produit des opérateurs H_{i_p} est pris dans l'ordre de la séquence S_n. Pour effectuer une évaluation stochastique de la fonction de partition, tous les poids doivent être positifs : nous considérerons que c'est le cas dans un premier temps pour continuer la discussion, mais nous reviendrons plus tard sur ce problème de signe éventuel. À ce stade, il ne reste plus qu'à échantilloner la fonction de partition dans l'espace $\{\alpha,S_n,n = 0 \dots \infty\}$ en vérifiant le bilan détaillé associé au poids $W(\alpha,S_n)$ [53]. Partant d'une valeur de la chaîne d'opérateurs, d'une valeur de n et d'un état $|\alpha\rangle$ donnés, il est nécessaire d'effectuer des mouvements dans le but d'aboutir à une nouvelle configuration (une autre valeur de n, une autre séquence S_n et un autre état $|\alpha\rangle$). Ces mouvements doivent vérifier la condition de bilan détaillé et tous les états ayant un poids non nul doivent être accessibles en un nombre fini de mouvements (ergodicité de l'algorithme). Avant de décrire les mouvements possibles, nous allons évoquer trois aspects importants : le premier concerne la puissance maximale de développement, le deuxième décrit une représentation simple de la chaîne d'opérateurs en termes de propagation d'état et le dernier évoque la manière de s'assurer dans certains cas que tous les poids sont positifs.

1.2 Limitation de la puissance de développement

A priori, il faut échantillonner toutes les puissances de n. Quand $n \to \infty$, le nombre d'opérateurs dans S_n tend vers l'infini et il n'est évidemment pas possible de tous les maintenir dans la mémoire de l'ordinateur. Heureusement, puisque nous effectuons des simulations pour un nombre fini de termes dans le hamiltonien (réseaux de taille finie) et que nous travaillons à température non nulle, seuls des séquences de taille finie vont contribuer de façon significative à la trace. Nous allons imposer une limite maximale L sur les valeurs permises de n. Une estimation de la valeur moyenne du nombre d'opérateurs contribuant activement à la trace est βR (cet ordre de grandeur est tiré de la valeur moyenne de l'énergie - voir paragraphe a) de la section 4.1 -) et peut être utilisée pour déterminer en premier lieu une bonne valeur de L [50]. Comme nous le verrons plus tard, cette valeur maximale de développement pourra être ajustée de façon dynamique au cours de la simulation [50].

Nous allons dorénavant travailler avec une longueur de la chaîne d'opérateurs *fixée* à L, les valeurs de n plus grandes que L supposées négligeables. Assurons-nous maintenant que les séquences S_n de taille $n < L$ sont elles aussi représentées : pour ce faire, nous introduisons $L - n$ opérateurs identité $H_0 = I$ dans chaque séquence de taille n dans le but de "gonfler" artificiellement leur taille jusqu'à L. Il y a C_L^{L-n} façons possibles d'insérer ces opérateurs identité, et il faut en tenir compte dans la fonction de partition :

$$Z = \sum_{\alpha} \sum_{S_L} \frac{\beta^n (L-n)!}{L!} \langle \alpha | \prod_{p=1}^{L} H_{i_p} | \alpha \rangle \tag{4}$$

où maintenant l'échantillonage est effectué sur toutes les séquences de taille L fixée et où l'indice i_p peut désormais prendre toutes les valeurs entre 0 et R.

La formule (4) est centrale dans la méthode SSE. Durant la simulation, le nombre d'opérateurs identité va fluctuer et nous allons implicitement effectuer la somme sur l'indice n [53]. Dans ces conditions, n représente dorénavant *le nombre d'opérateurs non identité* dans une séquence de taille L.

1.3 Représentation de la chaîne d'opérateurs

Il est possible de visualiser l'action de la chaîne d'opérateurs sur un état en termes de propagation de cet état [15, 52]. On suivra la notation de Sandvik qui appelle état propagé $|\alpha(l)\rangle$ l'état obtenu par action des l premiers opérateurs de la chaîne d'opérateurs sur l'état initial $|\alpha\rangle$:

$$|\alpha(l)\rangle = \prod_{p=1}^{l} H_{i_p} |\alpha\rangle \,. \tag{5}$$

Par la cyclicité de la trace, nous avons $|\alpha(L)\rangle = |\alpha(0)\rangle = |\alpha\rangle$. Chaque état propagé $|\alpha(l)\rangle$ est obtenu par application du l-ième terme de la chaîne d'opérateur sur $|\alpha(l-1)\rangle$.

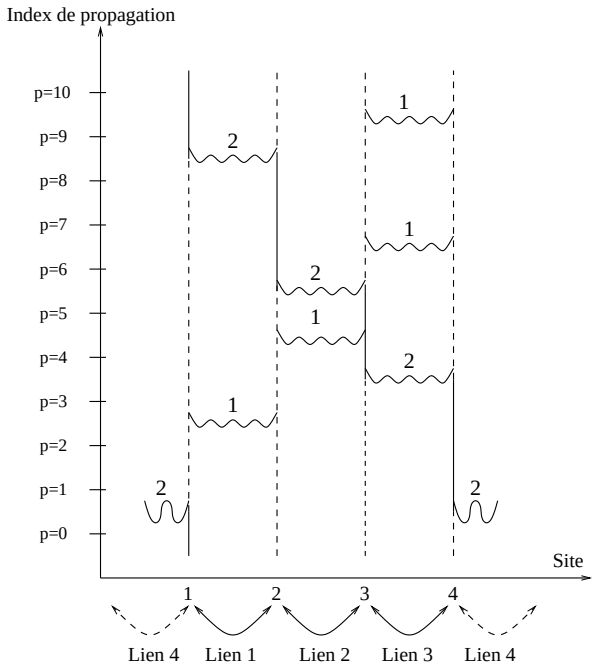


FIG. III.1 – *Exemple d'une chaîne d'opérateurs. Voir texte pour explication (nous nous sommes inspiré de la référence [51] pour la représentation graphique).*

Pour la suite, il est important de distinguer différents types d'opérateurs. Il en existe trois types : les opérateurs identité (type 0), les opérateurs diagonaux (type 1) et ceux non-diagonaux (type 2). Pour donner un exemple, on peut décomposer le hamiltonien de Heisenberg dans la base $\{|\alpha\rangle\} = \{|S^z\rangle\}$ comme une somme sur les opérateurs diagonaux $S_i^z S_j^z$ et non diagonaux $\frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$. La séquence d'opérateurs S_L peut s'écrire dans ces notations [16]:

$$S_L = [t_1,b_1]_1 ... [t_l,b_l]_l ... [t_L,b_L]_L \tag{6}$$

où $t_p = 0$, 1 ou 2 est le type de l'opérateur agissant entre les index de propagation $p-1$ et p. b_p est le numéro du lien (le couple i,j) sur lequel l'opérateur agit (s'il ne s'agit pas d'un opérateur identité).

On peut alors représenter de façon graphique la chaîne d'opérateurs S_L (cf. figure III.1 pour l'exemple d'une chaîne de Heisenberg de 4 spins 1/2). Il y a ici $M = 4$ liens et $R = 2M$ opérateurs non identité possibles. Dans la direction horizontale, on représente les spins (un spin up est une ligne droite, un spin down une ligne en pointillés) et dans la direction verticale l'index de propagation. Pour chaque valeur de l'index de propagation p, il n'y a qu'*un seul* opérateur. Si l'opérateur est l'identité, rien n'est inscrit entre les index de propagation. Dans le cas d'un opérateur diagonal ou non-diagonal, nous avons figuré une ligne sinusoïdale indiquant sur quel lien cet opérateur agit et s'il est diagonal (1) ou non-diagonal (2). L'état après propagation par un opérateur diagonal est évidemment le même, alors qu'il est modifié par un opérateur non-diagonal. Sur l'exemple de la figure III.1, la chaîne

d'opérateurs représentée est la suivante

$$S_{10} = [2,4]_1[0,0]_2[1,1]_3[2,3]_4[1,2]_5[2,2]_6[1,3]_7[0,0]_8[2,1]_9[1,3]_{10} \tag{7}$$

et elle agit sur l'état $|\alpha(0)\rangle = |\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$.

1.4 Décalage des éléments diagonaux

Comme nous l'avons précédemment dit, il est nécessaire que tous les éléments de matrice soient positifs (ou nuls) pour qu'une évaluation stochastique de la fonction de partition soit possible : c'est le problème de signe du Monte Carlo Quantique. La méthode SSE ne résout pas ce problème mais permet avec une simple redéfinition du zéro de l'énergie de faciliter certains cas (malheureusement les plus simples). Pour ce faire, une constante C est ajoutée à la diagonale du hamiltonien. Cette constante est choisie telle que tous les éléments diagonaux soient positifs ou nuls. Bien évidemment, ce seront les éléments non diagonaux qui souffriront du problème de signe. Cependant, cette définition du zéro de l'énergie permet dans plusieurs cas de simplifier l'algorithme, notamment dans la construction du loop operator update comme nous le verrons dans le cas du hamiltonien de Heisenberg. Cette constante C ne change bien évidemment rien à la physique du modèle, il sera seulement nécessaire de faire attention à ne pas l'oublier lorsque l'on mesurera des quantités liées directement à l'énergie.

2 Mouvements possibles

Pour passer d'une configuration à une autre, un pas Monte Carlo en SSE se décompose en deux mouvements : d'abord, un mouvement diagonal (*diagonal update*) qui échange les opérateurs identité et les opérateurs diagonaux, puis un mouvement plus complexe de boucle (*loop operator update*) qui permet d'échanger les opérateurs diagonaux et non-diagonaux.

2.1 Mouvement diagonal

Le mouvement diagonal est le plus simple. Il propose d'échanger à tout index de propagation un opérateur identité avec un opérateur diagonal au lien b : $[0,0] \leftrightarrow [1,b]$. On opère de la façon suivante : entre chaque index de propagation p, on regarde le type d'opérateur qui y agit. S'il s'agit d'un opérateur identité, on insère avec une certaine probabilité un opérateur diagonal au lien b choisi au hasard parmi les M liens possibles : $[0,0]_p \rightarrow [1,b]_p$. S'il s'agit d'un opérateur diagonal au lien b, on le remplace avec une certaine probabilité par un opérateur identité : $[1,b]_p \rightarrow [0,0]_p$. Enfin, s'il s'agit d'un opérateur non-diagonal, il reste inchangé.

Comment calculer les probabilités d'échanges ? Elles doivent vérifier la condition de bilan détaillé [15, 53] :

$$\frac{P([0,0]_p \rightarrow [1,b]_p)}{P([1,b]_p \rightarrow [0,0]_p)} = \frac{MW(\alpha,S_{n+1})}{W(\alpha,S_n)}. \tag{8}$$

Le facteur M provient simplement du fait qu'il y M choix possibles pour b. Notez que l'on passe de n à $n+1$ en insérant un opérateur diagonal. Pour ce type de mouvement, il est possible d'utiliser pour les probabilités de transition l'algorithme de Metropolis [15, 53] :

$$P([0,0]_p \to [1,b]_p) = \min(1, \frac{MW(\alpha,S_{n+1})}{W(\alpha,S_n)}) = \min(1, \frac{M\beta \langle \alpha_b(l)| H_b^1 |\alpha_b(l)\rangle}{L-n}) \quad (9)$$

et

$$P([1,b]_p \to [0,0]_p) = \min(1, \frac{W(\alpha,S_n)}{MW(\alpha,S_{n+1})}) = \min(1, \frac{L-n+1}{M\beta \langle \alpha_b(l)| H_b^1 |\alpha_b(l)\rangle}) \quad (10)$$

où H_b^1 est l'opérateur diagonal agissant sur le lien b où la restriction de $|\alpha(l)\rangle$ a été appelée $|\alpha_b(l)\rangle$.

2.2 Loop operator update

Comment insérer des opérateurs non-diagonaux ? De façon naïve, on peut essayer de remplacer des éléments diagonaux par des éléments non-diagonaux : $[1,b] \leftrightarrow [2,b]$. Ceci est voué à l'échec puisque aboutissant à des configurations qui ne contribuent pas à la fonction de partition. En effet, nous avons vu que les éléments non-diagonaux changeaient l'état propagé $|\alpha(l)\rangle$ et que si, par conséquent, un seul changement non-diagonal est effectué, la condition $|\alpha(L)\rangle = |\alpha(0)\rangle$ ne sera pas vérifiée. La base $\{|\alpha\rangle\}$ étant orthogonale (dans les cas considérés en pratique), la contribution à la trace de cette configuration serait nulle. Il faut donc considérer des mouvements plus complexes. Le premier mouvement proposé par Sandvik est le remplacement de deux opérateurs diagonaux sur le même lien à deux index de propagation différents par deux opérateurs non-diagonaux [15, 50] : $[1,b]_{p_1}[1,b]_{p_2} \leftrightarrow [2,b]_{p_1}[2,b]_{p_2}$. Ce mouvement, qui assure que la prochaine configuration ait un poids non nul, est en fait très similaire à l'algorithme local en Monte Carlo Quantique Worldline[2]. Ce mouvement, comme tout mouvement local, s'avére peu efficace à basse température et amène à des temps d'autocorrélation assez grands. De plus, il faut rajouter des mouvements appelés *ring updates* (de type mouvement de ligne dans l'algorithme MCQ Worldline) pour assurer l'ergodicité de l'algorithme.

Pour résoudre ce problème, Sandvik a proposé un algorithme non local très similaire à l'algorithme de boucle : le *loop operator update* (mouvement de boucles d'opérateurs) [16]. Nous allons présenter ce mouvement de façon très générale en se basant sur les travaux [16] et [51].

L'idée du loop operator update est très similaire à celle de l'algorithme de boucle : en partant d'un site (d'une worldline) et d'un index de propagation choisis aléatoirement, nous allons bouger une perturbation à travers le réseau de sites et d'opérateurs jusqu'au retour au point de départ. Tous les opérateurs touchés par cette boucle fermée seront modifiés.

2. En fait, il est légèrement plus efficace qu'un simple retournement de plaquette du MCQ Worldline : retourner une plaquette en MCQ Worldline revient à modifier la configuration à deux valeurs proches (séparées par $\Delta\tau$) du temps imaginaire, alors qu'ici les deux index de propagation p_1 et p_2 (qui peuvent être vus eux aussi comme nous le décrivons plus loin comme temps imaginaires) ne sont pas nécessairement proches.

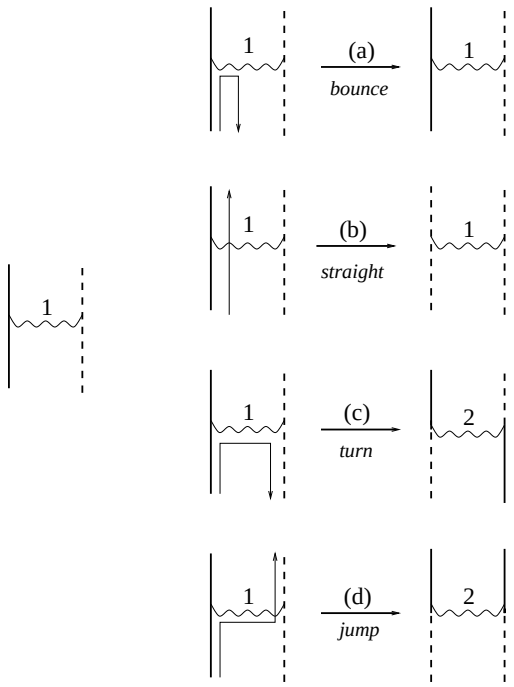


FIG. III.2 – *Exemple d'un vertex d'interaction de type 1 (diagonal) et des quatre chemins possibles de la boucle. Chaque chemin est indiqué sur le vertex de gauche par une flèche, le vertex de droite correspondant à l'état après passage de la boucle.*

Il est utile, comme le font les références [16] et [51], de présenter l'algorithme et la construction de cette boucle en termes de vertex (les éléments non identité de la chaîne d'opérateurs). Un vertex est caractérisé par ses quatre pattes : l'état $|\alpha_b(l-1)\rangle$ avant l'opérateur agissant à l'index de propagation l donne les deux pattes du bas, l'état $|\alpha_b(l)\rangle$ après l'action de l'opérateur celles du haut. *À chaque vertex correspond un élément de matrice du hamiltonien total :* $\langle\alpha_b(l-1)|\, H_b\, |\alpha_b(l)\rangle$. C'est cet élément de matrice qui va conditionner la construction de la boucle. Dans l'exemple des spins 1/2 de la figure III.1, nous avons isolé le vertex se situant entre les index de propagation 4 et 5 sur la figure III.2.

La boucle se construit de la façon suivante : nous choisissons un vertex et une de ses quatre pattes au hasard, puis prenons aléatoirement une direction de propagation (nord ou sud). Nous construisons la boucle dans cette direction et ne nous préoccupons que des éléments non identité de la chaîne d'opérateurs. Toute worldline qui est touchée par la boucle sera modifiée si nous choisissons de renverser la boucle (voir plus loin). À chaque fois que la boucle rencontre un vertex (un élément non identité), il faut choisir la prochaine patte par laquelle la boucle va sortir. Nous pouvons changer de côté du vertex (passer d'une patte gauche à une patte droite et inversement) ou non et nous pouvons aussi changer ou non de direction de propagation. Il existe donc, comme le présente les références [51, 55], quatre types de mouvements possibles de la boucle représentés sur la figure III.2. Dans cet exemple, la boucle arrive de la patte en bas à gauche mais toutes les autres pattes d'arrivée

sont possibles et les mouvements facilement transposables par symétrie.

Le cas le plus simple est celui où la patte de sortie est la même que la patte d'entrée (figure III.2a) : ce chemin appelé *bounce* (retour) est en général toujours possible puisqu'il ne change pas le vertex mais simplement la direction de propagation de la boucle. Le second chemin possible (figure III.2b) pour la boucle est d'aller tout droit (*straight*) et dans notre cas résulte en un opérateur diagonal (qui est possible si l'élément de matrice correspondant est non nul). La boucle peut aussi repartir dans l'autre sens en changeant de côté (figure III.2c) : c'est le chemin *turn*. Enfin (figure III.2d), la boucle peut garder la même direction de propagation en sautant sur le site voisin (*jump*).

Le chemin *bounce* n'est pas en général très utile puisqu'il correspond à un retour en arrière dans la construction de la boucle. Il peut être possible de l'éviter dans certains cas où tous les éléments de matrice sont identiques (nous y reviendrons plus loin dans le cas du hamiltonien de Heisenberg). Très généralement, on parle d'algorithme de boucle (*loop algorithm*) lorsque le chemin *bounce* peut être évité et d'algorithme de ver (*worm algorithm*) lorsque ce chemin est autorisé.

Nous voyons dans le cas de notre exemple que les chemins *jump* et *turn* ont installé des vertex non-diagonaux dans la liste d'opérateurs en place du vertex diagonal qui s'y trouvait auparavant. La construction de la boucle est terminée lorsque nous retournons sur le vertex de départ et la patte de départ correspondante. Si la boucle passe par les conditions aux bords périodiques dans la direction de propagation, l'état $|\alpha_b(0)\rangle = |\alpha_b(L)\rangle$ est lui-aussi modifié.

Comment choisir un des quatre chemins (la direction de sortie de la boucle) lorsque nous arrivons devant un vertex ? Il faut bien sûr que l'opérateur résultant après le passage de la boucle soit possible (c'est-à-dire un élément de matrice non nul) et que le choix du chemin vérifie le bilan détaillé. *La probabilité de chaque chemin est proportionnelle aux éléments de matrice correspondant aux vertex résultants après la construction de la boucle* [16]. Ce choix assure que le bilan détaillé est vérifié [16, 55]. Dans un article récent [55], Syljuåsen et Sandvik discutent en détail d'autres jeux de probabilités.

Dans certains cas, il n'existe qu'une seule possibilité de chemin pour la boucle : la construction de la boucle est alors complètement *déterministe* et il n'y a pas besoin de choisir aléatoirement une des pattes de sortie. Dans le cas le plus général, il faut choisir aléatoirement un chemin. Nous discuterons dans l'exemple du hamiltonien de Heisenberg comment se passe en détail la construction de la boucle.

Par la construction de cette boucle, nous insérons des opérateurs non-diagonaux et ceci de façon cohérente (le poids de la configuration après la boucle est toujours non nul). De plus, nous échantillonnons en plus de la chaîne d'opérateurs les états $|\alpha\rangle$ lorsque nous passons par les conditions aux bords dans la direction de propagation. Par cette méthode, toutes les valeurs de n, toutes les chaînes d'opérateurs S_L possibles et tous les états $|\alpha\rangle$ sont accessibles; l'algorithme est ergodique.

2.3 Un pas Monte Carlo SSE

Dans cette section, nous résumons le déroulement d'un pas Monte Carlo et ajouterons quelques remarques concernant certains aspects numériques de cette méthode.

Des considérations plus techniques pourront être trouvées dans les références [51, 55].

Partant d'une configuration d'état initial et de chaîne d'opérateurs donnés, il faut :

- Faire un mouvement diagonal (*diagonal update*) en proposant des changements pour chaque index de propagation. Il peut être utile de pré-calculer les probabilités du mouvement diagonal pour toutes les valeurs de n à chaque fois que l'on change de valeur de L.
- Construire une boucle (ou plusieurs, voir plus bas) avec l'algorithme décrit dans la partie loop operator update. Durant la construction de la boucle, il est possible de mesurer certaines quantités dynamiques [51].
- Dans le cas où l'algorithme est non déterministe, il se peut que la boucle mette un temps trop long pour revenir à son point d'origine. Il peut alors être utile de renoncer à ces boucles en les détruisant si elles atteignent une longueur trop grande (typiquement si elles touchent un nombre de vertex 10 fois supérieur au nombre n de vertex non identité présents). On efface alors la boucle, et on en reconstruit une autre. Il peut être utile de refaire un mouvement diagonal avant d'en recommencer une autre.
- Dans le cas déterministe, on peut utiliser un algorithme de type Swendsen-Wang où toutes les boucles du réseau sont construites et chacune d'entre elles est retournée avec une probabilité 1/2, ou alors un algorithme de type Wolff où une seule est construite à partir d'un point de départ aléatoire. Cette boucle est renversée dans tous les cas.
- Il peut éventuellement exister des worldlines "pures", c'est-à-dire sans vertex d'interaction (c'est souvent le cas à haute température où il y a peu de vertex). Dans ce cas, il faut proposer un changement vers un autre état de worldline (dans l'exemple des spins 1/2, choisir up ou down avec une probabilité 1/2).
- Réaliser les mesures nécessaires (voir partie 4).
- Une fois que ces points ont été effectués, il est utile d'ajuster dynamiquement la valeur maximale de développement L. Typiquement si le nombre de vertex non identité n est supérieur à 80 ou 90% de la valeur de L, il faut augmenter L d'à peu près 10 ou 20% (voir la référence [50]).

3 Étude de cas : hamiltonien de Heisenberg

3.1 Cas général

Nous allons nous intéresser dans cette section au cas du hamiltonien de Heisenberg anisotrope pour des spins 1/2 en présence d'un champ magnétique. Cette partie suit assez fidèlement la référence [16] où ce modèle est utilisé pour montrer l'efficacité du loop operator update.

La discussion sera effectuée pour un réseau bipartite quelconque (par exemple, un réseau hypercubique en dimension d). Nous ne présentons ici que le cas de spins 1/2, cependant le même type de raisonnement est applicable quelle que soit la taille S du spin (les calculs sont plus longs car il y a plus de vertex d'interaction possibles

dans le cas général de spins S). Les interactions seront considérées identiques pour tous les liens du réseau, même si la discussion reste inchangée lorsque cela n'est plus le cas (hamiltoniens explicitement dimérisés ou désordonnés tant que le désordre n'est pas frustrant).

Le hamiltonien de Heisenberg d'un système de spins 1/2 anisotrope sous champ magnétique s'écrit :

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z) - h \sum_i S_i^z \tag{11}$$

où Δ est l'anisotropie dans la direction z du champ magnétique et $\langle i,j \rangle$ désigne une paire de spins premiers voisins. Dans cette convention, le signe de J n'a pas d'importance (nous le prendrons positif) car, comme nous l'avons vu dans le chapitre II, celui-ci peut être modifié par une transformation de jauge. Le signe de Δ reflète la nature des interactions : $\Delta > 0$ pour un système antiferromagnétique et $\Delta < 0$ pour un système ferromagnétique.

Nous allons maintenant effectuer la décomposition SSE où les termes du hamiltonien sont distribués selon les liens et non selon les spins. Par souci de simplification, un signe moins est factorisé devant les hamiltoniens de lien et les interactions diagonales décalées d'une constante C. Le hamiltonien s'écrit maintenant de la façon suivante :

$$H = -J \sum_{b=1}^{dL^d} (H_b^1 - H_b^2) \tag{12}$$

où L est la taille linéaire du réseau, d sa dimension (il y a d liens par spins et donc $M = dL^d$ liens au total). H_b^1 est l'opérateur diagonal agissant sur le lien b reliant la paire de spins $\langle i,j \rangle$ et H_b^2 l'opérateur non-diagonal :

$$H_b^1 = -\Delta S_i^z S_j^z + \frac{h}{2dJ}(S_i^z + S_j^z) + C \tag{13}$$

$$H_b^2 = S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y. \tag{14}$$

La base utilisée pour le développement SSE est la base $\{|\alpha\rangle\} = \{|S^z\rangle\}$. Il faudra choisir la constante C de manière à ce que les éléments diagonaux soient positifs ou nuls, et le fait de se situer sur un réseau non frustré nous assure que le développement sera possible (voir une discussion dans la référence [16]).

Il ne nous reste plus qu'à appliquer les "recettes" précédemment décrites. Les éléments de matrice *non nuls* utiles pour le mouvement diagonal sont :

$$\langle \uparrow\uparrow | H_b^1 | \uparrow\uparrow \rangle = -\Delta/4 + h/(2dJ) + C \tag{15}$$

$$\langle \downarrow\downarrow | H_b^1 | \downarrow\downarrow \rangle = -\Delta/4 - h/(2dJ) + C \tag{16}$$

$$\langle \downarrow\uparrow | H_b^1 | \downarrow\uparrow \rangle = \langle \uparrow\downarrow | H_b^1 | \uparrow\downarrow \rangle = \Delta/4 + C. \tag{17}$$

Selon les valeurs du champ et de l'anisotropie, il faut choisir C de telle manière que tous ces éléments soient positifs. Une discussion intéressante sur l'efficacité de l'algorithme en fonction du choix de C pourra être trouvée dans la référence [55].

Pour le loop operator update, il faut considérer les éléments de matrice *totaux*. Les éléments diagonaux précédemment dictés ne sont pas modifiés, nous avons en effet :

$$\begin{aligned}
\langle\uparrow\uparrow| H_b |\uparrow\uparrow\rangle &= \langle\uparrow\uparrow| H_b^1 |\uparrow\uparrow\rangle && (18)\\
\langle\downarrow\downarrow| H_b |\downarrow\downarrow\rangle &= \langle\downarrow\downarrow| H_b^1 |\downarrow\downarrow\rangle && (19)\\
\langle\downarrow\uparrow| H_b |\downarrow\uparrow\rangle &= \langle\uparrow\downarrow| H_b |\uparrow\downarrow\rangle = \langle\downarrow\uparrow| H_b^1 |\downarrow\uparrow\rangle = \langle\uparrow\downarrow| H_b^1 |\uparrow\downarrow\rangle . && (20)
\end{aligned}$$

Deux autres éléments de matrice interviennent alors :

$$\langle\downarrow\uparrow| H_b |\uparrow\downarrow\rangle = \langle\uparrow\downarrow| H_b |\downarrow\uparrow\rangle = 1/2. \tag{21}$$

Nous avons ici présenté les éléments de matrice permettant d'effectuer les deux mouvements du SSE dans le cas général : il ne reste plus qu'à utiliser l'algorithme décrit précédemment. Dans des cas particuliers célèbres de ce hamiltonien, l'algorithme se simplifie considérablement. Étudions par exemple les cas de systèmes isotropes ferromagnétiques ($\Delta = -1$), antiferromagnétiques ($\Delta = 1$) et XY ($\Delta = 0$), tous trois en absence de champ magnétique ($h = 0$).

3.2 Modèle de Heisenberg isotrope ferromagnétique

Nous sommes dans le cas $\Delta = -1$ et $h = 0$. En choisissant $C = 1/4$, il ne reste que les éléments de matrice diagonaux suivants (les autres sont nuls) :

$$\langle\uparrow\uparrow| H_b^1 |\uparrow\uparrow\rangle = 1/2 \tag{22}$$

$$\langle\downarrow\downarrow| H_b^1 |\downarrow\downarrow\rangle = 1/2. \tag{23}$$

Donc dans le mouvement diagonal, il sera possible de remplacer un opérateur identité par un opérateur diagonal *uniquement lorsque les deux spins du lien b sont identiques*. Les probabilités des mouvements diagonaux sont :

$$P([0,0]_p \to [1,b]_p) = \min(1, \frac{M\beta J}{2(L-n)}) \tag{24}$$

et

$$P([1,b]_p \to [0,0]_p) = \min(1, \frac{2(L-n+1)}{M\beta J}). \tag{25}$$

Considérons maintenant le loop operator update et la manière de choisir les chemins lorsque la boucle arrive devant un vertex.

Si la boucle se retrouve (par exemple par la patte en bas à gauche) devant un vertex diagonal $\langle\uparrow\uparrow| H_b |\uparrow\uparrow\rangle$ ou $\langle\downarrow\downarrow| H_b |\downarrow\downarrow\rangle$, le chemin *bounce* est *a priori* envisageable, le chemin *straight* n'est pas possible (puisqu'il résulterait en l'élément de matrice diagonal $\langle\downarrow\uparrow| H_b |\downarrow\uparrow\rangle$ ou $\langle\uparrow\downarrow| H_b |\uparrow\downarrow\rangle$ qui est nul), le chemin *turn* est lui aussi impossible (résultant en un élément non-diagonal à valeur nulle $\langle\downarrow\downarrow| H_b |\uparrow\uparrow\rangle$ ou $\langle\uparrow\uparrow| H_b |\downarrow\downarrow\rangle$) et le chemin *jump* est quant à lui possible (il résulte en un vertex non-diagonal $\langle\downarrow\uparrow| H_b |\uparrow\downarrow\rangle$ ou $\langle\uparrow\downarrow| H_b |\downarrow\uparrow\rangle$).

Si la boucle arrive devant un vertex non-diagonal, on voit par le même raisonnement que seuls les chemins *bounce* et *jump* sont autorisés.

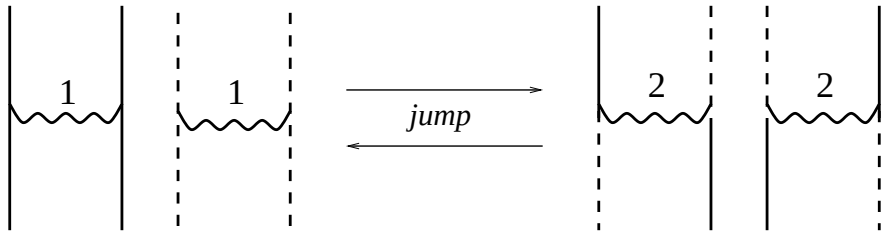


FIG. III.3 – *Vertex et mouvements possibles pour le hamiltonien de Heisenberg isotrope ferromagnétique. Le nombre 1 (respectivement 2) indique que le vertex est diagonal (resp. non-diagonal) et les flèches (ainsi que le nom du chemin) indiquent quelle est l'opération du loop operator update possible. Le vertex diagonal de gauche peut être transformé en vertex non-diagonal de gauche ou de droite par le chemin de la boucle selon la patte d'arrivée (idem pour le vertex de droite).*

Mais remarquons qu'en fixant $C = 1/4$, tous les éléments de matrice (diagonaux ou non-diagonaux) ont la même valeur 1/2. Dans ces conditions, le chemin *bounce* peut être éliminé. En effet, le bilan détaillé est vérifié lorsque *le seul chemin possible est le chemin* jump. Par conséquent, le loop operator update est complètement déterministe : la boucle, qu'elle rencontre un vertex diagonal ou non-diagonal, suivra toujours le chemin *jump* et ce vertex sera alors modifié pour devenir un vertex non-diagonal ou diagonal respectivement : $[1,b] \leftrightarrow [2,b]$.

On trouvera en résumé dans la figure III.3 les vertex et les mouvements possibles pour le modèle de Heisenberg isotrope ferromagnétique.

3.3 Modèle de Heisenberg isotrope antiferromagnétique

Ici nous avons $h = 0$ et $\Delta = 1$. Le choix $C = 1/4$ est de nouveau judicieux. En effet, les seuls éléments diagonaux non nuls sont $\langle\downarrow\uparrow| H_b^1 |\downarrow\uparrow\rangle = \langle\uparrow\downarrow| H_b^1 |\uparrow\downarrow\rangle = 1/2$. L'insertion d'un opérateur diagonal ne se fera que lorsque les spins sur le lien seront *de signes opposés*. Les probabilités $P([0,0]_p \to [1,b]_p)$ et $P([1,b]_p \to [0,0]_p)$ sont les mêmes que dans le modèle ferromagnétique.

Pour le loop operator update, on voit facilement que les seuls chemins possibles sont *bounce* et *turn*, et comme dans le cas ferromagnétique, on peut éliminer le chemin *bounce* sans violer le bilan détaillé. En ne choisissant que le chemin *turn*, l'algorithme est donc complètement déterministe.

Dans la figure III.4, on retrouvera les éléments édictés résumés.

3.4 Modèle XY sans champ magnétique

Dans le cas XY ($h = \Delta = 0$), tous les éléments diagonaux ont la même valeur C : on insérera donc un élément diagonal *quel que soit le sens des spins sur le lien.* Le choix $C = 1/2$ est préférable cette fois-ci car il permet d'utiliser les mêmes probabilités que dans le cas ferromagnétique pour le mouvement diagonal. De plus, en choisissant $C = 1/2$, tous les éléments de matrice diagonaux ou non-diagonaux

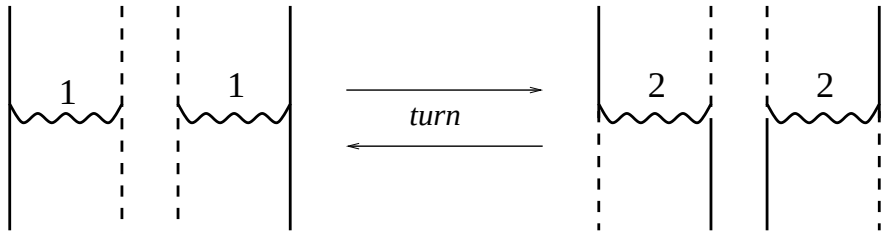


FIG. III.4 – *Vertex et mouvements possibles pour le hamiltonien de Heisenberg isotrope antiferromagnétique. Voir légende de la figure précédente III.3.*

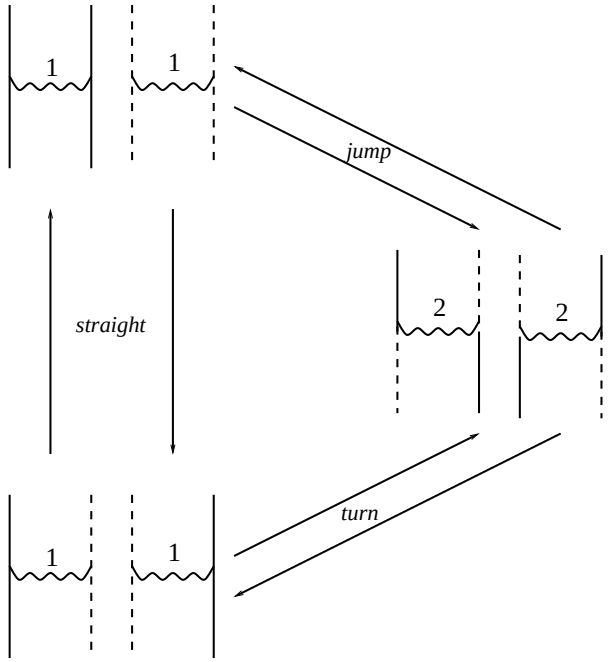


FIG. III.5 – *Vertex et mouvements possibles pour le hamiltonien XY. Voir légende de la figure III.3.*

sont égaux, et le chemin *bounce* dans le loop operator update peut encore une fois être négligé. Dans ce cas, deux chemins parmi les trois chemins *straight, jump* et *turn* sont possibles avec une probabilité égale : l'algorithme n'est pas déterministe.

Si le vertex est diagonal avec les deux spins *identiques* sur le lien, les deux chemins possibles sont *straight* (résultant en un vertex diagonal) et *jump* (résultant en un opérateur non-diagonal). Si le vertex est diagonal avec les deux spins *opposés*, les deux chemins possibles sont *straight* (résultant en un opérateur diagonal) et *turn* (vertex non-diagonal). Si le vertex est non-diagonal, seuls les chemins *jump* et *turn* sont possibles, résultant en un opérateur diagonal. Tout ceci est résumé dans la figure III.5.

4 Observables

Au cours de ce chapitre, nous avons présenté la méthode SSE pour échantillonner la fonction de partition. Nous montrons ici comment mesurer les différentes observables d'intérêt. Il est important de signaler qu'il faut ignorer les opérateurs identité lorsque nous effectuons une mesure (les opérateurs identité ne sont là que pour gonfler la taille de chaque séquence jusqu'à L et n'ont pas de sens physique). Sur la base de séquences constituées uniquement de n opérateurs avec un poids de référence $W(\alpha,S_n) = \frac{\beta^n}{n!} \langle\alpha| \prod_{p=1}^{n} H_{i_p} |\alpha\rangle$, nous discutons dans un premier temps des quantités statiques, puis évoquons brièvement les quantités dynamiques, plus complexes à calculer.

4.1 Quantités statiques

a) Énergie et chaleur spécifique

La quantité la plus simple à mesurer dans une simulation SSE est l'énergie. Avec $E = \frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z$ où Z est donnée par la formule (4), on voit très facilement que l'énergie interne est liée au nombre moyen d'opérateurs non identité. Il suffit maintenant de ne pas oublier le décalage C en énergie pour chacun des M liens :

$$E = -\frac{1}{\beta} \langle n \rangle + MC. \tag{26}$$

En dérivant une deuxième fois par rapport à β, on obtient la chaleur spécifique :

$$C_v = \left\langle n^2 \right\rangle - \langle n \rangle^2 - \langle n \rangle . \tag{27}$$

b) Opérateurs diagonaux, corrélations statiques

Considérons un opérateur $\mathcal{O}$ diagonal dans la base $\{|\alpha\rangle\}$ et soit $\mathcal{O}(p)$ sa valeur propre à l'index de propagation p associée à $|\alpha(p)\rangle$: $\mathcal{O}\,|\alpha(p)\rangle = \mathcal{O}(p)\,|\alpha(p)\rangle$. Nous avons tout simplement pour la valeur moyenne de $\mathcal{O}$:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \left\langle \frac{1}{n} \sum_{p=0}^{n-1} \mathcal{O}(p) \right\rangle . \tag{28}$$

De même manière, les corrélations à temps égaux de deux opérateurs diagonaux $\mathcal{O}_1$ et $\mathcal{O}_2$ ont pour valeur moyenne :

$$\langle \mathcal{O}_1 \mathcal{O}_2 \rangle = \left\langle \frac{1}{n} \sum_{p=0}^{n-1} \mathcal{O}_1(p) \mathcal{O}_2(p) \right\rangle \tag{29}$$

avec des notations évidentes.

4.2 Quantités dynamiques

Comment calculer des corrélations à temps non égaux $\langle \mathcal{O}_1(\tau) \mathcal{O}_2(0) \rangle$? Il faut pour cela relier l'index de propagation au temps imaginaire. Sandvik a montré [15, 49]

qu'une propagation de τ dans le temps imaginaire correspond *à une distribution binomiale pour la distance de propagation* Δp. Considérons d'abord la fonction de corrélation de deux opérateurs *diagonaux* pour des index de propagation différents séparés de Δp :

$$C_{\mathcal{O}_1\mathcal{O}_2}(\Delta p) = \frac{1}{n}\sum_{p=0}^{n-1} \mathcal{O}_1(p+\Delta p)\mathcal{O}_2(p). \tag{30}$$

La fonction de corrélation à des temps différents recherchée pour ces deux opérateurs peut alors s'écrire comme la somme de cette dernière fonction de corrélation sur tous les Δp affectés du poids binomial :

$$\langle \mathcal{O}_1(\tau)\mathcal{O}_2(0)\rangle = \left\langle \sum_{\Delta p=0}^{n-1} C^n_{\Delta p}(\frac{\tau}{\beta})^{\Delta p}(1-\frac{\tau}{\beta})^{n-\Delta p} C_{\mathcal{O}_1\mathcal{O}_2}(\Delta p)\right\rangle. \tag{31}$$

La susceptibilité généralisée correspondante s'obtient en intégrant sur le temps imaginaire :

$$\chi_{\mathcal{O}_1\mathcal{O}_2} = \int_0^\beta \langle \mathcal{O}_1(\tau)\mathcal{O}_2(0)\rangle\, d\tau. \tag{32}$$

L'intégrale sur le temps donne très simplement un facteur $\frac{1}{n+1}$ et nous obtenons[3] :

$$\chi_{\mathcal{O}_1\mathcal{O}_2} = \beta\left\langle \frac{1}{n(n+1)}(\sum_{p=0}^{n-1}\mathcal{O}_1(p))(\sum_{p=0}^{n-1}\mathcal{O}_2(p))\right\rangle. \tag{33}$$

La généralisation de ces formules pour le cas d'opérateurs non-diagonaux est possible [15, 49].

De manière générale, mesurer les fonctions de Green en Monte Carlo Quantique n'est pas obligatoirement aisé. Nous avons vu dans le cadre de l'algorithme de boucle qu'il existait des estimateurs améliorés pour, par exemple, la susceptibilité généralisée $\chi(q,\omega)$. En SSE, il est aussi possible de mesurer de façon systématique ces quantités lors du loop operator update. Nous ne détaillons pas ici cette étude qui s'avére assez rapidement complexe, et invitons le lecteur à se référer aux travaux de Dorneich et Troyer [51] qui présentent ce type d'opérations.

5 Comparaison avec l'algorithme de boucle

Dans cette dernière section, nous présentons les points communs et différences entre la méthode SSE et l'algorithme de boucle, en s'intéressant plus particulièrement à leur efficacité dans le cas de problèmes de spins quantiques sur réseau. Une comparaison à la fois qualitative et quantitative des deux méthodes pourra être trouvée dans la référence [55].

3. À noter que ces formules n'incluent pas le cas particulier $n = 0$. Dans ce cas très simple, la fonction de corrélation de la formule (30) s'écrit $C_{\mathcal{O}_1\mathcal{O}_2} = \mathcal{O}_1(0)\mathcal{O}_2(0)$ et les modifications dans les formules suivantes sont triviales.

5.1 Points communs

- Les deux méthodes permettent d'effectuer des mouvements non locaux, et assurent ainsi des temps d'autocorrélation faibles.
- Il n'existe pas, dans les deux cas, d'erreur systématique de discrétisation (de type paramètre de Trotter). La seule erreur est statistique.
- La variation du temps de calcul en fonction de la taille du système est optimale pour le SSE et l'algorithme de boucle (en tout cas la version à boucles multiples). Le temps de calcul varie comme βV où V est le volume du système. On peut dans les deux cas simuler des systèmes de très grande taille à des températures très faibles.
- Les observables les plus usuelles (y compris celles concernant la dynamique en temps imaginaire du système) peuvent être mesurées.

À ces divers titres, la méthode SSE et l'algorithme de boucle sont clairement les méthodes numériques les plus puissantes et efficaces pour la simulation de systèmes de spins quantiques non frustrés.

5.2 Différences

- La méthode SSE est plus générale que l'algorithme de boucle qui n'est bien défini que pour des systèmes de type Heisenberg. Elle peut s'appliquer en général à tous les systèmes quantiques ne présentant pas de façon "flagrante" de problème de signe.
- Dans le cas des spins quantiques, on ne peut pas utiliser l'algorithme de boucle si le champ magnétique ou l'anisotropie sont trop forts. Il faut obligatoirement recourir à la méthode SSE.
- La généralisation à des spins $S \geqslant 1$ est rapide et aisée dans l'algorithme de boucle, plus longue dans le cas de SSE. Il est peut-être possible de généraliser l'astuce de symétrisation des spins frères dans le cadre de la méthode SSE.
- L'algorithme de boucle présente de façon naturelle des estimateurs améliorés efficaces. Grâce à ces estimateurs, des calculs dans la limite thermodynamique et directement à $T = 0$ sont réalisables. La généralisation de ces estimateurs améliorés est certainement possible dans le cadre du SSE.
- La représentation directe dans le temps imaginaire continu de l'algorithme de boucle permet, à notre avis, de calculer les quantités dynamiques plus simplement qu'avec la méthode SSE.
- D'un point de vue technique, la méthode SSE est plus simple à implémenter que l'algorithme de boucle. En particulier, il est plus facile de travailler avec des entiers (puissances de développement) dans la méthode SSE qu'avec des nombres décimaux (temps de saut) dans l'algorithme de boucle.

6 Application au modèle de Heisenberg ferromagnétique tridimensionnel

Dans cette dernière section, nous présentons brièvement des résultats préliminaires obtenus avec la méthode SSE pour le modèle de Heisenberg ferromagnétique isotrope en trois dimensions.

Ce modèle présente une transition de phase à température finie entre un état paramagnétique et un état ferromagnétique, cette transition devant se situer dans la même classe d'universalité que le modèle de Heisenberg classique en trois dimensions (voir la publication [57] et références incluses). L'utilisation des techniques SSE devrait permettre à la fois de vérifier l'équivalence classique-quantique dans ce problème et obtenir avec une précision accrue les exposants critiques. Très récemment, De Souza et Lyra [58] se sont intéressés au même problème.

Dans ce but, nous avons généralisé les outils du Monte Carlo classique au cas quantique. Pour ce faire, les techniques de repondérage d'histogramme [59, 60] ont été étendues au cas quantique, à la fois pour l'algorithme de boucle (voir chapitre II) et la méthode SSE[4]. Ces techniques permettent d'utiliser des données tirées d'une simulation effectuée à la température T_0 pour estimer différentes observables à une température T_1, différente de T_0 (assez proche en pratique). La méthode d'histogrammes a été très largement utilisée dans l'étude des phénomènes critiques classiques au cours des dernières années. Notons que le travail de De Souza et Lyra [58] utilise les mêmes idées de repondérage d'histogrammes.

Il y a plusieurs façons de déterminer la température critique T_c à partir de simulations Monte Carlo. Dans le chapitre V est proposée une méthode alternative pour déterminer le point critique. Pour cette étude, nous avons utilisé une méthode plus "classique" et calculé le cumulant de Binder [61] :

$$U = 1 - \frac{< m^4 >}{3 < m^2 >^2} \tag{34}$$

où m est l'aimantation du système. Il est bien connu que les courbes représentant le cumulant de Binder pour différentes tailles de systèmes se croisent à T_c. La valeur du cumulant de Binder précisément au point critique est une quantité universelle.

Une attention particulière doit être apportée au calcul du cumulant de Binder dans des simulations de Monte Carlo Quantique puisqu'il est imposible d'avoir accès directement à m, seule sa composante m_z suivant l'axe z est accessible. Une simple intégration sur l'angle solide conduit à $\langle m_z^a \rangle = \frac{1}{a+1} \langle m^a \rangle$ (pour a pair) et le cumulant de Binder s'écrit aussi :

$$U = 1 - \frac{5 < m_z^4 >}{27 < m_z^2 >^2}. \tag{35}$$

La figure III.6 représente le cumulant de Binder calculé selon l'équation (35) pour différentes tailles du réseau tridimensionnel. Les croisements des courbes pour différentes tailles donne une estimation $T_c = 0.83905(5)$ de la température critique,

4. M. Troyer et F. Alet, non publié.

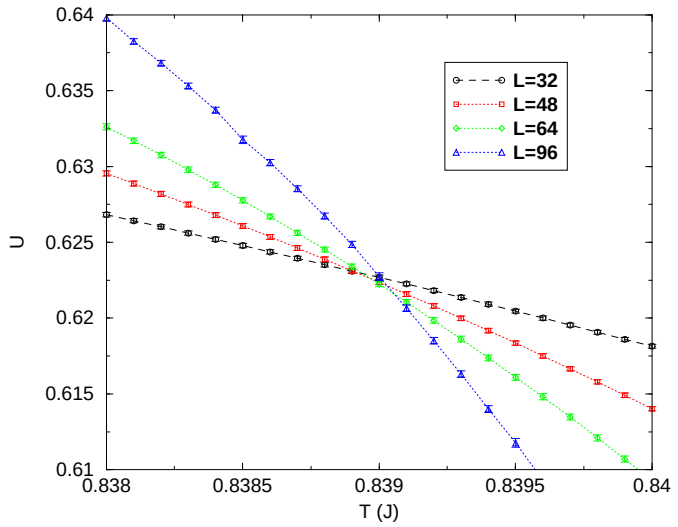


FIG. III.6 – *Cumulant de Binder U en fonction de la température pour différentes tailles de réseau pour le modèle de Heisenberg ferromagnétique en trois dimensions. Le croisement des différentes courbes donnent une estimation de la température critique.*

en bon accord avec les résultats de De Souza et Lyra [58]. Les valeurs des exposants critiques que nous obtenons[4] sont aussi en accord avec les résultats de la référence [58] ainsi que la classe d'universalité du modèle de Heisenberg classique en trois dimensions [62, 63], prouvant l'équivalence classique-quantique dans ce cas d'étude.

Par contre, la valeur U^* du cumulant de Binder au point critique obtenue $U^* = 0.622(1)$, ne concorde pas avec celle que proposent De Souza et Lyra [58], $U^* = 0.4504(1)$. Notre résultat, contrairement à celui avancé dans la référence [58], est en accord avec la classe d'universalité du modèle de Heisenberg classique en trois dimensions pour laquelle les simulations Monte Carlo classique [62] estiment $U^* = 0.6217(8)$.

Notons que les simulations n'ont été effectuées qu'à quelques unes des températures symbolísees dans la figure III.6 (par exemple $T = 0.838$, 0.839, 0.840 pour le réseau $96 \times 96 \times 96$). Cette remarque prouve l'intérêt et l'efficacité des techniques d'histogramme.

Chapitre IV

Spectres RMN de chaînes de Haldane dopées

1 Systèmes unidimensionnels, chaîne de Haldane

1.1 Conjecture de Haldane

Les systèmes magnétiques quantiques à basse dimension se révèlent être un champ d'études fourni et surprenant. Ainsi, à une dimension, la physique des chaînes de spins antiferromagnétiques est radicalement différente pour des spins entiers ou demi-entiers. Considérons le modèle unidimensionnel antiferromagnétique le plus simple que l'on puisse imaginer pour des spins quantiques, le modèle de Heisenberg :

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

On prendra par la suite $J > 0$ comme échelle d'énergie. Depuis les travaux de Bethe [64], nous savons que le spectre de ce hamiltonien pour des spins 1/2 ne possède pas de gap, et que son fondamental présente un quasi-ordre à longue distance (la fonction de corrélation spin-spin décroît en loi de puissance). Par généralisation tacite de ce résultat, il était naturel de croire que ce type de comportement critique était commun à toutes les chaînes de spin.

C'est Haldane qui met le feu aux poudres au début des années 80 [65, 66] en conjecturant que la nature des chaînes de spin S est différente selon la valeur de S : pour les spins demi-entiers, on retrouve le comportement critique de la chaîne de spins 1/2 (c'est-à-dire quasi-ordre à longue portée et pas de gap de spin); pour les spins entiers par contre, le fondamental est un liquide de spins possédant une longueur de corrélation finie et se trouve séparé du premier état excité par un gap de spin. L'argument de Haldane, basé sur une transformation (*mapping*) vers le modèle σ non linéaire, prévoit que le gap de spin se ferme exponentiellement avec S dans la limite classique $S \to \infty$ (et que la longueur de corrélation diverge elle aussi exponentiellement avec la valeur du spin) :

$$\Delta(S) \sim S^2 e^{-\pi S} \quad \text{et} \quad \xi(S) \sim S^{-1} e^{\pi S}, \tag{2}$$

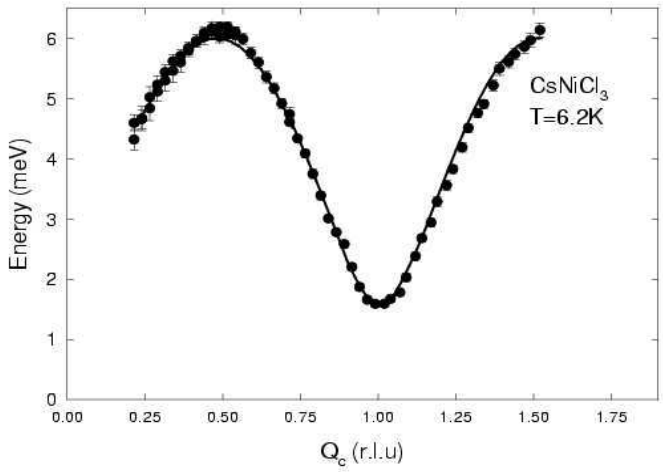


FIG. IV.1 – *Relation de dispersion $w(Q_c = \pi q)$ mesurée par diffusion de neutrons sur le composé* $CsNiCl_3$ *à $T = 6.2K$. Le gap de Haldane est visible pour la valeur $Q_c = 1$ du vecteur d'onde (figure extraite de la référence [67]).*

indiquant la nature purement quantique du phénomène.

La transformation de Haldane est justifiée dans la limite des grandes valeurs de S mais il est maintenant établi sans aucun doute que cette conjecture est aussi valide pour les S entiers les plus petits : l'évaluation numérique la plus récente [22] donne aux chaînes de spins $S = 1, 2, 3$ un gap $\Delta = 0.41048(6), 0.08917(4), 0.01002(3)$ et une longueur de corrélation $\xi = 6.0153(3)$, $49.49(1)$, $637(1)$ respectivement. Bien que ne disposant que de trois valeurs, la prévision (2) semble qualitativement vérifiée. Très généralement, on se réfère à une chaîne de spins entiers et à son gap afférent comme chaîne et gap de Haldane, et la phase magnétique associée (que nous décrirons dans le paragraphe 1.3) est appelée phase de Haldane.

1.2 Confirmations expérimentales

Qu'en est-il d'un point de vue expérimental ? Les exemples concernent en grande majorité des chaînes de spin 1 portés en général par un ion Nickel Ni^{2+}. L'observation d'un gap pour des valeurs de spin plus grandes est plus difficile, car plus faible[1].

Plusieurs paramètres peuvent rendre difficile une confirmation expérimentale : tout d'abord, le système doit être bien unidimensionnel. Ainsi, dans le premier exemple de matériau présentant un gap de Haldane, $CsNiCl_3$, le couplage interchaîne $J_\perp$ de l'ordre de 10^{-2} est déjà trop grand et induit un ordre de Néel tridimensionnel à $T_N = 4.85$K [69]. Le gap de Haldane est alors visible à des températures supérieures par diffusion de neutrons (voir figure IV.1). C'est aussi le cas de $SrNi_2V_2O_8$

1. Notons toutefois qu'il existe une réalisation expérimentale d'une chaîne de spins 2 [68].

qui s'ordonne à $T = 8$K [70].

Une anisotropie sur site (correspondant à des termes $D(\mathbf{S}_i^z)^2$ dans le hamiltonien) trop élevée peut aussi empêcher une comparaison quantitative avec le modèle (1). Ainsi, c'est encore la diffusion inélastique de neutrons [71, 72, 73] sur $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$, un composé plus unidimensionnel ($J_\perp \simeq 10^{-4}$) ne s'ordonnant pas à basse température, qui révèle l'existence de *plusieurs* gaps de Haldane dus à l'anisotropie dans ce système pour lequel $D \simeq 0.18$. Si ce genre de terme est trop grand, il peut même emmener un système de la phase de Haldane vers une phase non magnétique dite "de grand D". De même, un terme biquadratique de type $\beta(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2$ pourrait déstabiliser la phase de Haldane. Ce terme est en général assez faible dans les composés expérimentaux, bien qu'il soit possible qu'il ait une forte influence dans $LiVGe_2O_6$ [74] (le débat [75, 76, 77] reste entier pour ce composé).

Bien souvent, les composés présentent une combinaison de tous ces facteurs, rendant difficile l'observation expérimentale de la physique de Haldane. À ce titre, Y_2BaNiO_5 [78] est une exception notable puisqu'il semble être modélisable quasi-parfaitement par un hamiltonien (1) de spins 1. Ainsi, ce matériau présente un couplage interchaîne négligeable ($J_\perp$ inférieur à 5.10^{-4}), son anisotropie sur site est faible $D \simeq 0.03$ et un processus biquadratique inexistant. De plus, la valeur assez forte de son intégrale d'échange $J \simeq 285$K permet d'étudier assez facilement sa phase basse température (c'est-à-dire $T << \Delta$) [2]. Enfin, il est relativement facile de doper chimiquement cette chaîne de Haldane quasi idéale avec des impuretés non magnétiques (Zn ou Mg), magnétiques (Cu) ou chargées (Ca); ce qui va permettre de sonder la réponse de la phase de Haldane (et d'un liquide de spins en général) à de telles perturbations.

1.3 Approche Solide de Liens de Valence

Nous avons brièvement présenté la conjecture de Haldane et effectué une petite revue expérimentale de matériaux pouvant la confirmer. Mais quelle est la nature de la phase associée? Malheureusement, il n'existe pas d'argument intuitif pouvant justifier la prédiction de Haldane : c'est un terme topologique absent ou non dans la transformation vers le modèle σ non linéaire qui différencie les théories des champs des chaînes de spins entiers ou demi-entiers. Par contre, un modèle très proche du hamiltonien (1) pour des spins 1 a été introduit par Affleck, Kennedy, Lieb et Tasaki en 1987 [79] : le fondamental de ce modèle nommé AKLT est exactement connu et permet de donner un sens physique à la phase de Haldane. En suivant la démarche de la référence [79], nous allons d'abord donner et décrire l'état Solide de Liens de Valence (*Valence Bond Solid* - VBS), puis formuler le hamiltonien dont il est le fondamental exact.

L'approche VBS de la chaîne de spins 1 est la suivante : chaque spin 1 est décomposé en 2 spins 1/2 symétrisés dans l'état triplet, et chaque spin 1/2 forme un singulet avec un de ses spins 1/2 voisins (voir figure IV.2). On a affaire alors à un solide de singulets (d'où l'appellation *Valence Bond Solid*) puisque la fonction de

2. Malheureusement, le corrolaire est qu'il est impossible d'imposer un champ magnétique de saturation $h \sim J$ à ce matériau.

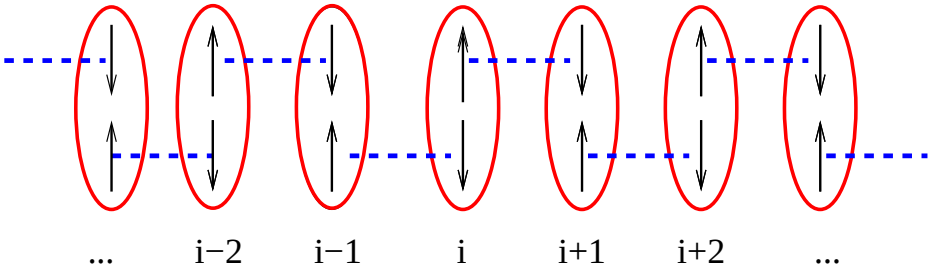


FIG. IV.2 – *Image Valence Bond Solid (VBS) de la chaîne de spins 1. Chaque spin 1 est décomposé en deux spins* 1/2 *symétrisés (l'opération de symétrisation est symbolisée par la figure ovale). Chacun de ces spins* 1/2 *forme un singulet (ligne pointillée) avec un des spins* 1/2 *plus proches voisins.*

corrélation singulet-singulet vaut l'unité. Il est utile de préciser immédiatement que cet état VBS n'est *pas* le fondamental de la chaîne de spins 1. Par contre, Affleck *et al.* [79] ont construit un modèle pour lequel l'état VBS est le fondamental exact. Il s'agit de :

$$H_{\text{AKLT}} = J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - \beta(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2 \tag{3}$$

au point $\beta = -1/3$. Le terme biquadratique $\beta(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2$ qui s'ajoute n'a de sens que pour des spins $S \geqslant 1$. Le préfacteur numérique 1/3 est assez petit et peut nous laisser espérer que la correction due à ce terme est faible. C'est en effet le cas, et il a été montré par plusieurs méthodes (voir la publication [80] pour une liste de références) qu'il existe une phase unique (phase de Haldane) pour $-1 < \beta < 1$. Le point isotrope $\beta = 0$ et le point AKLT $\beta = -1/3$ en faisant partie, une bonne image physique du fondamental de la chaîne de spins 1 est donc celle de l'état AKLT. Cet état n'étant composé que de liens aux plus proches voisins, on voit facilement qu'il ne présente des corrélations spin-spin qu'à courte portée et possède donc un gap de spin. Le calcul exact [79] donne $\xi_{\text{AKLT}} = 1/\ln 3$ et $\Delta_{\text{AKLT}} = 0.664$. Ceci nous donne une bonne intuition de l'origine du gap et de la longueur de corrélation finie de la chaîne de spins 1.

En un mot, la physique de la phase de Haldane nous est donnée par l'état VBS; cette approche est particulièrement utile lorsque nous considérons des chaînes ouvertes.

1.4 Chaînes ouvertes, excitations de spin 1/2

Considérons maintenant une chaîne de spins 1 avec des conditions aux bords ouvertes. Grâce à l'approche VBS, il apparaît immédiatement (voir figure IV.3) que deux spins 1/2 sont libérés par ces conditions aux bords (il n'y a plus de lien singulet entre eux). Ceci est un cas particulier d'un résultat général qui indique un renforcement des corrélations magnétiques sur les sites proches d'une impureté non magnétique dans les systèmes de spins [81]. Cet effet est par exemple observé expérimentalement dans les systèmes spin-Peierls (voir par exemple la référence [82]),

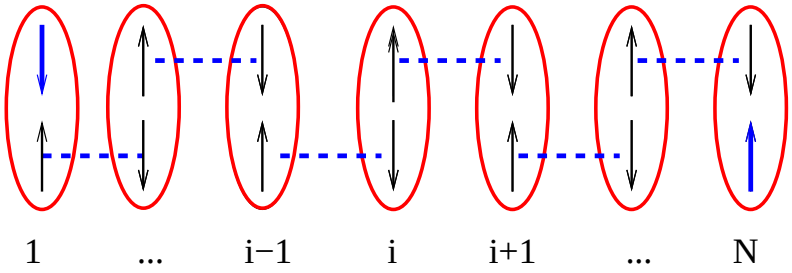


FIG. IV.3 – *Approche VBS de la chaîne de spins 1 ouverte. Pour les deux sites de bords de chaîne, un spin* 1/2 *est libéré par les conditions aux bords ouvertes (il ne forme plus de singulet avec un spin* 1/2 *voisin).*

bien que des travaux récents remettent ceci en cause dans des cas où la frustration rentre en jeu [83, 84]. Il est amusant de remarquer ici que c'est un résultat exact (tout du moins au point AKLT).

Ces spins 1/2 effectifs de bord ont fait l'objet de nombreuses études (voir publication [85] et références incluses). En particulier, Kennedy a étudié numériquement ce problème pour la chaîne de spins 1 isotrope [86] : il a montré que lorsque les conditions aux bords sont périodiques, le fondamental est un singulet non dégénéré alors qu'il existe un singulet *et* un triplet sous le gap de Haldane lorsque les conditions aux bords sont ouvertes. La différence d'énergie entre ces deux multiplets diminue exponentiellement avec la taille de la chaîne, donnant un fondamental dégénéré quatre fois dans la limite thermodynamique. Kennedy montre alors que ceci peut être interprété dans l'image des spins 1/2 de bords comme un couplage effectif $J_{\text{eff}} = (-)^L e^{-L/\xi}$ entre ces spins, résultant en triplet et singulet déjà évoqués. Ici, L est la longueur de la chaîne et ξ est la longueur de corrélation de volume (*bulk*) de la chaîne de spins 1. Le singulet (respectivement le triplet) est le fondamental pour une chaîne avec un nombre pair (resp. impair) de spins. Bien que ces effets de bords puissent paraître anecdotiques, il est important de se rendre compte que ce sont les degrés de liberté pertinents du système car toutes les autres excitations possèdent un gap (qui plus est conséquent).

Une manière très simple de visualiser ces excitations de spins 1/2 est de calculer le *profil d'aimantation* $\langle S_i^z \rangle$ d'une chaîne ouverte. Nous l'avons représenté sur la figure IV.4 pour une chaîne de 100 spins : on y voit un maximum d'aimantation sur les sites de bord, puis une décroissance de ces "excitations" au fur et à mesure que l'on s'éloigne des bords. Il a été montré analytiquement [87] et numériquement [7, 87, 88, 89] que cette décroissance était exponentielle avec de nouveau la longueur de corrélation de volume $\xi \simeq 6.02$:

$$\langle S_i^z \rangle = \langle S_1^z \rangle (-)^L e^{-L/\xi}. \tag{4}$$

La structure antiferromagnétique alternée est conservée par le facteur $(-)^L$ et les simulations donnent $\langle S_1^z \rangle \simeq 0.532$ [7]. Il a été montré que ces excitations de spins 1/2 subsistent dans toute la phase de Haldane $-1 < \beta < 1$ [85].

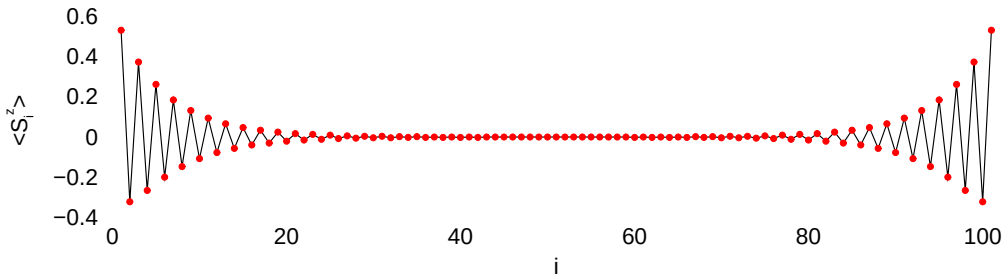


FIG. IV.4 – *Profil d'aimantation $\langle S_i^z \rangle$ d'une chaîne de spins 1 ouverte à $T = 0$ calculé par DMRG. On voit clairement des excitations d'aimantation exponentiellement localisées en chaque fin de chaîne.*

Plus récemment, Lecheminant et Orignac [90] ont fourni une analyse détaillée de ces profils d'aimantation de chaînes ouvertes par des techniques de bosonisation.

1.5 Mises en évidence expérimentales des spins 1/2 effectifs

Ces excitations de bords existent non seulement sur le papier, mais ont été aussi observées expérimentalement, dans des composés de Haldane où une partie des spins 1 est remplacée par des ions non magnétiques. Ainsi la susceptibilité de $CsNi_{1-x}Mg_xCl_3$ augmente à basse température (voir figure IV.5) alors qu'on s'attend à un comportement activé $\chi \sim \exp(-\Delta/T)$ pour un système à gap de spin . En fait, il s'agit tout simplement de la contribution Curie des spins 1/2 libres qui ont été créés par le remplacement du Ni par le Mg non magnétique. Ces expériences ont aussi prouvé que, en accord avec l'image VBS, chaque impureté non magnétique induisait deux spins 1/2, de part et d'autre de l'impureté. Ces spins 1/2 effectifs ont aussi été mis en évidence par Résonance Paramagnétique Électronique (RPE) dans des chaînes dopées avec des entités non magnétiques [91], magnétiques [92], mais également dans des systèmes non dopés mais "fracturés" au niveau microscopique [93]. Ces spectres RPE ont été très bien reproduits de façon numérique [94]. Des mesures de chaleur spécifique [95] sur $Y_2BaNi_{1-x}Mg_xO_5$ révélant une anomalie de Schottky avaient dans un premier temps été interprétées en terme d'excitations de spins 1, mais des études ultérieures ont montré que ces expériences pouvaient aussi s'expliquer par les effets des spins 1/2 de bord lorsque la distribution des chaînes et l'anisotropie étaient prises en compte [96].

Toutes ces études expérimentales s'étaient concentrées sur la phase basse température (c'est-à-dire $T \ll \Delta$), où les excitations de spin 1/2 sont bien définies, sondant la physique sous le gap de Haldane. Plus récemment, Tedoldi et collaborateurs [98] ont démontré de très belle manière les effets de ces spins 1/2 pour des températures autour du gap en effectuant des mesures de Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) sur $Y_2BaNi_{1-x}Mg_xO_5$: l'image des profils d'aimantation est directement lisible dans les spectres RMN pour cette gamme de température. Très bizarrement, ces spectres ne présentent plus de pics satellites (qui prouvent l'existence des excitations de spins 1/2) pour des températures *inférieures* au gap, alors que c'est précisément là où ils

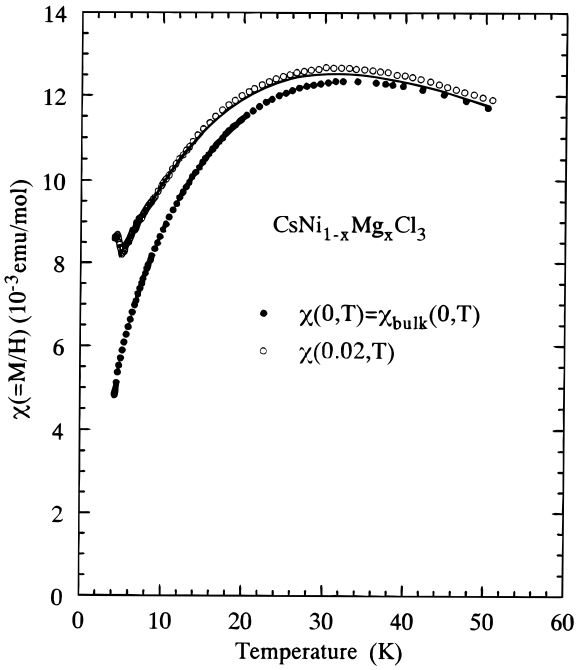


FIG. IV.5 – *Susceptibilité magnétique du composé* $CsNi_{1-x}Mg_xCl_3$ *en fonction de la température pour le cas pur* $x = 0$ *et le cas dopé* $x = 0.02$ *(figure extraite de la référence [97]). Dans le cas pur, la susceptibilité chute exponentiellement alors qu'une remontée de la susceptibilité est observable à basse température pour l'échantillon dopé par des impuretés non magétiques (voir texte).*

devraient être le plus observables. Tedoldi *et al.* donnent plusieurs explications à ce phénomène : l'élargissement observé du pic central du spectre qui "brouille" tous les pics satellites pourrait être dû à la distribution de longueurs de chaînes provoquée par la répartition aléatoire des impuretés. Des effets de couplage interchaîne ou d'anisotropie pourraient aussi avoir une telle conséquence.

Ces mesures RMN nous ont amené à considérer des systèmes de Haldane ouverts à des températures finies soumis à un champ magnétique (comme c'est le cas dans les expériences de RMN), dans le but d'étudier les excitations de spins 1/2 à des températures de l'ordre du gap, mais aussi d'essayer de comprendre les spectres RMN pour les températures les plus basses. Dans les prochaines parties, nous allons montrer les résultats de nos simulations sur de tels systèmes.

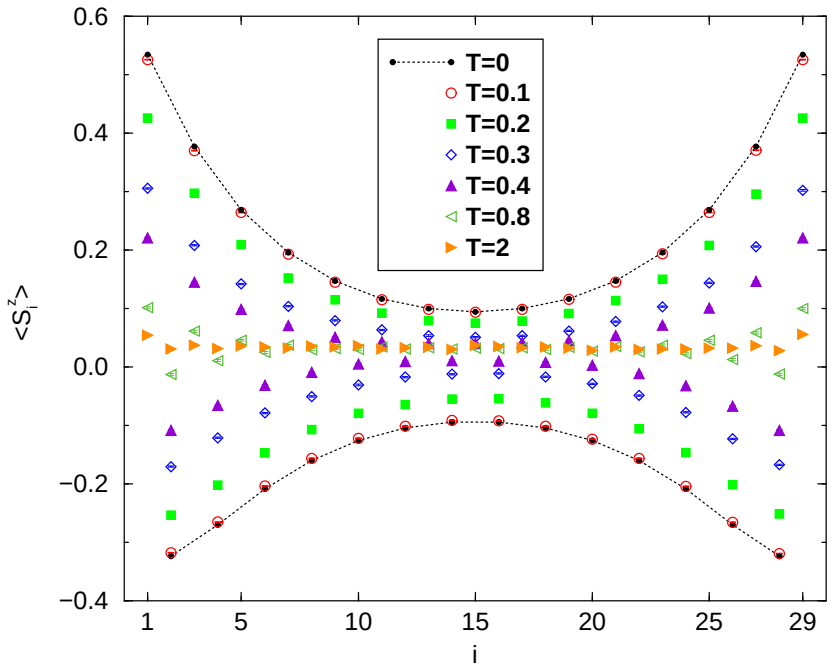


FIG. IV.6 – *Profils d'aimantation dans $S^z_{tot} = 1$ pour une chaîne ouverte de 29 sites pour différentes températures en champ nul. Le profil à $T = 0$ (cercles remplis) est obtenu par DMRG, les autres températures par MCQ. L'enveloppe de la courbe à $T = 0$ est indiquée par une ligne en pointillés.*

2 Profils d'aimantation de chaînes de Haldane ouvertes

2.1 Considérations techniques

Nous souhaitons simuler des chaînes de spin 1 ouvertes, à température et champ magnétique finis. La méthode numérique la plus adaptée est le Monte Carlo Quantique (MCQ), et nous avons ici utilisé l'algorithme de boucle en temps continu (voir chapitre II). Nous allons tout d'abord étudier de manière qualitative l'influence de la température puis celle du champ sur les profils d'aimantation pour une chaîne ouverte de taille fixe, ici 29 spins. Ce nombre impair indique que le fondamental est le triplet, très légèrement plus bas que le singulet. Les autres états excités sont bien au dessus, le gap étant de l'ordre de celui de Haldane dans la limite thermodynamique $\Delta \simeq 0.5$. Par la suite, toutes les énergies seront mesurées en unités de la constante d'échange J.

2.2 Influence de la température

À cause de la symétrie par renversement du temps, l'aimantation (sur site) est nulle en l'absence de champ magnétique. Nous avons donc étudié l'influence de la température sur les profils d'aimantation dans le secteur $S^z_{\text{tot}} = 1$. Sur la figure IV.6,

sont représentés les résultats obtenus par MCQ pour différentes températures finies et à $T = 0$ par DMRG. On observe la structure alternée antiferromagnétique qui tend à être diminuée avec l'augmentation de la température.

Pour la température la plus basse $T = 0.1$ (bien en dessous du gap), le profil est quasi identique à celui du fondamental obtenu par DMRG. À $T = 0$, la décroissance de l'aimantation sur site autour du bord de la chaîne est bien exponentielle comme indiqué dans la formule (4) avec une longueur typique égale à la longueur de corrélation de volume $\xi \simeq 6$.

À haute température, l'aimantation alternée décroît de sa valeur de bout de chaîne plus rapidement, indiquant une longueur de corrélation plus faible. Aux plus hautes températures, les spins du milieu de la chaîne (autour de $i = 15$) sont polarisés et témoignent d'une aimantation moyenne $\langle S_i^z \rangle = 1/L \simeq 0.034$. Dans la gamme de températures correspondant aux expériences de Tedoldi ($T = 0.3 - 0.8$), la structure due aux excitations de spins 1/2 de bord est clairement visible : de tels résultats confirment l'existence de ces excitations pour des températures au-dessus du gap, même si l'aimantation sur site de fin de chaîne y est réduite de façon significative.

2.3 Influence du champ magnétique

En enlevant la contrainte de travail du secteur magnétique $S^z_{\text{tot}} = 1$, nous considérons les effets du champ magnétique sur les profils d'aimantation. Nous avons calculé cette dépendance pour deux températures différentes $T = 0.1 \ll \Delta$ et $T = 0.526 > \Delta$ (cette dernière température correspondant à une de celles utilisées dans les expériences de RMN).

Pour les deux profils, l'aimantation est évidemment nulle en absence de champ magnétique. Pour $T = 0.1$, les seuls états qui vont être affectés par le champ sont dans les secteurs $S^z_{\text{tot}} = \pm 1$ du triplet. En augmentant le champ, l'état d'aimantation totale $S^z_{\text{tot}} = 1$ sera favorisé énergétiquement et le profil va prendre une structure alternée, mettant en évidence l'existence des excitations de fin de chaîne (voir figure IV.7). Pour des champs suffisamment grands, nous devrions obtenir des résultats comparables à ceux présentés dans la partie précédente obtenus en l'absence de champ magnétique mais dans le secteur $S^z_{\text{tot}} = 1$. Ceci est clairement le cas et pour $h = 0.3$, on retrouve quasiment la structure à champ nul du secteur $S^z_{\text{tot}} = 1$ (voir courbe à $T = 0.1$ de la figure IV.6). Par contre, si le champ magnétique est trop fort (disons $h > 0.3$), les états magnétiques de secteurs différents se trouvant au dessus du gap de Haldane vont contribuer à la moyenne thermique de l'aimantation sur site et, bien que la structure alternée soit encore bien présente, nous ne retrouvons pas parfaitement les résultats sans champ. Cet effet est notamment observable sur les résultats au champ $h = 0.4$: l'aimantation sur site $\langle S_i^z \rangle$ pour les spins impairs (qui ont tous une valeur moyenne positive) est très proche de sa valeur dans le secteur $S^z_{\text{tot}} = 1$, alors que pour les spins pairs, $\langle S_i^z \rangle$ est plus élevé pour $h = 0.4$ que dans le secteur $S^z_{\text{tot}} = 1$. Ceci est particulièrement visible pour les spins pairs de milieu de chaîne.

À plus haute température $T = 0.526$, les effets de fin de chaîne sont moins importants, particulièrement pour les champs faibles (figure IV.8). En augmentant la valeur du champ, principalement deux effets sont observables. Le premier est la

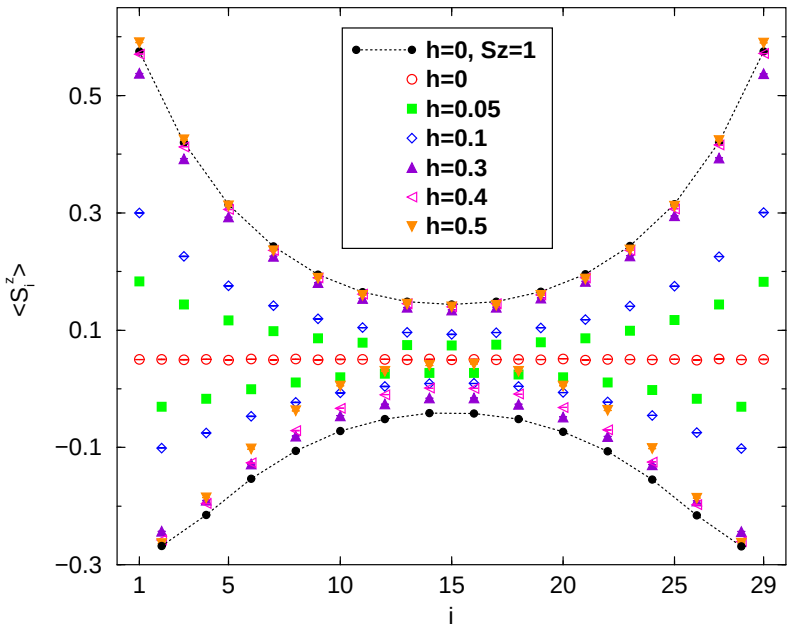


FIG. IV.7 – *Profil d'aimantation pour une chaîne ouverte de 29 sites pour différentes valeurs du champ magnétique à* $T = 0.1$. *L'enveloppe de la courbe à champ nul dans le secteur* $S^z_{\text{tot}} = 1$ *est indiquée par une ligne en pointillés.*

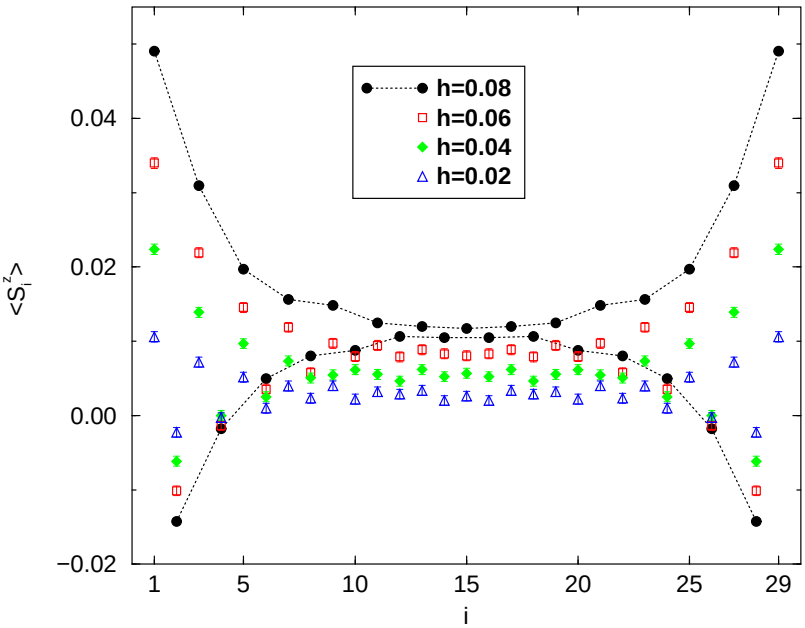


FIG. IV.8 – *Profil d'aimantation pour une chaîne ouverte de 29 sites pour différentes valeurs du champ magnétique à* $T = 0.526$. *L'enveloppe de la courbe pour le champ* $h = 0.08$ *utilisé dans les expériences de Tedoldi est indiquée par une ligne en pointillés.*

T	0.993	0.702	0.526	0.27
$\xi(T)$	1.57 ± 0.23	2.37 ± 0.37	2.97 ± 0.13	4.62 ± 0.11

TAB. IV.1 – *Dépendance en température de la longueur de corrélation déterminée à partir des profils d'aimantation obtenus dans un champ* $h = 0.08$.

simple polarisation des spins de milieu de chaîne, relativement peu affectés par les effets de fin de chaîne. Lorsque par la suite, nous présenterons les résultats concernant les spectres RMN, cet effet se traduira par un déplacement positif du pic central du spectre RMN (celui correspondant aux cas où la sonde RMN est proche d'un milieu de chaîne). Le second effet est la polarisation progressive des spins de fin de chaîne au fur et à mesure que le champ magnétique augmente. La valeur du champ la plus grande $h = 0.08$ correspond à celui utilisé dans les expériences de Tedoldi. Le signal dû aux excitations de fin de chaîne apparaît clairement pour ces valeurs de température et de champ. Comme la température est assez grande, la longueur de corrélation est petite et les effets de bord ne sont visibles que sur les premiers spins proches de la fin de la chaîne.

2.4 Estimation de la longueur de corrélation

Il existe plusieurs méthodes pour obtenir la longueur de corrélation dans des simulations numériques (voir par exemple la méthode du second moment discutée dans le chapitre II). Ici, nous obtenons la longueur de corrélation de manière alternative, en étudiant la décroissance de l'aimantation sur site. Comme expliqué précédemment, l'aimantation sur site décroît exponentiellement lorsque que l'on s'éloigne de la fin de la chaîne avec une échelle caractéristique reliée à la longueur de corrélation de volume. Ici, nous avons obtenu la longueur de corrélation à température finie $\xi(T)$ en estimant cette décroissance exponentielle de la façon suivante :

$$\langle S_i^z \rangle = \langle S_1^z \rangle [(-)^{i-1} \exp(-(i-1)/\xi(T)) + (-)^{L-i} \exp(-(L-i)/\xi(T))] + \langle S_h^z \rangle. \quad (5)$$

L est la longueur de la chaîne (nous avons effectué cette estimation numérique pour les plus grandes longueurs de chaînes disponibles $L = 150 - 200$) et $\langle S_h^z \rangle$ correspond à l'aimantation induite par le champ à haute température (typiquement l'aimantation sur site des spins du milieu pour lesquels les effets de bords sont invisibles). Les résultats présentés dans le tableau IV.1 sont en accord avec les estimations numériques plus traditionnelles [22] et les résultats expérimentaux tirés des spectres RMN [98]. Rappelons que nous n'utilisons pas la meilleure méthode pour déterminer la longueur de corrélation de volume : nous déterminons ici la longueur de corrélation liée aux excitations de bords de chaîne, qui se trouve coïncider avec la longueur de corrélation de volume.

3 Spectres RMN

Nous avons vu les effets du champ magnétique et de la température sur les excitations de spin 1/2 présentes aux bords des chaînes de Haldane ouvertes. Nous

sommes donc bien armés pour reconstruire numériquement les spectres RMN de ce genre de systèmes. En particulier, nous souhaitons comparer, voire reproduire, les mesures expérimentales de Tedoldi *et al.* [98] sur le composé $Y_2BaNi_{1-x}Mg_xO_5$. Pour ceci, nous décrirons en premier lieu et brièvement la géométrie du composé pour comprendre où se situe la sonde RMN et montrerons de quelle manière nous avons construit les spectres numériques. Ensuite, les résultats seront présentés puis comparés aux résultats expérimentaux. Enfin, nous discuterons finalement des accords et différences observés.

3.1 Reconstruction du spectre numérique

La méthode de reconstruction numérique des spectres RMN est ici décrite en indiquant les approximations utilisées. Nous ne rentrerons pas ici dans les détails d'une expérience de RMN; pour la suite, il est suffisant de savoir, pour schématiser grossièrement, que l'intensité du signal RMN est proportionnelle au nombre de noyaux (dont on fait la spectroscopie RMN) qui obéissent à la résonance [99, 100] :

$$K\nu = H_0 + A\langle S_i^z \rangle \tag{6}$$

où H_0 est le champ magnétique, K une constante, ν la fréquence de la résonance, A le "champ hyperfin" et $A\langle S_i^z \rangle$ le champ local vu par la sonde RMN. Dans les expériences de Tedoldi , la fréquence ν est fixe et c'est le champ magnétique H_0 qui varie. Pour simplifier, disons simplement que lorsque nous présenterons des spectres RMN, l'axe des abscisses sera directement proportionnel à l'aimantation locale vue par la sonde RMN, le facteur de proportionnalité étant le couplage hyperfin A.

Intéressons-nous maintenant à la géométrie du composé $Y_2BaNi_{1-x}Mg_xO_5$. Les spins 1 sont portés par les ions Ni^{2+} qui s'alignent en chaînes. Les impuretés non magnétiques Mg viennent prendre la place de ces ions et coupent donc les chaînes de Haldane, libérant les excitations de spins 1/2. Dans les expériences de Tedoldi, la spectroscopie RMN est effectuée sur ^{89}Y qui se trouve approximativement au milieu de deux chaînes : le signal RMN doît donc être proportionnel à la somme de l'aimantation sur site des deux Ni situés sur différents segments de chaîne. La géométrie du composé est schématisée sur la figure IV.9.

À cause de la variation assez importante des longueurs de chaîne et la variation résultante de l'aimantation sur site, les pics satellites du spectre RMN sont élargis, comme nous le verrons plus tard. En moyennant sur un grand nombre de longueurs de chaîne, il est possible de reconstruire le spectre RMN à un facteur multiplicatif près.

En considérant que la distribution des impuretés non magnétiques est aléatoire, nous utilisons une distribution géométrique pour les tailles des chaînes. La probabilité d'avoir une chaîne de taille L est donnée par :

$$p(L) = x(1-x)^L, \tag{7}$$

où x est la concentration en impuretés. La longueur moyenne d'une chaîne est donnée par $\overline{L} = \sum_{l=0}^{\infty} lx(1-x)^l = 1/x - 1$, qui se réduit en $\overline{L} = 1/x$ si x est suffisamment

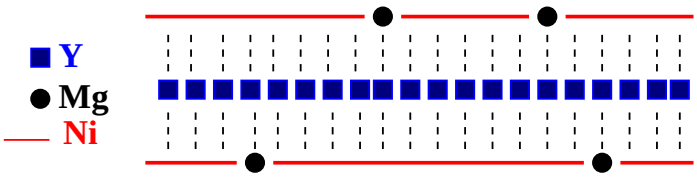


FIG. IV.9 – *Repésentation schématique de la géométrie du composé* $Y_2BaNi_{1-x}Mg_xO_5$. *Les chaînes de spin 1 portés par* Ni^{2+} *sont interrompues par le* Mg *non magnétique. L'* ^{89}Y, *l'élement dont on fait la spectroscopie RMN, se trouvant à peu près au milieu de deux chaînes, voit comme champ local l'aimantation locale des deux chaînes.*

petit. Conformément aux expériences de Tedoldi, nous avons pris $x = 5\%$. La distribution géométrique (7) est assez large et bien que les grandes chaînes soient moins probables que les petites, elles contribuent de façon significative aux spectres RMN. Nous avons donc calculé des profils d'aimantation pour des chaînes de grandes tailles, jusqu'à $L = 200$ pour $T \neq 0$ par MCQ et jusqu'à $L = 500$ à $T = 0$[3]. Ces calculs ont été effectués pour différentes températures entre $T \sim 0.2$ et ~ 1.0 pour une valeur du champ magnétique $h = 0.08 \simeq 14$ Teslas correspondant aux expériences de Tedoldi.

Les spectres RMN sont construits de la manière suivante : en accord avec la situation expérimentale, sont choisies aléatoirement (selon la distribution (7)) deux tailles de chaîne et la somme des aimantations des deux chaînes calculée *site par site*. Les deux sites dont l'aimantation est additionnée à chaque pas correspondent aux deux spins 1 les plus proches voisins de la sonde RMN dans les expériences. Lorsqu'une des deux chaînes est terminée, nous insérons un site à aimantation nulle (ceci correspond à l'impureté), retirons une nouvelle longueur de chaîne selon (7) et continuons le même processus jusqu'à ce que la limite thermodynamique soit atteinte. Le spectre RMN est alors donné par l'histogramme du champ local vu par un atome d'Yttrium, c'est-à-dire la somme de l'aimantation sur site des deux sites les plus proches de l'Y sur les deux chaînes. Cette procédure doit être proche de la situation expérimentale.

Pour pouvoir comparer ces résultats aux spectres expérimentaux, il suffit de changer d'échelle les axes x et y, ce que nous avons fait en ajustant le spectre expérimental sur le premier pic satellite du spectre numérique. L'axe y étant en unités arbitraires, ce changement d'échelle ne pose pas de problèmes. Pour l'axe x, le facteur d'échelle utilisé est de l'ordre de $0.8 - 0.9$, ce qui correspond approximativement au champ hyperfin $^{89}Y - Ni^{2+}$ expérimentalement déterminé à 1.3 Teslas [98].

3.2 Spectres numériques - résultats

Quel est le type de spectre auquel on peut s'attendre (au moins d'un point de vue qualitatif) ? Le pic central correspond à la situation où le champ local vu par l'Y

3. La probabilité d'avoir une chaîne de taille $L > 200$ est inférieure à 4.10^{-5} selon la distribution géométrique.

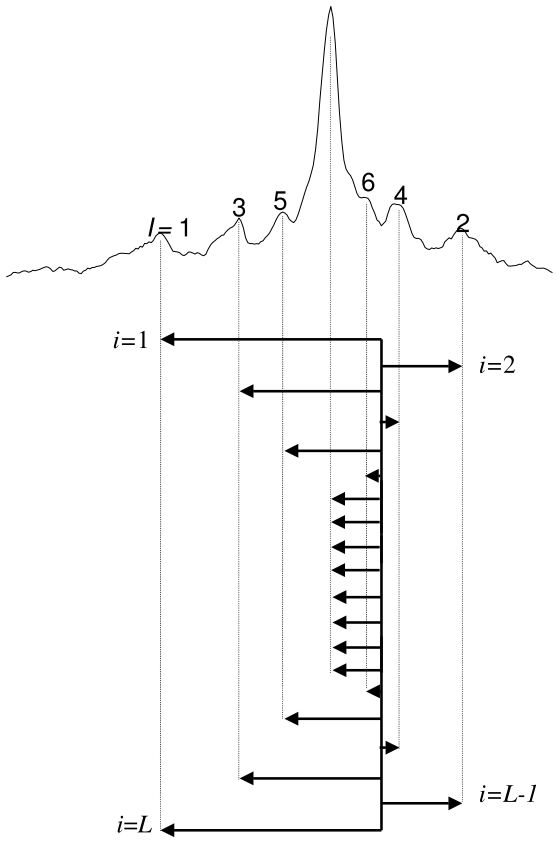


FIG. IV.10 – *Analogie schématique entre les pics RMN et les sites d'une chaîne ouverte (voir texte). Cette figure est tirée de la référence [101].*

s'annule soit parce que l'Y est proche du milieu de deux segments où l'aimantation sur site est proche de zéro, soit à cause de deux contributions approximativement égales et de signe opposé.

Si l'Y est plus proche du premier site d'un segment de chaîne, il doit ressentir un champ local fort dû à l'aimantation de bord de chaîne et cela doit se convertir en un déplacement *positif* fort par rapport au pic central dans le spectre RMN. En supposant une aimantation quasi nulle sur l'autre chaîne, nous devrions observer un pic satellite prononcé, correspondant à la valeur de l'aimantation sur site des premiers sites des chaînes. Avec des excitations exponentiellement localisées autour des fins de chaîne, la valeur la plus probable de l'aimantation sur l'autre chaîne est proche de zéro. Ce n'est pas strictement le cas et cela résulte en un élargissement des pics satellites.

Si l'Y est proche du deuxième site d'une des chaînes, nous devrions observer avec le même raisonnement un deuxième pic satellite dont le déplacement est cette fois-ci *négatif* par rapport au pic central. La distance au pic central de ce pic satellite doit être plus faible. Il est alors possible d'identifier les différents pics satellites avec l'aimantation sur site au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la fin d'une chaîne. Ceci est très clairement résumé dans la figure IV.10 : plus on s'éloigne de la fin de la

chaîne, plus les pics satellites correspondants doivent se rapprocher du pic central. À cause de l'élargissement significatif des pics, seuls les premiers pics satellites sont observables.

Il est théoriquement possible avec une faible probabilité que l'Y soit proche des premiers sites sur les deux chaînes à la fois (par exemple 1er site-1er site, 1er site-3ième site ou bien 2ième-2ième, 2ième-4ième ...). Cela devrait se traduire par des pics secondaires avec un déplacement de l'ordre de deux fois le déplacement des pics satellites principaux. Cette situation étant peu probable, l'intensité de tels pics doit être faible. Dans nos calculs à $T = 0$, nous observons toutefois un pic secondaire noté (1') à deux fois la valeur absolue du premier pic satellite (voir figure IV.12).

Comparons maintenant nos résultats numériques à la fois à la petite explication "théorique" que nous venons d'effectuer mais aussi aux résultats expérimentaux de Tedoldi (figure IV.11).

Les spectres numériques sont en excellent accord avec les résultats expérimentaux pour les trois plus grandes températures. Il faut noter toutefois que l'intensité du pic central est toujours sous estimée dans les simulations comparées aux résultats expérimentaux; ceci peut être dû à une distribution différente d'impuretés. Nous ne considérons pas de corrélations entre les impuretés dans notre modèle : nous discuterons brièvement de ce point dans la section 3.4.

Décrivons les spectres obtenus (figure IV.11) : il existe un pic central pour toutes les températures et sa position est décalée vers les valeurs positives d'aimantation au fur et à mesure que l'on augmente la température; ceci est dû au fait que les spins (de milieu de chaîne) sont plus facilement polarisés par le champ magnétique à haute température (voir partie 2.3). Les spectres sont plus larges à basse température car les profils d'aimantation y sont plus développés, comme nous l'avons vu dans la section 2.2.

En plus du pic central, plusieurs pics satellites peuvent être observés dans la figure IV.11 : comme expliqué, le déplacement par rapport au pic central correspond à la valeur de l'aimantation sur les sites voisins de la sonde. Nous avons numéroté sur les spectres les différents pics satellites selon la proximité à une fin de chaîne. Il est très clair que la structure magnétique des spins voisins d'une impureté est de mieux en mieux définie lorsque la température est abaissée. Par exemple, pour la plus haute température $T = 0.993$, seuls deux pics satellites sont visibles, alors que les autres pics satellites ne peuvent être distingués du pic central. Pour $T = 0.526$, jusqu'à six pics sont observés et davantage encore plus pour la température la plus basse $T = 0.27$. Cette température qui correspond au spectre à 77K dans les expériences de Tedoldi se situe en dessous du gap (environ égal à 100K pour ce composé). Les mesures RMN montrent dans ce cas un pic unique très large : aucun signal de pics satellites n'est observé. Tedoldi *et al.* proposent [98] une explication liée à la distribution des longueurs de chaîne : cet effet est bien pris en compte dans nos simulations et plusieurs pics satellites bien définis peuvent être observés à cette température. Il est quasiment certain que l'explication est ailleurs (voir une discussion dans la partie suivante).

Finalement, nous montrons dans la figure IV.12 le spectre obtenu à $T = 0$: on y observe de nombreux pics bien définis. En particulier, le pic secondaire noté (1')

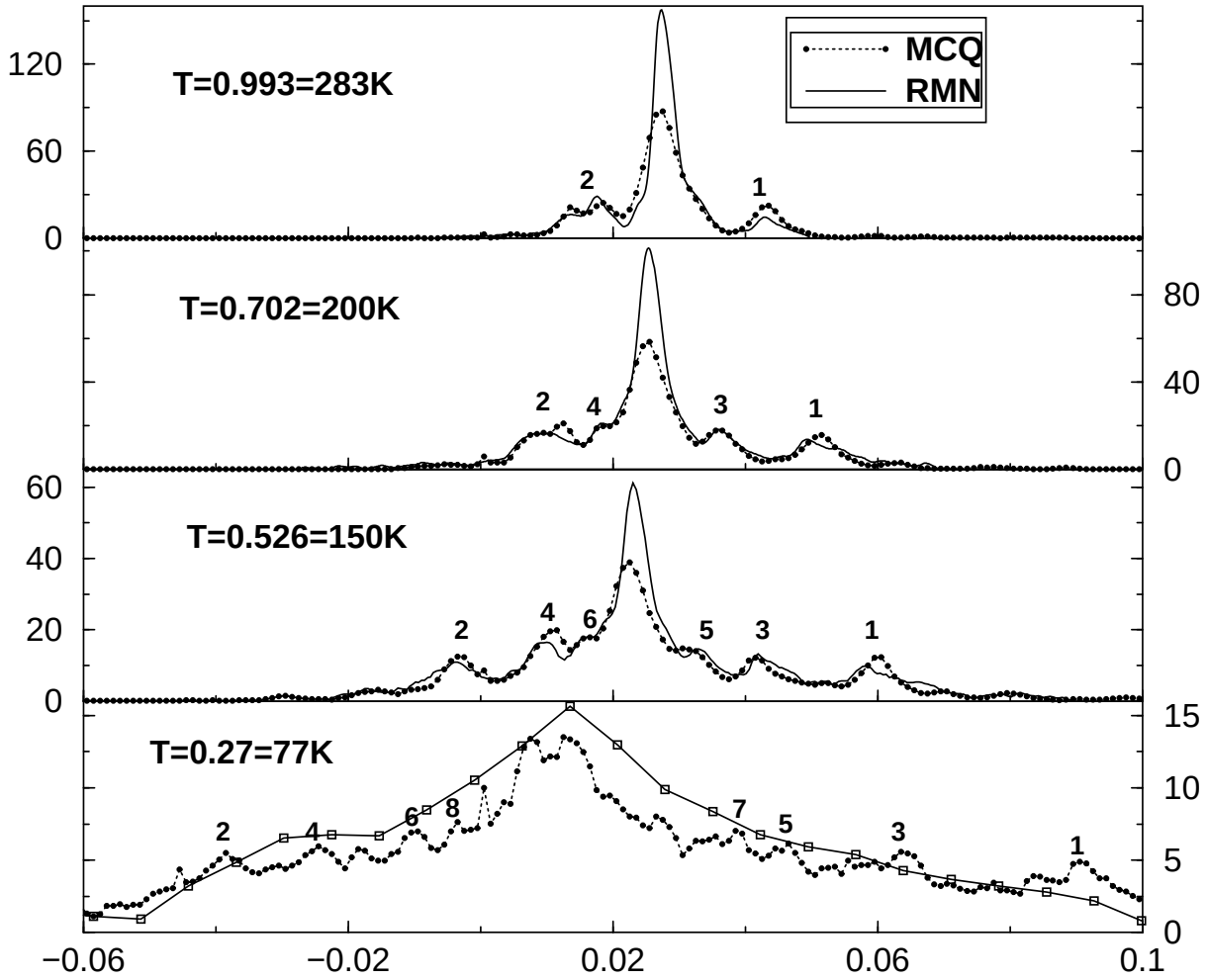


FIG. IV.11 – *Spectres RMN numériques et expérimentaux pour une concentration en impuretés* $x = 0.05$ *à* $T = 0.993$, 0.702, 0.526 *et* 0.270. *Les résultats numériques sont obtenus avec des simulations MCQ à champ et température finis pour des longueurs de chaînes allant jusqu'à* $L = 200$. *Notons que le dernier spectre expérimental a été obtenu avec moins de résolution que pour les autres températures (la séparation entre les points correspond à la résolution expérimentale).*

correspond au cas évoqué précedemment où l'Y se situe proche de deux fins de chaînes. Malheureusement, il n'existe pas de spectres RMN expérimentaux obtenus à très basse température qui nous aurait permis d'effectuer une comparaison avec ce dernier calcul.

3.3 Discussion

Les résultats présentés dans ce chapitre montrent clairement que les excitations de spins 1/2 sont observables en champ magnétique à des températures au-delà du gap. D'un point de vue théorique, il est connu que le gap Δ de la chaîne de spin 1 correspond à une branche à un seul magnon pour $k = \pi$. Autour de $k = 0$, un conti-

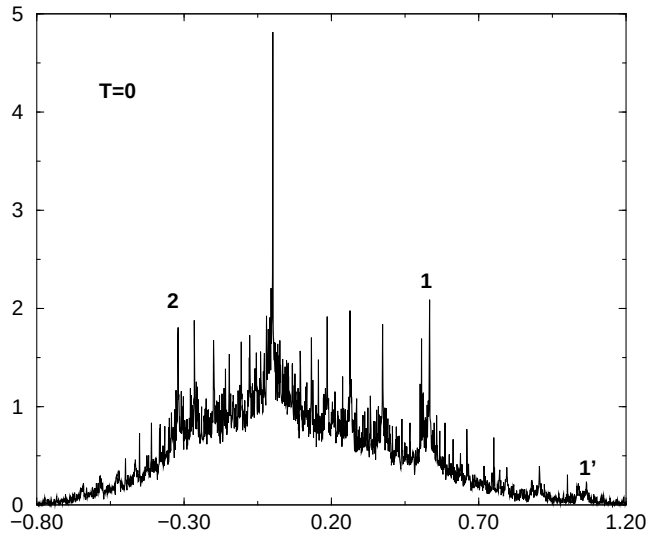


FIG. IV.12 – *Spectre RMN numérique pour une concentration en impuretés $x = 0.05$ à $T = 0$. Ces résultats ont été obtenus par DMRG à température et champ nuls dans le secteur $S^z_{tot} = 1$. Des longueurs de chaînes jusqu'à $L = 501$ ont été utilisées dans ce calcul. Le pic marqué $1'$ correspond à la situation où le noyau RMN est situé a proximité de deux fins de chaînes (voir texte).*

nuum à deux magnons doit commencer à une énergie proche de 2Δ et un continuum à trois magnons pour $k = \pi$ pour une énergie autour de 3Δ [102]. Il est alors logique de s'attendre à ce que les excitations de spin 1/2 soient toujours observables jusqu'à ce que les continua à deux et trois magnons soient peuplés thermodynamiquement, c'est-à-dire pour des températures de l'ordre de $3\Delta \simeq 300$K pour ce composé.

Des différences notables existent entre nos résultats numériques et les résultats expérimentaux pour la température la plus basse $T = 77$K. Comme le suggèrent Tedoldi *et al.* [98], l'anisotropie sur site ou les couplages interchaînes pourraient en principe avoir un rôle important. Cependant, étant donné la valeur de ces énergies $D \simeq 8$K et $J_\perp < 2$K, il est peu probable que cela ait une influence pour une valeur si grande de la température. Le couplage interchaîne en particulier, dont on sait (voir chapitre V) qu'il peut avoir une valeur critique faible, ne semble être pertinent qu'à des températures très basses ($T \simeq 4$K) dans les expériences de Payen *et al.* [103] sur le même composé dopé $Y_2BaNi_{1-x}Mg_xO_5$. De même, les effets dus à la distribution large des longueurs de chaîne ne peuvent être tenus responsables d'un tel désaccord.

Le caractère unidimensionnel ne pouvant être spécialement remis en cause, il reste possible que les expériences de RMN n'aient pas été effectuées avec une résolution suffisante pour le dernier spectre[4] Cela n'est pas impensable étant donnée la faible résolution expérimentale (donnée par les carrés dans la figure IV.11) pour ce spectre à $T = 77$K. En effet, il semblerait que des expériences plus récentes de RMN[5] sur le même composé permettent d'observer les pics satellites absents dans

4. F. Tedoldi, communication privée.
5. J. Bobroff, communication privée.

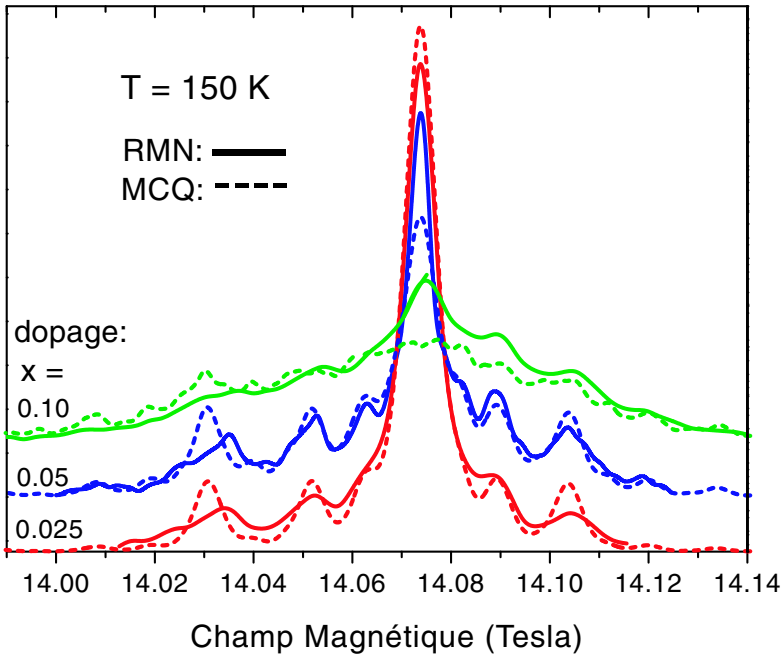


FIG. IV.13 – *Spectres RMN numériques et expérimentaux pour une température* $T = 0.526 = 150K$ *pour des concentrations en impuretés* $x = 0.025$, 0.05 *et* 0.1. *Notons ici que l'axe des* x *est ici le vrai champ magnétique imposé dans les expériences RMN.*

les spectres de Tedoldi *et al.* pour cette gamme de température située en dessous du gap.

3.4 Dépendance au dopage des spectres RMN

Une autre source de différence entre les expériences et les calculs numériques peut se situer au niveau de la distribution des longueurs de chaînes.

Dans une série d'expériences plus récentes[6], Horvatić et Tedoldi ont effectué des mesures RMN sur des échantillons de $Y_2BaNi_{1-x}Mg_xO_5$ avec différents dopages $x = 0.025$,0.5 et 0.1. Les résultats de leurs mesures sont montrés figure IV.13 en traits pleins. Nous avons effectué des calculs MCQ pour différentes concentrations en impuretés; nos résultats sont représentés en lignes pointillées. La température est ici $T = 150K$ où nous obtenons comme vu précédemment un accord correct entre les spectres numériques et expérimentaux pour une concentration en impuretés de $x = 5\%$.

Étudions ces spectres brièvement. Nous remarquons que pour $x = 0.1$, le pic central est encore clairement visible pour le spectre expérimental alors qu'il a quasiment disparu dans le spectre numérique. Cette tendance semble progressive lorsque

6. M. Horvatić et F. Tedoldi, non publié.

la concentration en impuretés est augmentée. Ceci signifie que dans le composé, les chaînes sont en moyenne plus longues que dans les simulations (le pic central recevant la contribution des milieux de chaînes).

Ces résultats remettent donc en cause (en tout cas à fort dopage) le caractère aléatoire de la répartition en impuretés dans le calcul numérique. Pour obtenir une situation plus conforme à la réalité, on pourrait imaginer des interactions attractives entre impuretés, formant ainsi des amas et créant de ce fait des chaînes plus longues. Ceci reste très spéculatif.

Un autre effet à souligner[7] est qu'à faible dopage, les pics satellites semblent légèrement plus larges que dans les simulations. Ceci n'est pas très rassurant pour une détection expérimentale des pics satellites à plus basse température : étant donné que les simulations (voir par exemple le spectre à $T = 77K$ de la figure IV.11) prévoient un élargissement notable du spectre, il sera encore plus difficile d'observer des pics satellites expérimentaux encore plus larges.

Les résultats de cette dernière section montrent donc qu'il faut probablement modifier la distribution des longueurs de chaînes dans le modèle théorique si l'on souhaite obtenir une correspondance précise entre simulations et expériences pour une gamme plus large de dopage.

3.5 Perspectives

Les différentes perspectives ouvertes par ce travail peuvent se classer principalement en deux catégories.

La première consiste en l'étude systématique d'impuretés dans des chaînes de Haldane, qu'elles soient magnétiques ou non. Ainsi, l'ajout de spins 1/2 dans une chaîne de spin 1 ouvre des états à l'intérieur du gap de Haldane [104] et la spectroscopie RMN, appuyée par des calculs Monte Carlo Quantique, peuvent permettre de comprendre ce qu'il se passe *localement* autour de l'impureté. Des premiers résultats[5] concernant la chaîne Y_2BaNiO_5 dopée avec des ions magnétiques Cu (portant un spin 1/2) semblent montrer des spectres qualitativement proches de ceux obtenus avec un dopage non-magnétique. Cependant, une *réduction* de la largeur du spectre est notable. Des calculs Monte Carlo Quantique préliminaires semblent reproduire ces résultats lorsque les spins 1/2 sont couplés faiblement de façon antiferromagnétique avec les spins 1 les plus proches. Ce sujet constitue une piste prometteuse pour poursuivre cette étude.

Une seconde possibilité consiste à considérer l'effet d'impuretés non-magnétiques, cette fois-ci dans des systèmes de Haldane *bidimensionnels*. Comme nous le verrons dans le chapitre V, des chaînes de Haldane faiblement couplées présentent toujours un gap de spin. Il a été suggéré (voir par exemple les références [105, 106]) que les liquides de spin bidimensionnels pouvaient s'ordonner à $T = 0$ en présence d'impuretés non magnétiques, grâce à la mise en ordre de moments magnétiques localisés autour des impuretés (ici, ce sont les spins 1/2 de bord de chaîne). Ce phénomène d'ordre par le désordre a été vérifié à la fois numériquement [107, 108, 109] et expérimentalement [110, 111].

7. M. Horvatić, communication privée.

Dans le cas du matériau $PbNi_2V_2O_8$ composé de chaînes de spins 1 faiblement couplées, un ordre antiferromagnétique a été observé lorsque ce composé était dopé avec du Mg non magnétique [112]. Nous avons observé cet effet pour des chaînes de spin 1 faiblement couplées ($J^{\perp} = 0.02$), mais la difficulté numérique de cette étude[8] nous a empêché de conclure sur l'existence d'une concentration critique x_c pour lequel l'ordre antiferromagnétique apparaît. Yasuda *et al.* obtiennent $x_c = 0$ (c'est-à-dire que l'ordre magnétique apparaît aussi faible que soit la concentration en impuretés) par des calculs de Monte Carlo Quantique similaires aux nôtres [109], mais ces calculs sont en fait limités à $x = 0.02$, pour des raisons techniques analogues à celles énoncées.

Il nous apparaît que la proposition $x_c = 0$, qui semble tout à fait correcte pour des liquides de spins composés de spins 1/2, n'est peut-être pas valide pour des chaînes de Haldane faiblement couplées. Pour vérifier ceci, il faudra attendre soit de nouveaux ordinateurs plus puissants, soit une avancée algorithmique. Le résultat d'une telle étude sera à la fois intéressant d'un point de vue théorique, mais aussi en relation directe avec les expériences.

8. Il faut simuler plusieurs réalisations du désordre sur des systèmes très grands à très faible température $\beta > 1000$.

Chapitre V

Chaînes de Haldane couplées

1 En route vers l'ordre magnétique

Nous avons vu dans le chapitre IV que la chaîne de spins 1 a pour état fondamental un liquide de spins ne présentant pas d'ordre à longue portée. D'un autre côté, le réseau carré de spins 1 (couplés par un échange antiferromagnétique) présente lui un ordre de type Néel à $T = 0$ (résultat exact obtenu dans les références [113, 114]). Il y a donc une transition de phase à température nulle vers un état ordonné lorsque l'on passe d'un modèle unidimensionnel à un modèle en deux dimensions.

Il existe essentiellement deux manières de passer de $d = 1$ à $d = 2$: soit en augmentant progressivement le nombre de chaînes, soit en considérant un réseau anisotrope où les interactions interchaînes sont plus faibles que les interactions intrachaînes. Le premier cas a révélé une physique très surprenante, celle des échelles de spins [115] : par exemple, les échelles de spins 1/2 possédant un nombre pair de montants présentent un gap de spin, alors que les échelles de spins ayant un nombre impair de montants n'en ont pas. Bien qu'il existe plusieurs réalisations expérimentales d'échelles de spins, la seconde situation (réseau anisotrope) se trouve génériquement plus proche des vrais matériaux. En effet, tous les composés considérés comme unidimensionnels possèdent un couplage interchaîne résiduel.

Nous allons par la suite nous placer dans le cadre de réseaux anisotropes (voir figure V.1). Les motivations d'une telle étude sont plurielles. Comme nous l'avons vu dans le chapitre IV, plusieurs composés répondant à la physique de Haldane sont connus. Une étude du rôle du couplage interchaîne est alors directement pertinente pour comprendre les expériences sur ces composés. Comment se fait-il que, par exemple, certains s'ordonnent à basse température (par exemple $CsNiCl_3$), et d'autres non (Y_2BaNiO_5), alors que le couplage interchaîne semble négligeable dans les deux cas ? D'un point de vue théorique, cette étude se place dans le cadre des transitions de phase quantiques, c'est-à-dire des transitions à température nulle dirigées par un paramètre extérieur (ici le couplage interchaîne). Enfin, d'un point de vue numérique, nous allons introduire une méthode Monte Carlo auto-adaptante particulièrement efficace pour la recherche et l'étude de points critiques quantiques.

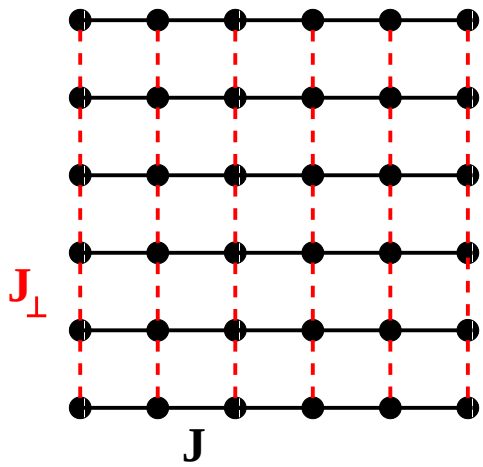


FIG. V.1 – *Chaînes de Haldane faiblement couplées par un couplage interchaîne* $J^{\perp}$.

1.1 Contexte général de cette étude

Dans cette partie le modèle suivant sera considéré, mettant en scène des chaînes de Haldane couplées par un échange perpendiculaire $J_{\perp}$:

$$H = \sum_{i=1}^{L} \sum_{j=1}^{L_y} \left[\mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i+1,j} + J^{\perp} \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i,j+1} \right] . \tag{1}$$

Que savons-nous de ce genre de systèmes ? Comme présenté dans l'introduction, nous connaissons très bien la physique pour deux valeurs de $J^{\perp}$: pour $J^{\perp} = 0$, il s'agit de chaînes de Haldane découplées (le fondamental est un liquide de spins) alors que l'ordre antiferromagnétique de type Néel s'établit pour $J^{\perp} = 1$. Il existe donc une valeur $J_c^{\perp}$ pour laquelle l'ordre magnétique apparaît.

Pour des spins 1/2 dans la même situation, il semble maintenant établi [116, 117, 118] que $J_c^{\perp} = 0$, c'est-à-dire que l'ordre apparaît à $T = 0$ pour une valeur infinitésimale du couplage interchaîne. La chaîne de spins 1/2 présentant elle-même un quasi-ordre à longue portée, il n'est pas surprenant de voir qu'une petite perturbation, aussi faible soit elle, va emmener le système vers l'ordre magnétique.

Dans le cas de spins 1 et puisque le système unidimensionnel présente un gap Δ, un argument naïf nous donne $J_c^{\perp} \simeq \Delta$: il faut apporter une énergie de l'ordre du gap pour ordonner le système. Nous allons voir par la suite que cet argument n'est pas tout à fait exact. En effet, bien que $J_c^{\perp}$ soit non nul, il a une valeur particulièrement faible comparée au gap de Haldane.

Les études précédentes sur ce problème reposaient en général sur des approximations lorsqu'il s'agissait de calculs analytiques, et étaient limitées en taille ou en précision lorsqu'il s'agissait de simulations numériques. Ainsi, Azzouz et Douçot [119] obtiennent par bosonisation $J_c^{\perp} \simeq 0.0019$. Sakai et Takahashi [120, 121] trouvent une borne inférieure $J_c^{\perp} \geqslant 0.025$ par diagonalisation exacte couplée avec une approximation de champ moyen. Koga et Kawakami [122] obtiennent par une méthode de type *cluster expansion* $J_c^{\perp} = 0.056(1)$; Kim et Birgeneau [118] trouvent

quant à eux $J_c^\perp = 0.040(5)$ par Monte Carlo Quantique. Seule cette dernière étude ne reposait sur aucune approximation (si ce n'est la température finie et la discrétisation de Trotter) et se trouve être la plus fiable.

Dans l'idée de clarifier ces résultats divers, nous avons simulé ce modèle par des techniques de Monte Carlo Quantique (MCQ) en temps continu, en proposant une méthode particulièrement adaptée à la localisation de points critiques quantiques. Très récemment, en utilisant les mêmes algorithmes MCQ, Matsumoto *et al.* [123] ont obtenu avec une grande précision $J_c^\perp = 0.043648(8)$. Les résultats que nous allons présenter sont en parfait accord avec cette valeur obtenue par une méthode plus "traditionnelle" et plus onéreuse en temps de calcul.

1.2 Contexte des transitions de phase quantiques

La transition que nous allons étudier est une *transition de phase quantique* (TPQ). A l'opposé des transitions de phase thermales dirigées par la température T, les TPQ sont contrôlées par un paramètre extérieur λ qui peut renforcer les fluctuations quantiques. Les phénomènes critiques associés aux TPQ, lorsque λ se rapproche d'une valeur critique λ_c séparant une phase ordonnée d'une phase désordonnée à $T = 0$, peuvent être influencés par le caractère quantique et donner lieu à de nouvelles classes d'universalité. Pour une discussion poussée sur les différentes caractéristiques des transitions de phases quantiques, on consultera le livre de Sachdev [124].

La classe d'universalité est caractérisée par ses exposants critiques qui peuvent être définis de la même manière que dans le cas de transitions de phase classiques. Dans la suite, on suivra la présentation de Troyer *et al.* [125]. Le paramètre critique est l'écart au point critique $t = \lambda - \lambda_c$ (on considère que $\lambda > \lambda_c$ correspond à la phase désordonnée). Ainsi la longueur de corrélation diverge comme :

$$\xi \sim t^{-\nu}, \tag{2}$$

définissant l'exposant critique ν. Un problème quantique en dimension d est équivalent à un problème classique en dimensions $d+1$ (voir décomposition de Trotter-Suzuki au chapitre II), la nouvelle dimension étant le temps imaginaire. Ici à $T = 0$, le système est aussi infini dans cette direction, et la longueur de corrélation dans le temps imaginaire diverge d'une autre manière :

$$\xi_\tau \sim t^{-z\nu}, \tag{3}$$

où l'exposant dynamique z n'est pas nécessairement égal à l'unité (les directions d'espace et de temps imaginaire ne sont pas équivalentes). De même l'échelle d'énergie correspondante (le gap de spin dans notre cas) s'annule comme $\Delta \sim t^{z\nu}$.

Enfin, parmi d'autres quantités, le paramètre d'ordre (l'aimantation alternée m_s dans notre cas) devient non nul comme $m_s \sim (-t)^\beta$ et la fonction de corrélation associée diverge en loi de puissance de la distance $G(r) \sim r^{-(d+z-2+\eta)}$ pour $\lambda = \lambda_c$, la dimension d dans la formulation classique étant remplacée par la dimension effective $d + z$.

Tous ces exposants sont liés par la relation d'*hyperscaling* (super-loi d'échelle) suivante :

$$2\beta = (d + z - 2 + \eta)\nu. \tag{4}$$

À quel type de transition de phase quantique peut on s'attendre dans notre cas ? La nature antiferromagnétique du problème nous donne $z = 1$. Malgré certains doutes émis dans des études plus anciennes [126], il semble maintenant établi [125, 127] que les transitions de phase quantiques pour des systèmes quantiques antiferromagnétiques en deux dimensions sont dans la même classe d'universalité que les transitions de phase thermiques du modèle classique correspondant en trois dimensions. En particulier, dans notre cas, les exposants critiques sont les mêmes que ceux du modèle de Heisenberg classique pour $d = 3$. Ceci est un résultat de théorie des champs [128, 129, 130, 131] prouvant l'équivalence du modèle de Heisenberg antiferromagnétique avec le modèle σ non linéaire quantique en deux dimensions, puis avec son équivalent classique à $d = 3$.

Nous testerons ces prédictions par la suite, et, pour ce faire introduirons dans la prochaine section un algorithme simple, utile pour localiser automatiquement les points critiques quantiques.

2 Méthodes auto-adaptantes

Comment localiser avec grande précision un point critique dans des simulations sur des réseaux de taille finie ? En général, les méthodes proviennent du domaine du Monte Carlo classique, et sont assimilables à des croisements de cumulants de Binder [61] ou à des maxima de cumulants généralisés [132]. Ces méthodes sont en général combinées à des méthodes de repondérage d'histogramme (*histogram reweighting*) [59, 60]. Ces méthodes sont très précises, mais aussi très coûteuses car on n'a pas *a priori* d'estimation pour le paramètre critique. Qui plus est, les techniques d'histogramme ne sont que peu ou pas généralisables au cas quantique (voir une rapide présentation de travaux en cours dans ce sens dans la section 6 du chapitre III).

Dans les simulations en Monte Carlo Quantique, une méthode souvent utilisée [127] pour localiser le point critique est de calculer le ratio ξ/L (ξ est la longueur de corrélation, L la taille du système). Au point critique, il est simple de voir par des arguments d'analyse de taille finie que cette quantité est indépendante de la taille du système. Ainsi, il suffit de déterminer ce ratio pour différentes tailles de systèmes et différentes valeurs du paramètre de transition, de tracer les courbes correspondantes et de déterminer le point où toutes les courbes se croisent. C'est par exemple la méthode employée par Matsumoto *et al.* [123] dans la transition de phase quantique qui nous intéresse. Sur la figure V.2, on observe très bien ce croisement autour de $J_c^\perp \simeq 0.0436$. Il est aussi possible d'obtenir les exposants critiques par un ajustement de différentes quantités autour du point critique. Il apparaît enfin clairement, en comptant le nombre de points sur cette figure, que l'effort pour obtenir cette valeur est énorme d'un point de vue numérique.

N'étant intéressé que par le point critique, on peut se demander s'il n'existe pas

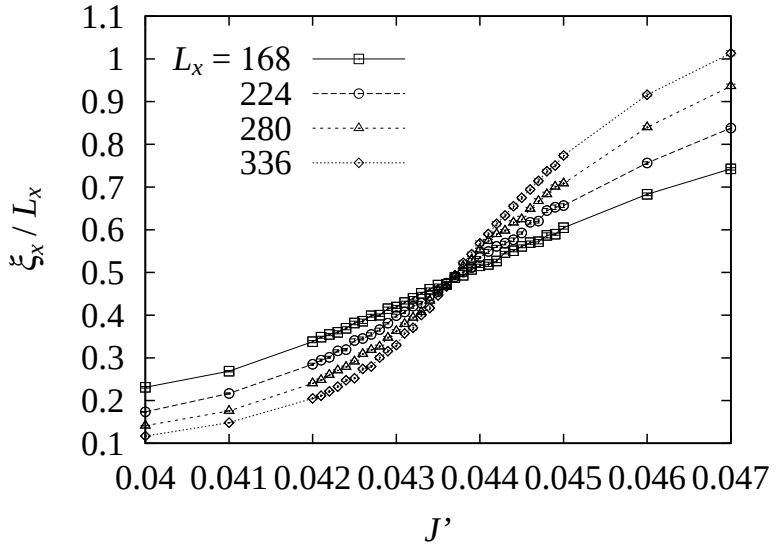


FIG. V.2 – *Matsumoto et al. calculent le ratio ξ/L pour différentes tailles de réseaux. Ces courbes se croisent au point critique de la transition étudiée : on lit ici $J_c^{\perp} \simeq$* 0.0436 *(figure extraite de la publication [123]).*

des méthodes moins coûteuses en termes de temps de calcul pour simuler *directement* la physique du point critique. Il se trouve que ce genre de méthodes existe dans le cadre de simulations de systèmes classiques, et nous les appellerons méthodes auto-adaptantes.

2.1 Méthodes auto-adaptantes dans le cas classique

Pour la simulation de modèles classiques, plusieurs algorithmes s'ajustant automatiquement au point critique ont été proposés. En utilisant des idées de percolation par invasion, Machta *et al.* [133] ont proposé un algorithme nommé *invaded cluster algorithm* où des blocs critiques sont directement engendrés, donnant la température critique comme un résultat de la simulation

Plus récemment, Tomita et Okabe [134] ont suggéré une méthode plus simple pour calculer la température critique de modèles de Potts-Ising en utilisant les algorithmes de blocs classique. Dans les algorithmes de Swendsen-Wang [19] ou de Wolff [20] (voir chapitre II), ils proposent d'augmenter ou de diminuer la probabilité p de connecter un spin à un bloc *durant* la simulation Monte Carlo. Le choix d'augmenter ou de diminuer p, et ainsi la température, dépend de la percolation ou non des derniers blocs rencontrés durant la simulation. Si, dans le dernier pas Monte Carlo effectué, aucun des blocs Swendsen-Wang ne percole, cela dénote une configuration de type haute température, et p doit être augmentée (la température diminuée) pour se rapprocher de T_c. Par contre, si au moins un des blocs percole, la configuration est plutôt de type basse température, et il faut diminuer p. Ainsi, la distribution des blocs se dirige vers celle du point critique, la relation entre la percolation de clusters et le point critique étant connue pour ce genre de modèles classiques [135, 136].

La généralisation de ces algorithmes pour les simulations de systèmes quantiques

serait clairement très désirable, mais se révèle difficile pour différentes raisons. Premièrement, la structure des boucles de l'algorithme du même nom (voir chapitre II) est plus complexe que dans le cas classique et leur relation avec les problèmes de percolation est moins claire. Pendant la création d'une boucle, il n'est pas possible de donner la probabilité pour qu'un simple "spin" soit ajouté. Deuxièmement, l'exposant critique dynamique z, qui relie les fonctions de corrélations dans l'espace réel et le temps imaginaire, n'est en général pas connu[1]. Donc un engendrement direct de boucles critiques apparaît difficile.

Nous proposons alors de généraliser l'approche de Tomita et Okabe aux simulations de Monte Carlo Quantique effectuées avec l'algorithme de boucle. Nous allons montrer qu'ajuster le paramètre de transition pendant la simulation selon le fait que la longueur de corrélation est plus grande ou plus petite qu'une certaine valeur, permet une détermination très précise du point critique quantique. Les exposants critiques associés à cette transition peuvent être aussi directement obtenus.

2.2 Description de la méthode

La méthode proposée est proche de celle suggérée par Tomita et Okabe [134]. Pendant la simulation Monte Carlo, une variable estimant à quel point le système est critique, dans notre cas la longueur de corrélation ξ, est continûment observée conduisant à modifier le paramètre de contrôle λ, selon le fait que la variable critique satisfait ou non un certain critère. λ peut être la température T (comme dans la référence [134]) ou directement un paramètre du hamiltonien gouvernant la transition. L'algorithme va alors équilibrer λ à une valeur moyenne $\lambda_c(L)$ dépendant de la taille L du système, où le critère édicté est satisfait exactement. La chose la plus difficile dans cet algorithme est de choisir un critère numérique simple indiquant que l'on se trouve dans une phase ordonnée ou non. Nous discuterons le choix d'un critère efficace un peu plus loin. Ayant déterminé la valeur critique $\lambda_c(L)$ pour plusieurs valeurs de L, il est possible d'obtenir λ_c en extrapolant vers la limite thermodynamique.

a) Procédure détaillée

Nous décrivons ici la méthode pour un système de taille linéaire L. Dans un premier temps, il est nécessaire de choisir une valeur initiale $\lambda_0(L)$ pour le paramètre de contrôle λ. $\lambda_0(L)$ peut être choisi selon une intuition physique du point critique, ou grâce au résultat d'une simulation pour un système de taille plus petite. Dans la plupart des cas, il est utile de choisir $\lambda_0(L)$ dans une phase à longueur de corrélation finie.

Un certain nombre N_{therm} de pas Monte Carlo de thermalisation est alors effectué pour aider l'algorithme à localiser grossièrement $\lambda_c(L)$. Durant ces pas, λ est modifié par $\pm\Delta_0\lambda$ tous les N_{ch} pas selon le critère que nous évoquerons plus tard. Les N_{ch} pas Monte Carlo sont utiles pour "thermaliser" le système à la valeur actuelle de λ afin d'éviter des problèmes d'autocorrélation entre les configurations. Dans la référence [134], λ est changé à chaque pas Monte Carlo. Tomita et Okabe

1. Dans le cas particulier de la transition de phase quantique que nous allons étudier, nous avons $z = 1$ (la relation de dispersion pour les ondes de spins antiferromagnétiques est linéaire).

argumentent que dans la limite $\Delta\lambda \to 0$, l'ensemble échantillonné par l'algorithme est asymptotiquement l'ensemble canonique, ce qui signifie que chaque configuration est automatiquement équilibrée pour une nouvelle valeur de λ très proche de celle actuelle. Il nous apparaît toutefois plus sûr d'effectuer quelques pas Monte Carlo supplémentaires avant de changer λ de nouveau. On peut noter que $\Delta_0\lambda$ n'est pas nécessairement fixe, mais peut être par exemple modifié linéairement de $\Delta_0\lambda$ à une valeur plus petite $\Delta\lambda$ utilisée dans le reste de la simulation : cela permet de réaliser des grands pas de λ au début de la simulation où $\lambda_0(L)$ est loin de sa valeur critique $\lambda_c(L)$.

Quand ces N_{therm} pas Monte Carlo sont terminés, N_{mes} pas de mesure sont effectués avec la même procédure : chaque N_{ch} pas, λ est modifié d'une petite valeur fixe $\pm\Delta\lambda$ et les observables (dont λ) sont mesurées durant ces N_{ch} pas. À la fin des N_{mes} pas, nous obtenons une distribution de λ centrée autour de la valeur critique $\lambda_c(L)$ pour cette taille L. Pour l'interprétation de la distribution finale de λ, il est préférable d'utiliser une valeur fixe de $\Delta\lambda$ pendant les N_{mes} pas de mesure. Typiquement, on choisit $\Delta\lambda \sim 1/V$ où V est le volume du système.

Pour pouvoir déterminer λ_c, la dernière étape consiste à répéter ce calcul pour différentes valeurs de L puis à extrapoler vers la limite thermodynamique. Ceci va nous permettre d'obtenir l'exposant de la longueur de corrélation ν; les autres exposants pouvant aussi être obtenus dans cette étape avec une analyse de taille finie d'autres observables.

b) Choix d'un critère

Discutons maintenant d'un critère pour augmenter ou diminuer λ. Dans les références [133] et [134], deux critères basés sur la percolation des blocs ont été introduits. Ces critères, nommés critères d'extension et topologique dans le cadre des simulations classiques [133], peuvent en principe aussi être utilisés dans les simulations de MCQ avec l'algorithme de boucle : la percolation ou l'enroulement (le *winding*) des boucles peuvent être choisis pour déterminer le changement de valeur pour λ. Cependant, l'interprétation dans ce cas est moins claire : des calculs préliminaires ont montré que la distribution exponentielle des tailles de boucles était large et peu utile pour déterminer λ_c. En particulier, cette distribution a peu de chances de changer qualitativement lorsque λ passe le point de transition suite aux effets de taille finie. Un algorithme basé sur la distribution des tailles de boucles à $T = 0$ et dans la limite thermodynamique pourrait cependant être intéressant à étudier.

Nous préférons choisir un critère différent : λ est modifié suivant une estimation de la longueur de corrélation ξ pendant les N_{ch} pas. Il s'agit du même type de critère que celui utilisé dans l'algorithme dit de "masse" (*fixed cluster algorithm*) [137]. Il est intéressant de noter que ce critère n'est pas nécessairement relié aux boucles de l'algorithme et peut probablement être utilisé dans d'autres simulations Monte Carlo ne jouissant pas d'algorithme de bloc. L'algorithme de boucle est cependant bien utile ici car il thermalise rapidement les configurations pendant les N_{ch} pas et il permet de plus l'utilisation d'estimateurs améliorés pour la longueur de corrélation (voir chapitre II). Il est utile d'effectuer un nombre N_{ch} conséquent de pas pour obtenir une bonne estimation de la longueur de corrélation. Enfin, notons que le

détail du critère n'est utile que d'un point de vue numérique : en effet, tous les critères imaginables devraient conduire à la même valeur de $J_c^\perp$ et des exposants critiques. La seule chose variant d'un critère à l'autre est le préfacteur devant toutes les lois d'échelle, ce qui va correspondre à la rapidité de l'algorithme à converger vers le point critique. C'est dans ce sens qu'il est utile d'avoir une idée de la difficulté numérique sous-jacente lorsque l'on choisit un critère.

Nous allons maintenant proposer deux critères concernant la longueur de corrélation. Le premier (A) est le suivant : si la longueur de corrélation calculée est plus grande que la taille du système ($\xi > L$), alors le système est considéré dans la phase ordonnée et λ est augmenté pour se diriger vers la phase désordonnée. Si $\xi < L$, λ est diminué. Le critère de sélection est donc :

$$\text{A}: \quad \xi = L. \tag{5}$$

La distribution de λ est alors enregistrée, et $\lambda_c(L)$ estimé pour chaque taille de réseau. Ce critère donne une bonne estimation de la valeur du point critique, mais ne réussira pas à déterminer les exposants critiques. Ceci est dû au fait qu'une estimation de ξ pour une taille de système telle que $\xi \simeq L$ souffre d'effets de taille finie prononcés. En particulier, l'extrapolation de $\lambda_c(L)$ vers la limite thermodynamique ne suit pas une simple loi d'échelle permettant une détermination des exposants critiques.

Il est bien connu d'un point de vue numérique que les corrections de taille finie sont réduites de façon significative lorsque la taille du réseau est plusieurs fois plus grande que la longueur de corrélation. Typiquement, si $L > 6\xi$, les effets de taille finie devraient être très faibles. Le second critère (B) sera donc :

$$\text{B}: \quad \xi = \frac{L}{6}, \tag{6}$$

pour limiter les corrections de taille finie.

3 Résultats et discussion

3.1 Application aux chaînes de Haldane couplées

Revenons dans cette dernière section au problème physique. Nous allons appliquer la méthode précédemment décrite pour l'étude de la transition de phase quantique entre la phase de Haldane et la phase de Néel pour des chaînes de spin 1 couplées. Ici notre paramètre de transition est $J^\perp$: $J^\perp$ est augmenté lorsque la longueur de corrélation ξ_x dans la direction des chaînes est trop faible (inférieur à L selon le critère A ou $L/6$ selon le critère B) et diminué si la longueur de corrélation est trop grande.

Nous avons utilisé l'algorithme de boucle en temps continu (voir chapitre II) en mettant à profit un grand nombre de ses fonctionnalités : simulations de spins $S = 1$ [22], estimateurs améliorés [37] pour le calcul de la longueur de corrélation selon la méthode du second moment [38], possibilité d'effectuer les simulations à

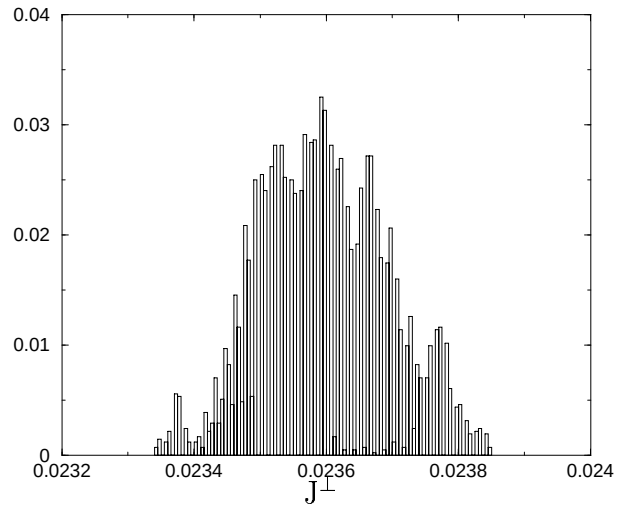


FIG. V.3 – *Histogramme de $J^{\perp}$ obtenu pour le réseau $L = 66$, $L_y = 10$ à $T = 0$ avec le critère B ($\xi = \frac{L}{6}$). La distribution est piquée autour de $J_c^{\perp}(66) = 0.0236(1)$.*

$T = 0$ [21] ... Le modèle (1) a été simulé sur des réseaux de taille $L \times L_y$. Pour les tailles les plus petites, des réseaux carrés ont été étudiés à $T = 0$; pour les systèmes les plus grands $L_y < L$ (avec $L_y \gg \xi_y$ où ξ_y est la longueur de corrélation dans la direction transverse), des températures finies (mais bien plus faibles que le gap de taille finie) ont été utilisés pour des raisons purement techniques.

3.2 Résultats

Sur la figure V.3 est représenté un exemple de distribution de $J^{\perp}$ obtenu pendant nos simulations pour $L = 66$ avec le critère B. La distribution est très piquée autour d'une valeur moyenne bien définie permettant une détermination facile de $J_c^{\perp}(L)$. En principe, il est possible d'extraire de l'étude de la variation avec L de ces histogrammes d'autres informations liées aux exposants critiques. Malheureusement, nous n'avons pas obtenu assez de statistiques pour exploiter une telle possibilité.

Dans la figure V.4, $J_c^{\perp}(L)$ est représenté en fonction de $1/L$ pour les deux critères A et B. Comme nous l'avons précisé précédemment, le critère A souffre d'importants effets de taille finie. En particulier, ce critère surestime toujours le couplage critique. Cela peut paraître contre-intuitif puisque la longueur de corrélation diverge à $J_c^{\perp}$. Cependant, à cause d'effets de taille finie, l'estimation de la longueur de corrélation ne dépasse la taille du système que lorsque l'on se place assez loin dans la phase antiferromagnétique. Pour un système fini, il y a toujours un gap qui limite la longueur de corrélation.

Dans le but d'extraire un exposant critique, nous estimons dans un premier temps les résultats par une loi de puissance :

$$J_c^{\perp}(L) = J_c^{\perp} + CL^{-a} \tag{7}$$

avec $J_c^{\perp}$ le couplage critique dans la limite thermodynamique et C une constante.

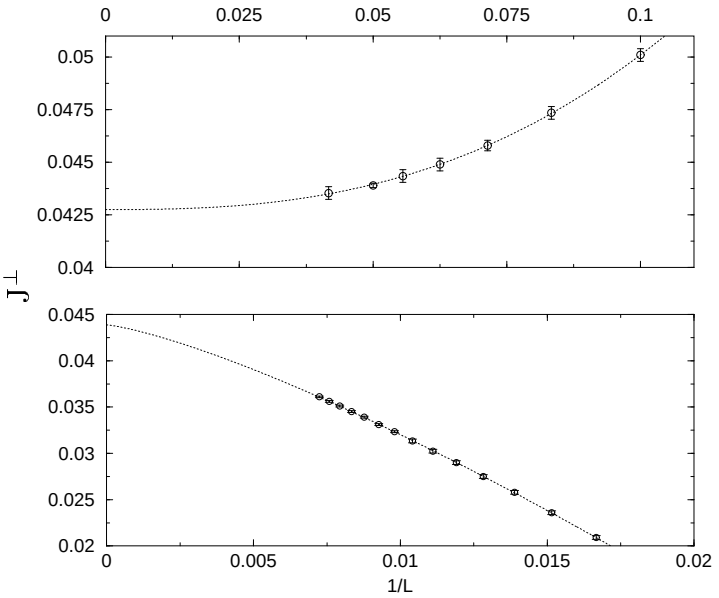


FIG. V.4 – $J_c^{\perp}(L)$ *en fonction de* $1/L$ *pour les deux critères A (haut), B (bas) utilisés. Les lignes sont les ajustements numériques à l'équation (7) et donnent* $J_c^{\perp} = 0.0428(4)$ *pour le critère A et* $J_c^{\perp} = 0.0438(4)$ *pour le critère B. Les valeurs de* $J_c^{\perp}(L)$ *trouvées pour le premier (respectivement second) critère sont toujours plus élevées (resp. plus faibles) que le couplage critique.*

Pour le critère B où $\xi = L/6$, nous avons $a = 1/\nu$ où ν est l'exposant de la longueur de corrélation. Pour le critère A, $a \neq 1/\nu$ à cause des effets de taille finie : la dépendance en L de $J_c^{\perp}$ est non triviale. Nous obtenons $J_c^{\perp} = 0.0438(4)$ et $\nu = 0.77(2)$ pour le critère B, et $J_c^{\perp} = 0.0428(4)$ pour le critère A. Les valeurs les plus certaines sont bien sûr les premières, mais on peut noter que même avec le critère A, il est possible d'obtenir une bonne estimation de $J_c^{\perp}$.

Nous pouvons essayer d'améliorer cette estimation en incluant une correction à l'analyse des effets de taille finie, bien qu'elle soit nettement plus petite pour le second critère. Par analogie avec les travaux précédents [138, 139, 140] sur l'analyse de taille finie, nous incluons une correction au premier ordre pour la longueur de corrélation :

$$\begin{aligned} \frac{L}{6} &= \xi - be^{-L/\xi} \\ \xi &= a(J_c^{\perp} - J_c^{\perp}(L))^{-\nu}. \end{aligned} \tag{8}$$

Nous obtenons alors $\nu = 0.72(2)$ et $J_c^{\perp} = 0.0436(2)$. En principe, des termes correctifs d'ordre supérieur peuvent être inclus, mais nous avons vérifié qu'ils étaient complètement négligeables. La valeur de $J_c^{\perp}$ déterminée est en parfait accord avec les calculs MCQ récents de Matsumoto *et al.* [123], et apparaît bien plus précise et certaine que des estimations plus anciennes [118, 119, 120, 121].

Une fois qu'une valeur correcte de $J_c^{\perp}(L)$ est obtenue, des estimations plus précises des autres exposants critiques peuvent être obtenues en effectuant des calculs

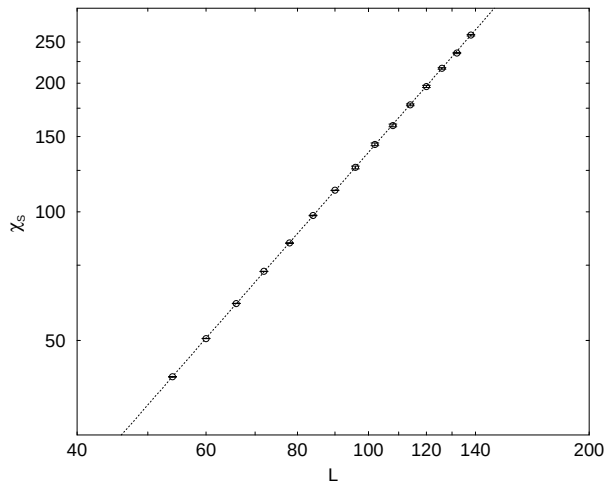


FIG. V.5 – *La susceptibilité alternée χ_s en fonction de L sur une échelle log-log. L'ajustement numérique en loi de puissance (9) représenté par la ligne continue donne $\eta = 0.038(3)$.*

directement à $J_c^{\perp}(L)$. La figure V.5 représente la dépendance en taille (en échelle log-log) de la susceptibilité alternée χ_s. Selon la théorie standard d'analyse de taille finie, la susceptibilité alternée diverge comme :

$$\chi_s(L) \sim L^{2-\eta}, \tag{9}$$

et ce, même avec $J_c^{\perp}(L)$ dépendant de L. Nous n'avons pas tenu compte ici de corrections de la forme (8). Nous obtenons pour cette estimation en loi de puissance $\eta = 0.038(3)$.

Les valeurs obtenues de η et ν sont en parfait accord avec les résultats de Matsumoto *et al.* [123]. Ces exposants sont très proches (égaux dans les barres d'erreur) de ceux du modèle de Heisenberg classique à trois dimensions [62, 63], confirmant la prévision que les transitions de phases quantiques pour des systèmes antiferromagnétiques bidimensionnels de Heisenberg appartiennent à la classe d'universalité du même modèle classique en trois dimensions (voir partie 1.2).

3.3 Discussion et perspectives

Tout d'abord discutons des résultats obtenus sur le problème physique considéré. La valeur déterminée pour le couplage interchaîne critique $J_c^{\perp} = 0.0436(2)$ est de façon surprenante bien plus faible (un ordre de grandeur) que le gap de Haldane $\Delta_H = 0.4106$. Il n'existe à notre connaissance aucune justification de ce résultat. Cela ne veut pas nécessairement dire que notre approximation intuitive $J_c^{\perp} \sim \Delta_H$ est irraisonnée, il y a simplement un facteur 1/10 non prévu. Bien sûr, il n'est pas possible de comparer cette valeur de $J_c^{\perp}$ aux couplages interchaînes des vrais matériaux. Non seulement d'autres effets rentrent en jeu (anisotropie etc.), mais surtout nous traitons ici d'ordre bidimensionnel à $T = 0$, alors qu'il s'agit dans les vrais matériaux d'ordre tridimensionnel à température finie. Il est certain que le

couplage interchaîne $J_c^{\perp}(d = 3)$ nécessaire à ordonner le système tridimensionnel est plus faible que ce couplage critique bidimensionnel, et on peut imaginer que $J_c^{\perp}(d = 3)$ est aussi d'un ordre de grandeur plus faible que $J_c^{\perp}(d = 2) = 0.0436(2)$ [2]. Cette valeur est d'ailleurs très raisonnable compte-tenu de ce que nous savons des résultats expérimentaux : $CsNiCl_3$ s'ordonne avec $J^{\perp} = 0.017$ alors que Y_2BaNiO_5 ne s'ordonne pas ($J^{\perp} < 5.10^{-4}$).

Les résultats obtenus pour les exposants critiques sont quant à eux bien conformes à notre attente : nous avons $\nu = 0.72(2)$ et $\eta = 0.038(3)$, comparables aux valeurs pour le modèle de Heisenberg tridimensionnel [62, 63]. Les prédictions d'universalité avaient déjà été sondées dans des travaux précédents [123, 125, 127]. Bien entendu, la précision est moins bonne en Monte Carlo Quantique que dans le cas de simulations Monte Carlo classique en trois dimensions car les difficultés techniques sont plus importantes dans le premier cas.

Regardons maintenant les différents avantages que peut procurer le genre de méthodes auto-adaptantes que nous proposons. Tout d'abord, cette méthode, facile à adapter pour l'étude d'autres transitions de phase (il s'agit d'une simple modification dans la partie principale du programme Monte Carlo), peut permettre un gain substantiel en terme de temps de calcul. En particulier, aucune connaissance de l'exposant dynamique z n'est nécessaire. Les autres méthodes plus "traditionnelles", comme l'utilisation de cumulants de Binder [61], demandent le calcul de la quantité critique (ici la longueur de corrélation ξ) pour plusieurs tailles pour de nombreuses valeurs du paramètre de contrôle ($J^{\perp}$) : cela apparaît clairement sur la figure V.2. La méthode que nous venons de présenter nécessite le calcul de cette quantité pour une taille de système, la valeur du paramètre de contrôle étant automatiquement déterminée par l'algorithme.

Commentons enfin le choix du critère : nous avons utilisé les critères $\xi = L$ et $\xi = L/6$ pour indiquer que notre système était ordonné ou non. La figure V.4 indique clairement que le premier critère surestime toujours $J_c^{\perp}$ tandis que le second le sous-estime. On pourrait alors penser qu'un critère du type $\xi = L/a$ avec $a \in [1 \ldots 6]$ donnerait, dès les plus petites tailles, une valeur plus fiable du point critique. Cela est tout à fait vrai puisque nous savons qu'au point critique $\xi/L = \text{Cte}$ (la constante étant ici $1/a$). Cependant, nous n'avons aucune intuition de cette constante avant d'effectuer les simulations ! Cette amplitude critique dépend des détails microscopiques du hamiltonien (elle était par exemple inférieure à 1 dans la référence [127]), mais aussi du rapport d'aspect (L_y/L_x par exemple ici) utilisé dans les simulations (pour la même transition de phase, Matsumoto *et al.* [123] trouvent une valeur proche de 2 pour un certain rapport d'aspect). Ainsi, n'ayant aucune connaissance de cette amplitude critique, il est préférable, au sens de notre méthode, de choisir une valeur de a grande (6 ou plus) et d'ensuite effectuer une analyse de taille finie plutôt que de trouver empiriquement une valeur de a qui minimise les corrections de taille finie, car proche de l'amplitude critique.

Comment poursuivre une telle étude numérique ? Comme nous l'avons déjà écrit, il nous a été impossible de trouver un critère numérique satisfaisant qui correspon-

2. Des calculs préliminaires semblent montrer que des chaînes de Haldane couplées dans un réseau cubique avec un couplage perpendiculaire $J^{\perp} = 0.01$ s'ordonnent à température finie.

drait à une percolation des boucles. Cela était en particulier dû à l'aspect infini du réseau dans la direction du temps imaginaire, puisque nous avons traité d'une transition de phase quantique. Nous avons alors choisi un autre critère plus approprié. Il apparaît toutefois possible que pour une transition de phase *à température finie*, il soit plus facile d'appliquer un tel critère de percolation.

Tomita et Okabe ont adapté très récemment leur algorithme au cas de modèles XY classiques [141]. Il pourrait être intéressant de voir si une méthode s'approchant davantage de cet algorithme que celle que nous venons de développer ne pourrait pas s'appliquer au modèle XY quantique. Par exemple à deux dimensions, nous savons que ce modèle possède une transition de phase de type Kosterlitz-Thouless [142]. Des premiers calculs effectués avec la méthode de Développement en séries stochastique (voir chapitre III, partie 3.4) combinée à un critère de percolation semblent prometteurs pour l'étude de cette transition.

Chapitre VI

Algorithme non local pour le modèle de Hubbard bosonique

Dans ce chapitre, nous présenterons un algorithme Monte Carlo non local pour un modèle de liens classique, qui est la représentation de Villain du modèle de Hubbard bosonique à $T = 0$. Après une introduction au modèle de Hubbard bosonique et aux diagrammes de phase qu'on peut y rencontrer, nous rappellerons dans quelle mesure une transformation de type Villain peut être effectuée sur sa représentation en intégrale de chemin afin de dériver un modèle classique équivalent. C'est pour ce modèle classique que nous avons développé un algorithme non local : nous introduirons dans la seconde partie cet algorithme et démontrerons son efficacité pour simuler le modèle équivalent pour la valeur $\mu = 0$ du potentiel chimique. Enfin, nous terminerons cette partie sur les perspectives ouvertes par l'utilisation de ce nouvel algorithme. Nous présenterons dans cette dernière partie des résultats préliminaires obtenus pour la valeur $\mu = 1/4$ du potentiel chimique dans le cas pur, et pour la valeur $\mu = 1/2$ dans le cas du désordre fort.

1 Motivations

Depuis la fin des années 70, l'absence de phase métallique en dimensions deux à $T = 0$ est communément admise pour des électrons libres, et ce car le moindre désordre va localiser ces électrons [143]. Par contre, lorsque les interactions entrent en jeu, la situation apparaît moins claire. Encore récemment, et selon un consensus, les interactions ne semblaient pas suffisantes pour empêcher cette localisation. Cependant, ces raisonnements ont été remis en cause par les expériences de Kravchenko [144] qui mettent en évidence une transition métal-isolant dans des échantillons bidimensionnels à haute mobilité. À l'heure actuelle, il n'existe pas d'explication théorique consensuelle pour ce phénomène (voir la revue [145] et références incluses).

Dans cette partie, nous ne traiterons pas de ce genre de systèmes mais travaillerons autour de systèmes bosoniques en dimension deux. Le cas bosonique est relativement différent. Dans le cas pur (sans désordre), la situation est assez claire :

à forte interaction, nous obtenons un isolant de Mott avec une probabilité entière d'occupation de site alors qu'une instabilité suprafluide peut prendre place lorsque les interactions sont plus faibles. De plus en dimension deux, un nombre de phases plus exotiques (des phases solides (π,0) ou (π,π), des phases de type supersolide - à la fois superfluide et solide -) peuvent exister lorsque l'on "branche" les interactions à plus longue portée (voir par exemple la référence [146]).

Alors que sont plus courantes les transitions de phase métal-supraconducteur ou métal-isolant, il est donc possible d'observer une transition suprafluide-isolant *directe* (c'est-à-dire sans phase métallique intermédiaire) dans les systèmes bosoniques. Pour être plus rigoureux, en dimensions deux, ce genre de système n'est métallique qu'*exactement* au point critique séparant les phases suprafluide et isolante : la conductivité à ce point est d'ailleurs supposée universelle [147]. Des travaux récents contestent toutefois cette image et proposent une phase bosonique métallique plus étendue [148, 149].

En présence de désordre, la donne peut être changée. Qu'en est-il de l'apparition, de la disparition de nouvelles phases ou encore de la possibilité d'une transition directe suprafluide-isolant ? À l'heure actuelle, il semble établi qu'à faible désordre, une nouvelle phase dite verre de Bose vient s'intercaler entre la phase suprafluide et l'isolant de Mott [150, 151]. Cette phase est elle-aussi isolante[1] mais se caractérise par une compressibilité non nulle. Dans le cas du faible désordre, il semble toujours possible d'observer la transition suprafluide-isolant de Mott pour des valeurs particulières du potentiel chimique [153, 154, 155]. Par contre, la situation est complétement changée dans le cas du fort désordre, puisque la phase isolant de Mott disparaît complétement au profit de la phase verre de Bose : seule une transition suprafluide-verre de Bose peut être observée lorsque l'on augmente les interactions [150, 151]. Nous reprendrons plus tard l'explication de ces diverses phases de manière qualitative.

Notons ici que la distinction entre électrons et bosons est peut-être artificielle, une phase supraconductrice étant tout à fait possible pour des électrons. Dans les supraconducteurs à haute température critique, la taille très faible des paires de Cooper nous invite à les envisager comme des particules bosoniques. Une relecture de nombreux modèles fermioniques à l'aide d'une description bosonique semble d'ailleurs être dans l'air du temps (théorie SO(5) projetée de la supraconductivité [156], modèles bosoniques effectifs [157] etc.).

Pour finir, sont présentées ci-après quelques situations expérimentales où la transition suprafluide-isolant a été observée, transition dirigée par le désordre ou non. Des expériences sur des films granulaires mettent en évidence cette transition en fonction de l'épaisseur des films [158, 159, 160] ou du champ magnétique [160, 161]. Les atomes d'^{4}Helium adsorbés sur un milieu poreux [162], les réseaux de jonctions Josephson [163, 164] sont aussi le théâtre d'une telle transition. Plus récemment, le groupe de Bloch a mis en évidence de manière spectaculaire une transition suprafluide-isolant dans des condensats de Bose-Einstein confinés par des rayons lasers dans un réseau optique [165].

1. Un travail récent de Dalidovich et Phillips [152] propose toutefois une phase verre de Bose métallique.

2 Le modèle de Hubbard bosonique

2.1 Présentation du modèle

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés au modèle "simple" (interactions sur site uniquement) de Hubbard bosonique. Originellement introduit pour décrire la transition de Mott, le modèle de Hubbard se révèle pertinent pour tous les systèmes où la physique est gouvernée par la compétition entre un terme cinétique de délocalisation et un terme d'interaction, ici sur site.

Dans sa forme bosonique, le modèle de Hubbard s'écrit :

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \Phi_i^\dagger \Phi_j + c.c. + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \sum_i \mu_i n_i \tag{1}$$

avec $\Phi_i^\dagger$ (respectivement Φ_i) l'opérateur de création (resp. destruction) d'un boson au site i, $n_i = \Phi_i^\dagger \Phi_i$ étant l'opérateur nombre de particule à ce site. Le terme cinétique t entre en compétition avec le terme de répulsion U des particules sur site. À noter que nous traitons ici de bosons de cœur mou, c'est-à-dire qu'il peut y avoir plusieurs bosons sur le même site. Enfin, le potentiel chimique μ_i caractérise l'énergie sur site.

Considérons le cas non désordonné où le potentiel chimique est le même sur tous les sites. À quelles phases peut-on s'attendre pour ce hamiltonien à température nulle ? Dans la limite sans interaction, les bosons sont libres et la densité est uniforme dans tout l'espace : les bosons condensent dans le mode $k = 0$ de plus basse énergie. On a alors affaire à un ordre non diagonal (ordre dans l'espace réciproque). Nous décrivons alors une phase superfluide où une cohérence de phase s'établit dans le système. Briser cette cohérence de phase est coûteux en énergie, et se traduit par une rigidité ρ non nulle (voir paragraphe a) de la section 3.4 pour une définition de la rigidité). À l'opposé, quand les interactions sont fortes, les particules tendent à se localiser sur les sites du réseau : c'est une phase isolant de Mott.

Il existe donc une transition de phase quantique entre la phase isolant de Mott et la phase superfluide lorsque le rapport t/U est augmenté. Nous reprendrons ces arguments lorsque nous discuterons du diagramme de phase du modèle classique équivalent.

2.2 Simulations numériques

Il est possible en théorie de simuler *directement* le modèle (1) à l'aide d'algorithmes Monte Carlo Quantique. En effet, ce modèle ne présente pas de problème de signe. En pratique, la situation est beaucoup plus complexe pour deux raisons fondamentales. La première difficulté provient du fait qu'on a affaire à des bosons de cœur mou, et qu'il peut y avoir en principe un nombre infini de bosons sur le même site : cela est difficile à traiter en pratique. Dans la méthode SSE (voir chapitre III) par exemple, il faudrait calculer dynamiquement un nombre important d'éléments de matrice, ce qui est réalisable même si quelque peu difficile. Une solution consisterait à imposer statistiquement un nombre faible de bosons par site en se limitant à des valeurs petites du potentiel chimique. Une autre solution plus communément choisie

est de considérer des bosons de cœur dur en imposant au maximum un boson par site (cela revient à prendre $U/t \to \infty$). La seule physique intéressante à simuler est alors donnée par l'ajout de termes d'interaction V_1 ou V_2 à plus longue portée. Nous n'avons pas fait ce choix ici (voir par exemple la référence [146] pour des simulations récentes de ce type de modèles).

La seconde difficulté tient dans le fait que, même en prenant des bosons de cœur dur, il est difficile de simuler efficacement le terme de potentiel chimique : la seule méthode moderne efficace est la méthode SSE. En effet, si l'on considère la correspondance entre le hamiltonien de Hubbard bosonique et le hamiltonien de Heisenberg (cf. référence [146] pour plus de détails), on voit que le potentiel chimique correspond à un champ magnétique qui est mal traité par l'algorithme de boucle (voir section 6.3 du chapitre II).

Si l'on souhaite simuler le modèle (1) sans contrainte de cœur dur, une autre approche consiste à trouver par intégrale de chemin un modèle classique équivalent, qui sous certaines hypothèses et restrictions générales, simplifie énormément les simulations. Dans la prochaine section, nous évoquerons cette démarche puis traçerons un diagramme de phase qualitatif dans plusieurs cas d'intérêt.

3 Modèle de liens classique

3.1 Dérivation et approximations

Il a été montré dans les références [166, 167] que, sous certaines approximations, le modèle (1) en dimension deux pouvait être approximé par un modèle classique. Ce modèle équivalent a été par la suite étudié par simulations Monte Carlo, notamment dans sa forme désordonnée, dans de nombreux autres travaux [153, 154, 155, 168, 169, 170, 171, 172].

Nous n'allons pas reprendre en détails ici la dérivation de ce modèle mais allons rapidement décrire les différentes étapes et approximations effectuées.

La plus grosse hypothèse de dérivation est l'approximation de *fluctuation de phase* [173]. Dans cette approximation, le champ complexe Φ_i dans l'équation (1) est donné par $\Phi_i = \sqrt{\rho_i} e^{i\theta_i}$ où θ_i est l'opérateur de phase conjugué à l'opérateur n_i. En développant ρ_i autour de sa valeur d'équilibre $\rho_i = n_i + \delta\rho_i$ et en supposant que $\delta\rho_i$ reste faible, les fluctuations d'amplitude peuvent être intégrées pour aboutir à un modèle dit de "phase quantique" :

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) + \frac{U}{2} \sum_i n_i^2 - \sum_i \mu_i n_i. \tag{2}$$

L'hypothèse physique sous-jacente dans cette approximation est que la transition supraconducteur-isolant est due uniquement aux fluctuations de phase du paramètre d'ordre et que l'amplitude (le gap dans le spectre d'énergie) reste finie au point critique. En termes de supraconducteurs, cela correspond à l'approximation raisonnable selon laquelle les paires de Cooper sont considérées *préformées* dans la phase haute température : il existe déjà un gap pour les excitations fermioniques, bien que le

système ne soit pas supraconducteur par manque de cohérence de phase.

n et θ étant variables conjuguées $n = -i\frac{d}{d\theta}$, il est immédiatement visible que le hamiltonien (2) devient complexe pour des valeurs non nulles du potentiel chimique. Il est possible d'effectuer alors une série de transformations pour rendre le hamiltonien réel.

En utilisant une décomposition de Trotter-Suzuki (voir chapitre II) où la température inverse β est divisée en L_τ tranches de taille $\Delta\tau = \beta/L_\tau$, on obtient une représentation en intégrale de chemin où il faudra prendre correctement la limite $\Delta\tau \to 0$ pour retrouver le modèle (2).

On utilise ensuite l'approximation de Villain [174] où l'exponentielle du terme en cosinus dans la fonction de partition est approximée comme une somme de gaussiennes. La formule de sommation de Poisson permet alors d'obtenir un modèle classique en dimension trois : deux pour le nombre de dimensions dans l'espace réel, auxquelles s'ajoute une nouvelle dimension, le temps imaginaire (voir chapitre II). Ce modèle se révèle anisotrope dans les directions d'espace et de temps imaginaire. Wallin *et al.* [167] argumentent alors que cette anisotropie ne doit pas influencer la classe d'universalité [2] pour justifier finalement le modèle isotrope suivant :

$$H_{\text{classique}} = \sum_{\vec{r},\tau}^{\nabla.\mathbf{J}=0} \frac{1}{2}\mathbf{J}^2_{\vec{r},\tau} - \mu_{\vec{r}} J^\tau_{\vec{r},\tau}. \tag{3}$$

La fonction de partition est donnée par :

$$Z = \sum_{\{\mathbf{J}\}} e^{-\frac{1}{K}H_{\text{classique}}} \tag{4}$$

où le nouveau paramètre K (voir explication plus loin) va jouer le rôle de température effective.

3.2 Description du modèle

Discutons ici tous les points inclus dans ce modèle et leur relation avec le modèle de Bose-Hubbard originel (1). Le hamiltonien (3) est une représentation quasi exacte du modèle (2), aux erreurs de discrétisation près. Pour la grande majorité des systèmes physiques considérés, les amplitudes de fluctuation sont faibles et le modèle (3) est alors une représentation fidèle du modèle de phase quantique (2) et du modèle de Hubbard bosonique (1).

La température effective K représente la compétition entre termes cinétique t et d'interaction U du modèle (2). Nous avons :

$$K \simeq \frac{t}{U} \tag{5}$$

et en variant K, nous pourrons examiner les différentes phases suprafluide et isolante du modèle de Hubbard bosonique de départ.

2. Plus précisemment, l'hypothèse effectuée est qu'il n'y a pas de transition de phase en fonction de l'anisotropie.

La somme dans le hamiltonien classique s'effectue sur les points du réseau bidimensionnel dénotés par $\vec{r} = (i,j)$ mais aussi dans la troisième direction, dénombrée par l'indice τ variant de 1 à L_τ.

Les variables $\mathbf{J} = (J^x,J^y,J^\tau)$ sont des vecteurs qui vivent sur les *liens* du réseau tridimensionnel. Les trois composantes sont des *entiers* pouvant varier de $-\infty$ à $+\infty$. En particulier, la troisième coordonnée J^τ correspond au nombre de bosons dans la troisième direction (le temps imaginaire).

À ce stade, nous n'avons affaire qu'à des variables de liens libres et le problème reste trivial. Sa complexité apparaît avec la *condition de divergence nulle* que doivent vérifier les variables de liens autour de chaque site du réseau tridimensionnel :

$$\nabla.\mathbf{J} = 0. \tag{6}$$

Cette condition de divergence nulle est assez typique des représentations duales [146] trouvées dans le modèle de Villain [174]. D'ailleurs, dans le cas d'un potentiel chimique uniforme *entier*, on retrouve exactement, en redéfinissant les variables J^τ, le modèle de Villain [174] en dimension $2+1$, qui est dans la même classe d'universalité que le modèle XY en dimension $2+1$.

Le potentiel chimique μ est maintenant considéré comme mesuré en unités de U. Il ne se couple énergétiquement qu'avec la troisième composante J^τ des variables de liens (à la densité de bosons). On distingue deux cas : soit $\mu_{\vec{r}} = \mu$ est uniforme dans tout l'espace, soit $\mu_{\vec{r}}$ dépend du site *dans l'espace réel* repéré par $\vec{r} = (i,j)$: le potentiel chimique est le même en ce site pour toutes les valeurs de τ dans la direction du temps imaginaire.

Dans le deuxième cas, on a affaire à un système désordonné et il faudra simuler plusieurs réalisations du désordre pour refléter la vraie physique. La notation standard dans ce cas décompose $\mu_{\vec{r}}$ en deux parties :

$$\mu_{\vec{r}} = \mu + v_{\vec{r}} \tag{7}$$

où μ est la valeur moyenne du potentiel chimique et $v_{\vec{r}}$ sa partie aléatoire. On traite souvent le cas d'un désordre pour lequel $v_{\vec{r}}$ est uniformément distribué dans $[-\Delta,\Delta]$, avec Δ caractéristique de l'intensité du désordre.

Finalement, afin de recouvrer de façon exacte le modèle (2) à $T = 0$, la première limite à prendre est $L_\tau \to \infty$. En général, les simulations se font avec une valeur de L_τ finie (ce qui correspond à une température non strictement nulle $T \simeq L_\tau^{-1}$), mais qui diverge de la bonne manière avec la taille L du réseau dans l'espace réel (voir discussion au paragraphe 3.4).

3.3 Diagramme de phase

Un diagramme de phase qualitatif peut être dressé avec des arguments simples [151, 153] que nous reprenons ici.

a) Cas non désordonné

Considérons tout d'abord le cas d'un système pur, c'est-à-dire μ uniforme ($\Delta = 0$). Comme précédemment évoqué, la compétition entre les termes cinétique et d'in-

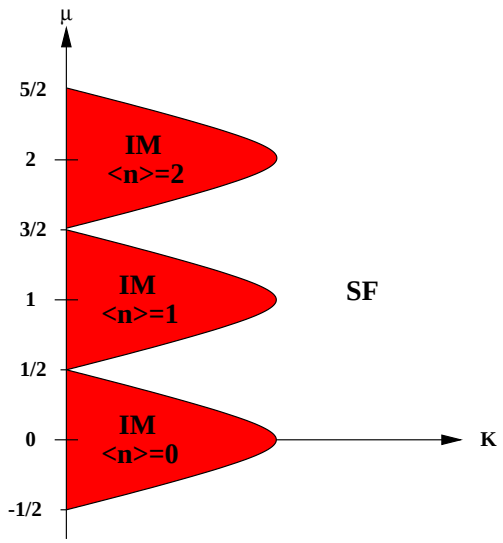


FIG. VI.1 – *Diagramme de phase* (μ,K) *pour le modèle (3) non désordonné. Les phases isolantes de Mott (IM) en forme de lobes se répètent périodiquement avec* μ *et font face à la phase superfluide (SF).*

teraction (ici symbolisée par l'influence de la température effective K) va donner lieu à deux phases isolante de Mott et suprafluide.

Pour $K = 0$, chaque site est simplement occupé par un nombre $n = J_\tau$ de bosons de façon à minimiser l'énergie sur site $\frac{1}{2}n^2 - \mu n$. Les variables de lien dans les directions de l'espace réel doivent être nulles. On voit simplement que, dans l'intervalle $n < \mu + 1/2 < n + 1$, le fondamental est composé de n bosons sur chaque site. La compressibilité κ que l'on définit comme :

$$\kappa = \frac{\partial n}{\partial \mu} \tag{8}$$

s'annule. Nous avons affaire à un isolant de Mott. Il y un gap fini à la limite thermodynamique dans le spectre d'excitation.

Si maintenant nous accordons un peu plus de mouvement aux bosons en augmentant la température effective (en augmentant t/U), les bosons peuvent sauter d'un site à l'autre, gagnant de l'énergie cinétique, mais créant une excitation particule-trou sur deux sites voisins du réseau. En d'autres termes, le gap diminue avec la température effective jusqu'à s'annuler pour une certaine valeur $K_c(\mu)$. Au-delà, les bosons gagnent plus d'énergie par délocalisation qu'ils n'en perdent à cause de l'occupation multiple d'un site : nous entrons dans la phase superfluide. Le diagramme de phase dans le plan (μ,K) donne alors une forme de lobe pour la phase isolant de Mott [151]. Ce lobe se répète périodiquement avec μ chaque fois que le potentiel chimique est augmenté de l'unité. Finalement, on obtient pour le cas non désordonné le diagramme de phase de la figure VI.1. Ce diagramme de phase a été aussi obtenu par des calculs perturbatifs [175, 176] sur le modèle de Hubbard bosonique (1).

b) Cas désordonné

La situation est différente lorsque l'on introduit le désordre. Fisher *et al.* [150, 151] ont prédit l'existence d'une nouvelle phase isolante, appelée verre de Bose, qui vient s'intercaler entre la phase superfluide et la phase isolant de Mott. Cette dernière occupe une place de plus en plus petite dans le diagramme de phase au fur et à mesure que le désordre augmente et disparaît complétement au profit de la nouvelle phase lorsque celui-ci est trop fort.

En reprenant l'argument énergétique développé dans le paragraphe précédent, on constate qu'à $K = 0$ la phase isolant de Mott survit en présence de désordre pour $n - 1/2 - \Delta < \mu < n + 1/2 + \Delta$ pour les valeurs entières de n.

Nous avons alors un critère qualitatif pour distinguer le désordre faible du désordre fort : si $\Delta < 1/2$, les phases de Mott existent encore (désordre faible) alors qu'elles disparaissent si $\Delta > 1/2$ (désordre fort). Bien sûr, la valeur exacte de Δ séparant le désordre faible du désordre fort n'est pas nécessairement égale à $1/2$, mais la discussion reste identique.

Prenons le cas du désordre faible. Pour $n + 1/2 - \Delta < \mu < n - 1/2 + \Delta$, la phase de Mott disparaît car pour certains sites, il est énergétiquement favorable d'ajouter (ou d'enlever) un boson et la compressibilité κ ne demeure pas nulle. De même, le gap dans le spectre d'excitation s'annule. Cette phase est isolante à $K = 0$ car les bosons ne peuvent pas bouger. Lorsque les termes de saut ne sont plus nuls, la situation se révèle moins claire. Fisher *et al.* [150, 151] argumentent que ces bosons supplémentaires ne peuvent immédiatement produire une phase superfluide : ils se localisent préférentiellement sur les sites favorables si la température effective (le terme de saut) est trop faible.

La phase correspondante possède une compressibilité κ non nulle, pas d'énergie caractéristique (pas de gap) mais est de nature isolante (conductivité et densité superfluide nulles) : Fisher *et al.* [150, 151] ont appelé cette phase *verre de Bose*.

Dans le cas du désordre faible, le diagramme de phase obtenu avec ces arguments qualitatifs est donné dans la figure VI.2. Ce qui se passe exactement autour de la pointe de chaque lobe de Mott (zones en pointillés sur la figure) n'est pas tout à fait certain : y a-t-il une transition directe suprafluide-isolant de Mott ou faut-il nécessairement passer par la phase verre de Bose ? Il semble que ce soit la première possibilité qui prévale mais nous y reviendrons plus loin, en guise de prolongement de cette étude.

Le cas du désordre fort (disons $\Delta > 1/2$) est encore plus simple dans les arguments de Fisher *et al.* [150, 151] : les lobes de Mott sont complétement détruits et seule la phase verre de Bose existe à basse température effective. Ce phénomène est résumé dans la figure VI.3. Nous devrions donc dans le cas du désordre fort toujours nous trouver dans une phase sans gap, présentant une compressibilité non nulle.

Plusieurs études récentes [154, 155, 172] remettent quelques points particuliers des arguments évoqués ci-avant en doute (notamment dans le cas désordonné). Cependant, gardons à l'esprit que les diagrammes de phase tracés reflètent relativement correctement la physique du modèle (3).

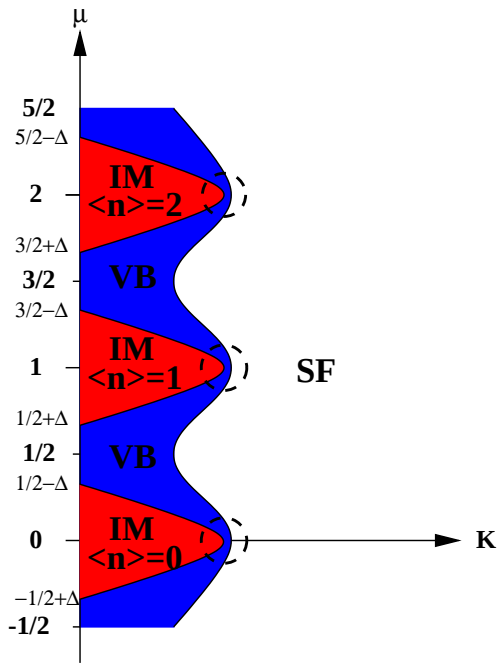


FIG. VI.2 – *Diagramme de phase* (μ,K) *pour le modèle (3) faiblement désordonné. Les lobes de Mott (IM) ont rétréci et s'est intercalée la phase Verre de Bose (VB). Autour de chaque pointe de lobe, la présence de la phase Verre de Bose entre la phase de Mott et la phase superfluide (SF) est peu certaine (zones en pointillés).*

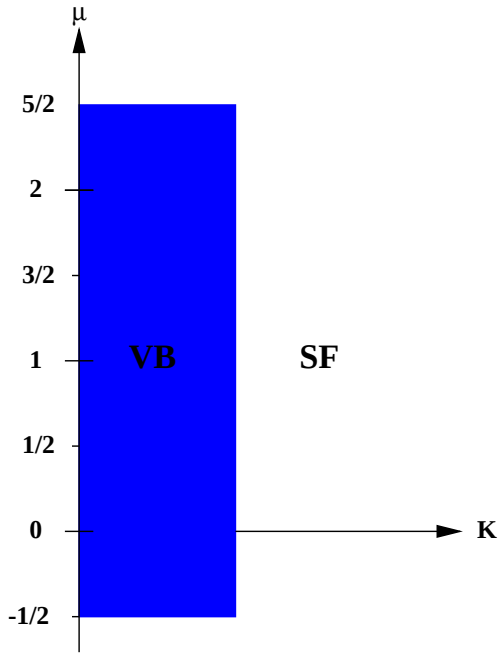


FIG. VI.3 – *Diagramme de phase* (μ,K) *pour le modèle (3) fortement désordonné. Les lobes de Mott ont disparu et il n'existe plus que deux phases : la phase verre de Bose (VB) et la phase superfluide (SF).*

3.4 Théorie d'échelle

Dans cette partie, nous donnerons très succintement la théorie d'échelle développée dans les références [150, 151] pour les transitions de phase quantiques du modèle de Hubbard bosonique en dimension d. Cette théorie prend pour hypothèse une transition de phase continue et se sert des relations de lois d'échelle et d'*hyperscaling* (super-loi d'échelle) que l'on retrouve dans toutes les transitions de phase quantique (voir partie 1.2 du chapitre V). Nous édicterons simplement ces lois d'échelle pour deux quantités essentielles (la rigidité ρ et la compressibilité κ) qui nous permettront d'analyser les résultats des simulations Monte Carlo et d'obtenir les exposants critiques.

a) Rigidité

On définit la rigidité ρ comme proportionnelle à l'excès d'énergie libre δf lorsque la phase du paramètre d'ordre subit un *twist* θ dans la direction de l'espace réel. La définition exacte donne (voir la publication [151] et références incluses) :

$$\delta f = \frac{1}{2}\rho(\nabla\theta)^2. \tag{9}$$

La ridigité est proportionnelle à la densité superfluide, paramètre d'ordre de la transition suprafluide-isolant; en particulier, elle tend vers une constante dans la phase suprafluide et est nulle dans la phase isolante (dans la limite thermodynamique).

Proche du point critique, disons à une distance $\delta = \frac{K-K_c}{K_c}$, on montre que la rigidité doit varier avec la longueur de corrélation comme :

$$\rho \sim \xi^{-(d+z-2)} \tag{10}$$

où l'exposant critique dynamique z indique comment la longueur de corrélation dans le temps imaginaire diverge avec celle dans l'espace réel (voir partie 1.2 du chapitre V).

Puisque nous effectuons des simulations à taille finie, il est nécessaire de savoir quelle en est la traduction pour un réseau de taille L dans l'espace réel et L_τ dans la direction du temps imaginaire. Par des arguments standards de théorie de taille finie, nous obtenons [151] :

$$\rho = \frac{1}{L^{d+z-2}}\widetilde{\rho}(L^{1/\nu}\delta, L_\tau/L^z) \tag{11}$$

où ν est l'exposant critique de la longueur de corrélation et $\widetilde{\rho}$ une fonction d'échelle.

En choisissant le rapport d'aspect :

$$\alpha = L_\tau/L^z \tag{12}$$

constant au cours des simulations, on s'aperçoit qu'au point critique K_c, la quantité :

$$L^{d+z-2}\rho \tag{13}$$

doit être indépendante de la taille du système. Il est donc possible de tracer cette quantité pour différentes tailles de système; les différentes courbes se croiseront au point critique.

b) Compressibilité

La compressibilité κ définie plus avant dans la formule (8) peut aussi être vue comme la "rigidité dans le temps imaginaire", le *twist* étant cette fois-ci imposé dans la troisième direction. Les lois d'échelle s'écrivent alors [151] :

$$\kappa \sim \xi^{-(d-z)} \quad \text{et} \quad \kappa = \frac{1}{L^{d-z}} \widetilde{\kappa}(L^{1/\nu}\delta, L_\tau / L^z) \tag{14}$$

où $\widetilde{\kappa}$ est aussi une fonction d'échelle. Si l'on considère toujours un rapport d'aspect α constant, toutes les courbes de la quantité $L^{d-z}\kappa$ pour différentes tailles de réseaux vont se croiser au point critique.

c) Définitions Monte Carlo

Revenons au hamiltonien classique (3). Afin d'effectuer des simulations de type Monte Carlo sur ce hamiltonien, nous devons définir correctement la rigidité ρ et la compressibilité κ en fonction des variables de liens $\{\mathbf{J}\}$.

En introduisant formellement un twist dans la direction réelle x et en l'annulant, la rigidité s'exprime en termes des variables de lien comme :

$$\rho = \frac{1}{L_x^2 L_\tau} \langle (\sum_{\vec{r},\tau} J^x_{\vec{r},\tau})^2 \rangle. \tag{15}$$

Il n'y a pas de terme de type valeur moyenne de courant $\langle \sum_{\vec{r},\tau} J^x_{\vec{r},\tau} \rangle$, car celui-ci s'annule par symétrie.

De même, la compressibilité κ est donnée par

$$\kappa = \frac{1}{L_x^d L_\tau} [\langle (\sum_{\vec{r},\tau} J^\tau_{\vec{r},\tau})^2 \rangle - \langle \sum_{\vec{r},\tau} J^\tau_{\vec{r},\tau} \rangle^2] \tag{16}$$

où cette fois-ci $\langle \sum_{\vec{r},\tau} J^\tau_{\vec{r},\tau} \rangle$ peut être non nul à cause du potentiel chimique.

4 Simulations Monte Carlo

La dérivation du modèle classique équivalent (3) a été effectuée en partie pour retomber sur un modèle plus simple à traiter numériquement que le vrai modèle de Hubbard bosonique (1). Cependant, même si les simulations Monte Carlo ont permis d'effectuer de grands pas dans la compréhension de ce modèle, elles sont en général limitées à de petites tailles de réseaux et ce, malgré l'utilisation de grands moyens de calculs. Ceci vient du fait que les mouvements Monte Carlo effectués sont locaux et n'affectent que peu de variables de liens à la fois. En d'autres termes, les temps d'autocorrélation et d'équilibration sont considérables rapport à la nature même du mouvement Monte Carlo.

Pour résoudre ces problèmes, nous avons développé un nouvel algorithme *non local* qui diminue de façon drastique les temps d'autocorrélation et permet de traiter des systèmes beaucoup plus grands que ceux étudiés auparavant. Autant l'algorithme local peut être vu comme l'algorithme Metropolis du modèle d'Ising qui ne renverse

qu'un spin à la fois, autant ce nouvel algorithme est proche des algorithmes de blocs et de boucles pour les systèmes de spins : le lecteur des chapitres II et III sera donc peu dépaysé.

Après avoir brièvement rappelé en quoi consistent les mouvements de l'algorithme local et montré ses limitations, nous décrirons ce nouvel algorithme, qui sera souvent dénommé comme un algorithme de "ver" (*worm algorithm*). Nous prouverons l'existence du bilan détaillé pour cet algorithme et démontrerons son efficacité en comparant les temps d'autocorrélation qu'il fournit à ceux obtenus avec l'algorithme local.

4.1 Algorithme local

Avant toute chose, il est utile de définir une convention au sujet de l'orientation du réseau. Autour de chaque site, résident six liens sur lesquels reposent les entiers J^σ où $\sigma = \pm x, \pm y, \pm \tau$. Le changement que l'on va effectuer sur J^σ au cours des mouvements Monte Carlo va dépendre du fait que σ est un lien *entrant* ou *sortant* : notre convention ici sera de considérer les directions positives x,y,τ comme porteuses des liens sortants, et les directions $-x$, $-y$, $-\tau$ celles des liens entrants. Cette convention est rappelée par les flèches en bas à gauche de la figure VI.4.

L'algorithme qui était jusqu'ici utilisé dans les simulations Monte Carlo du modèle (3) était composé de deux mouvements locaux (voir chapitre II).

Le premier mouvement proposé est une petite boucle où quatre variables de liens sont changées par ± 1 avec une probabilité de type Metropolis. Les liens sortants voient leurs variables de liens augmentées de 1, les liens entrants diminuées de 1 selon le sens de la boucle. Ce mouvement est représenté deux fois dans la partie nommée A de la figure VI.4 et on observe graphiquement que la variable de lien est augmentée de l'unité si la flèche de la boucle est dans le même sens que celle de la convention édictée en bas à gauche. Ce mouvement n'est pas sans rappeler le mouvement local consistant à renverser quatre spins autour d'une plaquette sans interaction dans la méthode Monte Carlo Quantique Worldline présentée dans le chapitre II.

Le second mouvement est quant à lui sensiblement identique au mouvement de lignes (d'espace ou de temps) dans le Monte Carlo Quantique Worldline : on ajoute (ou enlève selon le sens) une unité aux variables de liens situées sur une même ligne du réseau (voir partie B de la figure VI.4). Ce mouvement est nécessaire pour assurer l'ergodicité de l'algorithme.

Nous ne donnons pas ici la description précise des probabilités de tels mouvements. Cela est peu utile, car il s'avère, comme le lecteur des chapitres II et III l'aura deviné, que proche d'une transition de phase, ces mouvements locaux échantillonent très mal l'ensemble des configurations représentatives et le système reste figé dans une vallée de l'espace des phases. Ainsi à basse température, les mouvements de ligne sont très peu probables. Les temps d'autocorrélation augmentent très rapidement : on se trouve dans une situation de ralentissement critique.

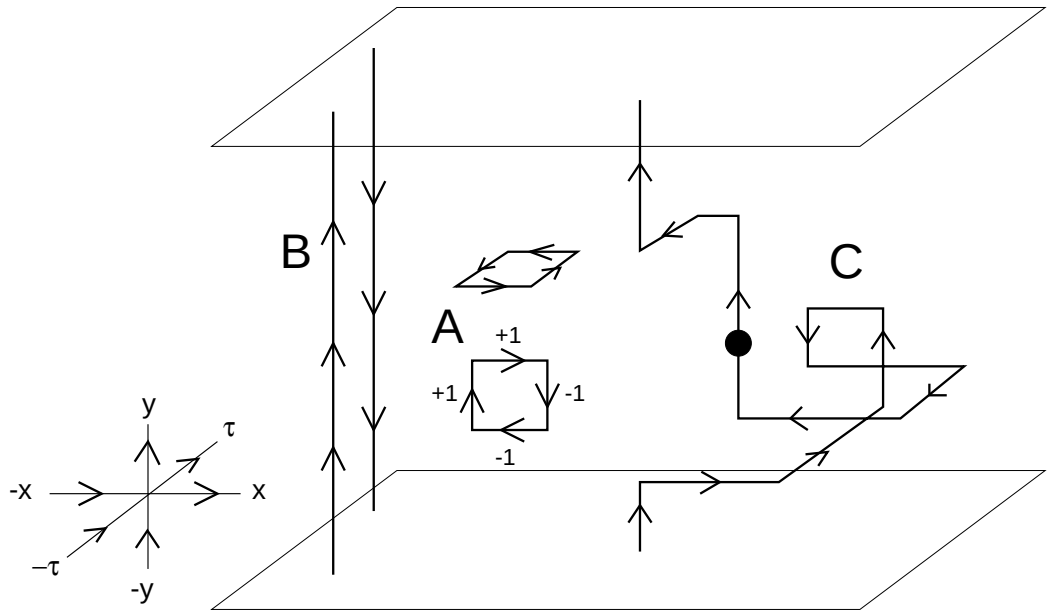


FIG. VI.4 – *Exemples de mouvements Monte Carlo locaux et non locaux (voir texte).*

4.2 Nouvel algorithme non local

Dans le cadre des systèmes de spins, la solution à ce problème avait été apportée par les algorithmes de blocs [14, 19, 20, 35]. Ici nous décrivons la façon de construire un algorithme de type bloc unique [20], très proche dans l'esprit des algorithmes dits de "ver" (*worm algorithm*) proposés dans le cadre des simulations Monte Carlo quantique [16, 177] ou classique [178]. Un exemple de mouvement possible est représenté dans la partie C de la figure VI.4.

Passons à la description de l'algorithme. Nous allons modifier les configurations en faisant se déplacer un "ver" à travers le réseau de liens. Les liens au travers desquels le ver passe sont modifiés *pendant* son trajet. Les configurations générées durant le processus de déplacement du ver ne sont pas valides à ce moment précis (la condition de divergence nulle des **J** n'est pas vérifiée), mais le deviennent à la fin du chemin.

Les mêmes conventions d'orientation du réseau au sujet des liens entrants ou sortants sont conservées. Le changement effectué par le ver sur la variable de lien $J^{\sigma}_{\vec{r},\tau}$ va dépendre de la nature du lien rencontré par le ver.

Si le ver sort du site repéré par $(\vec{r},\tau)$ en passant par un lien sortant, alors :

$$J^{\sigma}_{\vec{r},\tau} \to J^{\sigma}_{\vec{r},\tau} + 1, \qquad \sigma = x,y,\tau. \tag{17}$$

S'il s'agit d'un lien entrant, nous avons :

$$J^{\sigma}_{\vec{r},\tau} \to J^{\sigma}_{\vec{r},\tau} - 1, \qquad \sigma = -x, -y, -\tau. \tag{18}$$

Le chemin du ver peut être décrit de la sorte. Celui-ci débute à partir d'un site du réseau choisi au hasard (point noir sur la figure VI.4). À ce point précis, le ver a

le choix d'aller sur l'un des six sites voisins. Pour déterminer la direction à prendre, est calculé pour chacun des chemins , $\sigma = \pm x, \pm y, \pm \tau$ le poids A_σ défini ci-après selon le bilan détaillé *local*. Pour A_σ, nous proposons un choix de type Metropolis :

$$A_\sigma = \min(1, e^{-\frac{1}{K}(E'_\sigma - E_\sigma)}) \tag{19}$$

où $E_\sigma = \frac{1}{2}J_\sigma^2 - \mu J_\sigma \delta_{\sigma,\pm\tau}$ est l'énergie actuelle du lien σ et $E'_\sigma = \frac{1}{2}(J_\sigma \pm 1)^2 - \mu(J_\sigma \pm 1)\delta_{\sigma,\pm\tau}$ la valeur de l'énergie si le ver passe à travers ce lien. Les signes plus ou moins dépendent de la nature entrante ou sortante du lien (voir plus haut).

On peut noter dès maintenant que d'autres choix sont possibles pour A_σ. En particulier, nous avons vérifié que des probabilités de type poids local :

$$A_\sigma = e^{-\frac{1}{K}E'_\sigma} \tag{20}$$

ou bien bain de chaleur :

$$A_\sigma = \frac{e^{-\frac{1}{K}(E'_\sigma - E_\sigma)}}{1 + e^{-\frac{1}{K}(E'_\sigma - E_\sigma)}} \tag{21}$$

répondent aussi aux conditions (les notations pour E_σ et E'_σ restent les mêmes).

Le calcul des A_σ effectués, nous calculons les vraies probabilités p_σ pour la prochaine direction du ver en normalisant les poids A_σ :

$$p_\sigma = \frac{A_\sigma}{N} \tag{22}$$

où $N = \sum_\sigma A_\sigma$ est la norme. Une fois qu'une direction est choisie, nous modifions la valeur correspondante de J_σ par ± 1 et déplaçons le ver vers le prochain site du réseau dans cette direction. De là, la même procédure est recommencée pour choisir un autre site et ainsi de suite jusqu'à ce que le ver revienne à son point de départ. C'est alors la fin du mouvement Monte Carlo.

Pour vérifier la condition de bilan détaillé, ce mouvement de ver doit alors être accepté ou refusé. Pour ce faire, il est nécessaire de stocker les valeurs N_i et N_f des normes initiale et finale qui sont les valeurs des normalisations des probabilités au premier site *avant* (respectivement *après*) ce mouvement de ver. Ce mouvement est soit accepté avec une probabilité $\frac{N_i}{N_f}$, soit refusé et l'algorithme est relancé sur la base de la configuration de liens précédant la construction de ce ver.

Comme mis en évidence précédemment, les configurations de liens générées durant le déplacement du ver ne satisfont pas la condition de divergence nulle, mais il est aisé de vérifier que la configuration finale remplit cette condition. Il est important de noter que le ver peut passer plusieurs fois sur le même lien et qu'à chaque pas, il peut retourner sur le site du réseau où il se situait auparavant. Cette dernière situation correspond au chemin *bounce* dans la méthode SSE (voir chapitre III).

4.3 Preuve du bilan détaillé

Il est nécessaire d'une part de vérifier que l'algorithme proposé vérifie la condition de bilan détaillé, et d'autre part de s'assurer de l'ergodicité de cet algorithme.

Donnons une preuve du bilan détaillé. Il peut être utile de penser aux variables de lien comme à des mesures d'un courant traversant ce lien, le signe indiquant la

direction du courant. Le déplacement du ver peut alors être vu comme l'envoi d'un courant à travers une boucle fermée dans le système. Considérons le cas où le ver visite les sites $\{s_1 \dots s_N\}$, passant à travers les liens $\{l_1 \dots l_N\}$. Notons que s_N est le dernier site visité avant que le ver ne retourne en s_1. Autrement dit, les liens s_N et s_1 sont connectés par le lien l_N. Sur chaque site, nous définissons comme auparavant :

$$\begin{aligned} A_{s_i,\sigma} &= \min(1, \exp(-\frac{1}{K}(E'_{s_i,\sigma} - E_{s_i,\sigma}))) \\ &= \min(1, \exp(-\Delta E_{s_i,\sigma}/K)) \qquad (23) \\ N_{s_i} &= \sum_{\sigma} A_{s_i,\sigma}. \qquad (24) \end{aligned}$$

La probabilité de survie de ce ver v est alors donnée par :

$$P_v = P_{s_1}(1 - P_v^e) \prod_{i=1}^{N} \frac{A_{s_i,\sigma}}{N_{s_i}}. \qquad (25)$$

Ici, P_{s_1} est la probabilité de choisir le site s_1 comme le point de départ du ver et P_v^e est la probabilité d'effacer ce ver après sa construction. L'index σ donne la direction nécessaire pour aller de s_i à s_{i+1}.

Si le ver v a été accepté, il faut considérer la possibilité d'annuler ce mouvement. Déterminons la probabilité de survie d'un *anti-ver* $\overline{v}$, où le courant va exactement dans la direction opposée, effaçant le ver v. Nous avons :

$$P_{\overline{v}} = P_{\overline{s}_1}(1 - P_{\overline{v}}^e) \prod_{i=1}^{N} \frac{\overline{A}_{\overline{s}_i,-\sigma}}{\overline{N}_{\overline{s}_i}}. \qquad (26)$$

Dans ce cas, les sites sont visités dans l'ordre inverse, $\overline{s}_1 = s_N$, $\overline{s}_2 = s_{N-1}$, ..., $\overline{s}_N = s_2$ et en général $\overline{s}_i = s_{N-i+2}$. Notons aussi que $\overline{s}_i$ et $\overline{s}_{i+1}$ sont connectés par le lien $l_i = l_{N-i+1}$ et que $\overline{s}_N$ et $\overline{s}_1$ sont connectés par $l_N = l_1$. De même s_i et $\overline{s}_{N-i+1}$ (ou de façon équivalente s_i et s_{i+1}) sont connectés par le lien l_i.

Intéressons nous maintenant au cas où à la fois les deux vers v et $\overline{v}$ sont arrivés au site s_i *différent* du site initial s_1. Puisque les variables de liens sont modifiées durant la construction du ver et puisque les six directions sont toujours autorisées, il apparaît que $N_{s_i} = \overline{N}_{\overline{s}_{N-i+2}=s_i}$ sauf au premier site s_1. De plus, $A_{s_i,\sigma}$ et $\overline{A}_{\overline{s}_{N-i+1}=s_i,-\sigma}$ ne dépendent que de la variable de lien l_i connectant les sites s_i et $\overline{s}_{N-i+1}$ et nous voyons que :

$$\frac{A_{s_i,\sigma}}{\overline{A}_{\overline{s}_{N-i+1},-\sigma}} = \exp(-\Delta E_{s_i,\sigma}/K). \qquad (27)$$

Notons ici que d'autres choix pour A_σ tels que ceux proposés plus haut conduisent exactement au même résultat. Pour que la condition de bilan détaillé soit vérifiée, $P_v/P_{\overline{v}}$ se doit de suivre la distribution de Boltzmann. Puisque le point de départ est choisi avec une probabilité uniforme, on a $P_{s_1} = P_{\overline{s}_1}$ et par conséquent :

$$\frac{P_v}{P_{\overline{v}}} = \frac{1-P_v^e}{1-P_{\overline{v}}^e}\frac{\overline{N}_{\overline{s}_1}}{N_{s_1}}\prod_{i=1}^{N}\exp(-\Delta E_{s_i,\sigma}/K) \tag{28}$$

$$= \frac{1-P_v^e}{1-P_{\overline{v}}^e}\frac{\overline{N}_{\overline{s}_1}}{N_{s_1}}\exp(-\Delta E_{\mathrm{Tot}}/K), \tag{29}$$

où E_{Tot} est la différence d'énergie totale entre les configurations avant et après le passage du ver v. Le meilleur choix pour obtenir un algorithme efficace est de rendre la probabilité P^e la plus faible possible. Nous choisissons :

$$P^e = 1 - \min(1, \frac{N_{s_1}(\text{pas de ver})}{N_{s_1}(\text{ver})}). \tag{30}$$

Dans les deux cas qui nous concernent, la probabilité d'effacer le ver v vaut :

$$P_v^e = 1 - \min(1, \frac{N_{s_1}}{\overline{N}_{s_1}}) \tag{31}$$

et celle d'effacer l'anti-ver $\overline{v}$:

$$P_{\overline{v}}^e = 1 - \min(1, \frac{\overline{N}_{s_1}}{N_{s_1}}). \tag{32}$$

Un tel choix de P^e permet de satisfaire la condition de bilan détaillé puisque :

$$\frac{P_v}{P_{\overline{v}}} = \exp(-\Delta E_{\mathrm{Tot}}/K). \tag{33}$$

Cet algorithme de ver est ergodique puisque le ver peut effectuer des petites boucles et des mouvements de ligne dans toutes les directions similairement à l'algorithme local, lui-même ergodique.

4.4 Performances

Pour caractériser l'efficacité d'un algorithme Monte Carlo, il faut étudier quantitativement de quelle façon l'espace des phases est visité. En particulier, cette étude nécessite le calcul des temps d'autocorrélation de diverses quantités au cours de la simulation Monte Carlo. La performance d'un algorithme est alors définie par son exposant dynamique z_{MC}, qui indique comment ces temps varient en fonction de la taille des systèmes simulés.

Pour réaliser une telle étude, nous définissons tout d'abord la fonction d'autocorrélation normalisée de l'observable $\mathcal{O}$ dans le temps Monte Carlo de la façon suivante :

$$C_{\mathcal{O}}(t) = \frac{\langle \mathcal{O}(t)\mathcal{O}(0)\rangle - \langle \mathcal{O}\rangle^2}{\langle \mathcal{O}^2\rangle - \langle \mathcal{O}\rangle^2}. \tag{34}$$

Ensuite, nous cherchons à calculer le temps d'autocorrélation $\tau_{\mathcal{O}}$ de cette quantité, c'est-à-dire le temps typique pour lequel la fonction d'autocorrélation atteint

des valeurs faibles. Il y a plusieurs manières de calculer et de définir le temps d'autocorrélation. Ici nous prenons l'une des définitions les plus rigoureuses qui consiste à approximer la fonction d'autocorrélation par une somme d'exponentielles [179] :

$$C_{\mathcal{O}}(t) = \sum_{i=1}^{N} a_i e^{-\frac{t}{\tau_i}} \tag{35}$$

où la somme est coupée aux N termes les plus représentatifs. En pratique, nous estimons avoir assez de termes lorsque la somme $\sum_{i=1}^{N} a_i$ est proche de l'unité. Le temps d'autocorrélation est alors défini comme le temps caractéristique de la relaxation la plus lente :

$$\tau_{\mathcal{O}} = \max(\tau_i). \tag{36}$$

Comparons de manière équitable les deux algorithmes. Dans le cas de l'algorithme local, un pas Monte Carlo consiste à proposer un mouvement local de boucle par site du réseau. Pour l'algorithme de ver, le nombre d'essais est plus faible puisque le ver ne passe pas nécessairement par tous les sites du réseau. L'effort nécessaire pour obtenir un effet de décorrélation similaire doit être normalisé. Pour ce faire, le temps d'autocorrélation de l'algorithme de ver est défini de la manière suivante (voir les références [20, 27]) :

$$\tau_{\mathcal{O}}^{v} = \tau_{\mathcal{O}} \frac{\langle l \rangle}{3L^3} \tag{37}$$

où $\tau_{\mathcal{O}}$ est le temps d'autocorrélation donné par l'équation (36) et $\langle l \rangle$ est la taille moyenne du ver, c'est-à-dire le nombre moyens de liens visités par le ver. L est la taille linéaire du réseau; le facteur 3 provenant du fait qu'il y a trois liens par site n'est pas pertinent pour la suite.

La figure VI.5 présente le résultat du calcul des temps d'autocorrélation de l'algorithme local et de celui de ver (par la formule (37)) pour la rigidité ρ du modèle (3) pour $\mu = 0$ sur des réseaux cubiques $L \times L \times L$. La valeur de la température effective est $K = 0.333$, très proche du point critique (voir la référence [169] et la partie 5). Le calcul du temps d'autocorrélation de l'énergie τ_E^v a également été effectué avec l'algorithme de ver pour montrer que la dépendance des temps d'autocorrélation envers la quantité calculée n'affecte pas le comportement général.

Alors que le temps d'autocorrélation augmente de manière drastique avec la taille des systèmes pour l'algorithme local, τ_ρ et τ_E restent très faibles (de l'ordre de $2-3$ pas Monte Carlo par lien) pour l'algorithme de ver. Remarquons que le temps d'autocorrélation de l'énergie τ_E est toujours plus grand que celui de la rigidité τ_ρ.

L'exposant dynamique z_{MC} est défini par :

$$\tau \sim L^{z_{\mathrm{MC}}}. \tag{38}$$

Dans le cas de l'algorithme local, l'exposant d'autocorrélation z_{MC} est estimé plus grand que 4 (la dépendance du temps d'autocorrélation avec la taille du système est peut-être exponentielle - voir figure VI.5 -), tandis qu'une bien plus faible valeur $z_{\mathrm{MC}} \simeq 0.3(1)$ est obtenue dans le cas de l'algorithme de ver. Ce résultat démontre sans ambiguïté l'efficacité de l'algorithme de ver (il faut bien noter l'échelle log-log sur la figure VI.5).

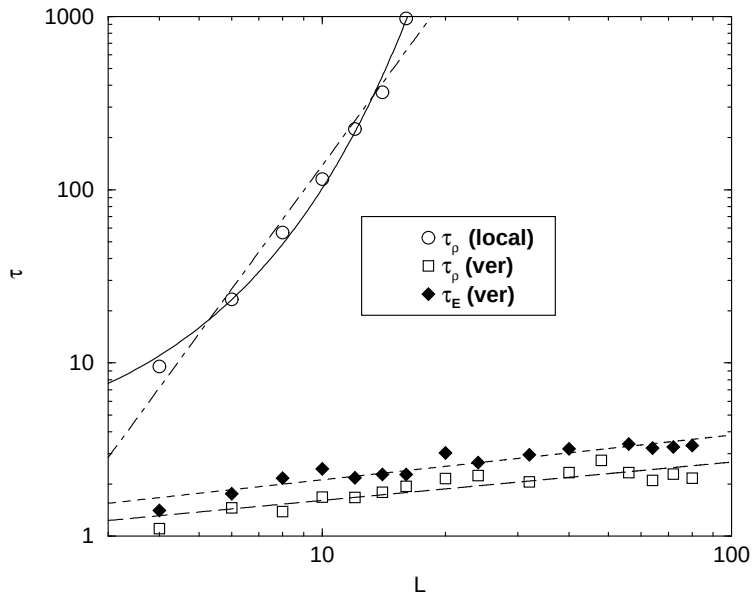


FIG. VI.5 – *Temps d'autocorrélation en fonction de la taille de réseau en échelle log-log pour l'algorithme local et l'algorithme de ver pour* $\mu = 0$ *à* $K = 0.333$. *Les lignes en pointillés indiquent des extrapolations en loi de puissance et la ligne pleine une extrapolation exponentielle en* L.

Pour mesurer autrement l'efficacité de l'algorithme de ver, il suffit plus simplement de regarder la taille de réseau maximale que nous avons utilisée : il est quasiment impossible d'équilibrer des réseaux de taille linéaire supérieure à $L = 16$ avec l'algorithme local alors que des réseaux de taille largement supérieure (jusqu'à $L = 80$) peuvent être simulés sans difficulté majeure avec l'algorithme de ver. Rappelons que les réseaux simulés ici sont cubiques, ce qui entraîne le gain d'un facteur $3.(80/16)^3 = 375$ pour le nombre de liens simulés !

5 Résultats

Nous montrons ici les résultats de calculs effectués à très grande échelle avec l'algorithme de ver pour un point particulier du modèle non désordonné : nous avons simulé le modèle (3) pour $\mu = 0$ autour du point critique $K_c \simeq 0.333$. La physique de ce point est bien connue : il s'agit d'une transition entre la phase isolant de Mott et la phase suprafluide; cette transition se situe dans la même classe d'universalité que celle du modèle XY en trois dimensions. L'objectif de ces calculs est de démontrer l'efficacité de l'algorithme en le testant sur ce point particulier du diagramme de phase.

Comme nous l'avons vu précédemment, la quantité ρL^{d+z-2} doit être indépendante de la taille du système au point critique. De même, la théorie d'échelle de

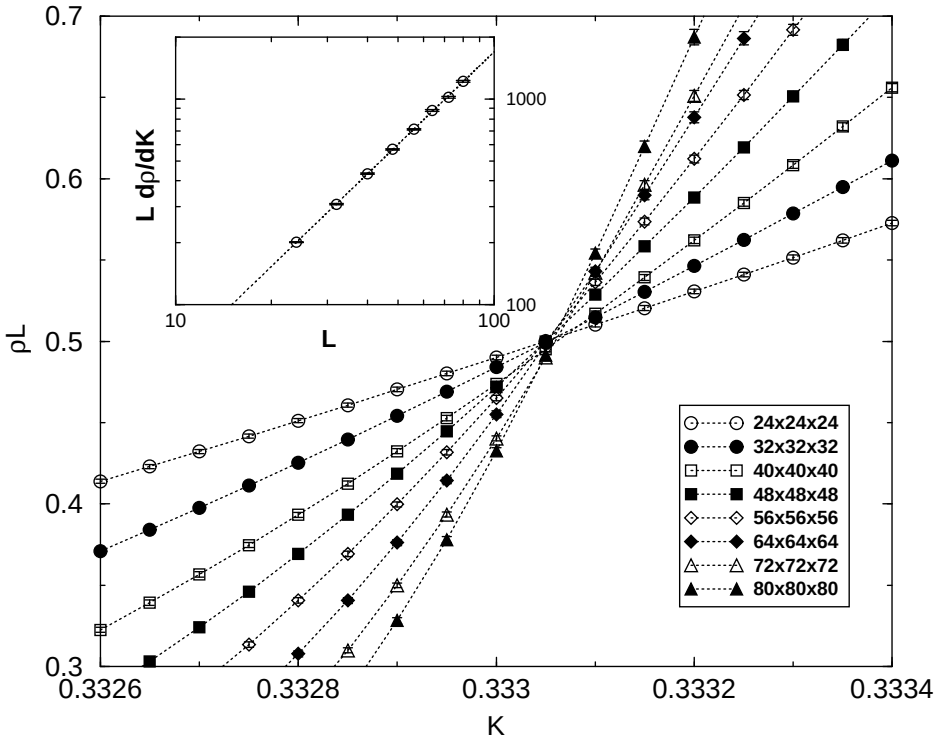


FIG. VI.6 – *ρL en fonction de K pour différentes tailles de réseaux. Toutes les courbes se croisent au point critique $K_c = 0.33305(5)$. En encart: dérivée de ρL par rapport à K au point critique K_c en fonction de la taille du système en échelle log-log. L'extrapolation en loi de puissance (ligne en pointillés) donne $\nu = 0.670(3)$ (voir texte).*

Fisher *et al.* [151] prévoit la relation suivante au point critique K_c :

$$\frac{d\rho}{dK} L^{d+z-2} \sim L^{1/\nu} \tag{39}$$

entre la dérivée de la rigidité par rapport au couplage K et les exposants critiques dynamique z et de la longueur de corrélation ν. Cette relation se dérive trivialement de la formule (11).

Nous nous attendons pour ce point particulier $\mu = 0$ à avoir un exposant dynamique $z = 1$ [151]. Les simulations sont effectuées sur des réseaux cubiques $L \times L \times L$ et la rigidité calculée selon la définition de la formule (15). La majorité des résultats ont été obtenus en utilisant des techniques d'histogrammes [59] sur des simulations très longues à $K = 0.333$. Le calcul de $\frac{d\rho}{dK}$ a été effectué d'après la dérivée thermodynamique de la rigidité par rapport à K :

$$\frac{d\rho}{dK} = \frac{1}{K^2}(\langle \rho E \rangle - \langle \rho \rangle \langle E \rangle). \tag{40}$$

Sur la figure VI.6, est représenté ρL en fonction de K pour différentes tailles de réseau (de $L = 24$ jusqu'à $L = 80$, tailles inaccessibles avec l'algorithme local). Nous

voyons que toutes ces courbes se croisent très bien pour une valeur $K_c = 0.33305(5)$, donnant un exposant dynamique $z = 1$ comme prévu. Cette valeur de K_c est en accord avec des simulations Monte Carlo [169] effectuées avec l'algorithme local, mais la précision est meilleure par au moins un ordre de grandeur.

Dans l'encart de cette figure, nous avons aussi representé $\frac{d\rho}{dK}L$ calculé au point critique K_c en fonction de la taille du système L sur une échelle log-log. En ajustant numériquement cette courbe par une loi de puissance :

$$\frac{d\rho}{dK}L = AL^{1/\nu} \tag{41}$$

où A est une constante, nous obtenons $\nu = 0.670(3)$ pour l'exposant critique de la longueur de corrélation, en accord parfait avec les simulations les plus récentes du modèle XY en trois dimensions [180]. Nous privilégions cette façon de déterminer ν par rapport aux traditionnels effondrements de points sur une même courbe (*data collapses*) (voir par exemple la référence [172]), qui mènent à de plus grandes incertitudes sur les exposants critiques.

6 Perspectives d'études et conclusion

Résumons brièvement les différents points évoqués et donnons les perspectives de simulations possibles avec ce nouvel algorithme, en insistant sur les questions physiques pertinentes.

Nous avons introduit dans cette partie un algorithme non local très performant pour la représentation de Villain du modèle de Hubbard bosonique. Après comparaison de ses performances à celle de l'algorithme local utilisé jusque-là, une large amélioration apparaît tant au niveau des temps d'autocorrélation, des tailles de systèmes traités que de la précision obtenue.

Bien que nous n'ayons donné des résultats que pour $\mu = 0$, cet algorithme peut être appliqué de la même manière à d'autres valeurs du potentiel chimique, et il est aussi possible de l'utiliser dans le cas désordonné où μ dépend du site. Dans ces conditions, les perspectives d'études complémentaires sont grandes : en effet, la plupart des simulations Monte Carlo étaient jusque-là limitées à de petites tailles de réseaux. Les résultats souffrent souvent d'effets de taille finie prononcés, ce qui peut remettre en cause leur validité. Si nous pouvons simuler des réseaux avec 100 fois plus de sites qu'auparavant, nous pourrons probablement infirmer ou confirmer les différentes conclusions tirées par l'analyse de données obtenues sur des réseaux de faible taille. De plus, nous obtiendrons une précision beaucoup plus grande pour l'estimation des points et exposants critiques. En particulier, les prédictions de la théorie d'échelle de Fisher *et al.* [150, 151] n'ont jamais été vérifiées avec grande précision mais sont simplement considérées dans les études précédentes comme "compatibles" ou "non compatibles" avec les résultats des simulations Monte Carlo.

Il existe plusieurs problèmes intéressants qui pourront en principe être abordés avec ce nouvel algorithme de ver. Bien sûr la liste que nous présentons ici n'est pas exhaustive et pourra être complétée si de nouvelles interrogations physiques apparaissent au cours des simulations.

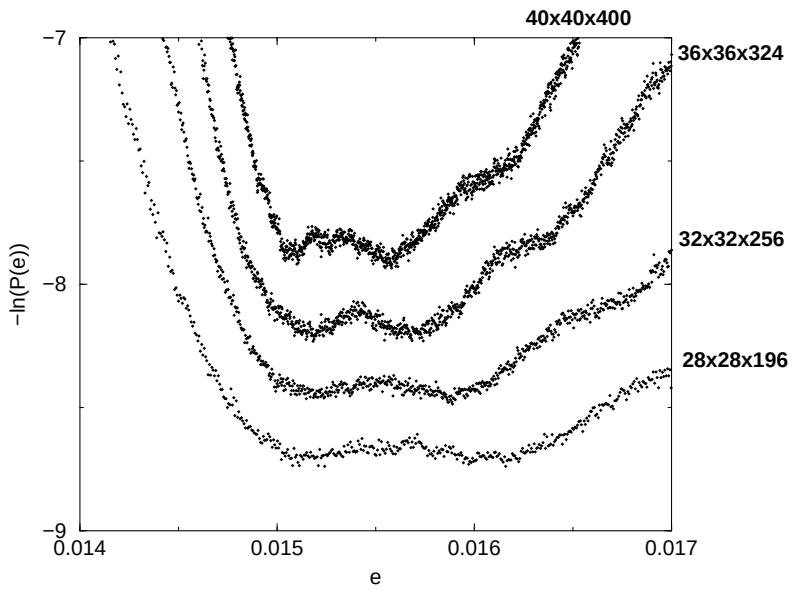


FIG. VI.7 – *Doubles pics pour l'énergie libre* $-\ln(P(e))$ *en fonction de l'énergie par site pour différentes tailles de systèmes (calculs effectués pour* $\mu = 1/4$ *et* $\alpha = 1/4$*).*

6.1 Perspectives d'études dans le cas pur

a) Potentiel chimique non nul

Il serait intéressant d'effectuer des calculs à grande échelle pour le cas pur où $\mu \neq 0$. Aux points où μ est un entier, le modèle (3) est dans la classe d'universalité du modèle XY tridimensionnel, mais en change en dehors. Dans le cas où μ prend des valeurs non entières, la théorie d'échelle de Fisher *et al.* prévoit [151] un exposant dynamique $z = 2$ et des exposants critiques champ moyen : $\nu = 1/2$ et $\eta = 0$. Les simulations précédentes ont vu ces exposants, mais avec des tailles de réseau faibles : il est donc tout à fait possible que ce soient des exposants effectifs qui aient été mesurés.

Des calculs préliminaires pour la valeur $\mu = 1/4$ du potentiel chimique indiquent qu'il faut en effet être extrêmement précautionneux. Pour cette valeur du potentiel chimique, la transition de phase entre les comportements isolant et suprafluide se situe autour de $K_c \simeq 0.283$. Nous explorons la nature de cette transition en effectuant des simulations sur des réseaux de taille $L \times L \times \alpha L^2$ avec α le rapport d'aspect. L'algorithme de ver permet de simuler des systèmes de taille bien supérieure à ceux utilisés dans les études précédentes.

La méthode de Lee et Kosterlitz [181] est utilisée pour vérifier la nature de cette transition. Nous calculons "l'energie libre" $f = -\ln P(e)$, où $P(e)$ est la distribution de probabilité de l'énergie par site e. Proche de K_c, $P(e)$ en fonction de e présente deux pics pour les tailles de réseau simulées. Ces pics peuvent être identifiés aux valeurs entières $n = 0,1,\ldots$ du "nombre" de bosons dans le système. Avec des techniques d'histogrammes [59], cette "énergie libre" est mesurée à la température où les

deux pics sont de hauteur sensiblement égale. La figure VI.7 présente les différentes courbes, décalées verticalement pour des raisons de lisibilité. Pour toutes les tailles L des systèmes étudiés, les deux pics sont de plus en plus prononcés au fur et à mesure que L augmente. Dans la méthode de Lee et Kosterlitz [181], ces deux pics indiqueraient une transition de phase *du premier ordre*. Cependant, il est également visible sur la figure VI.7 que la séparation entre ces pics diminue avec la taille des systèmes et il est possible que cette transition soit très faiblement du premier ordre, voire même du second ordre. Des calculs effectués sur des réseaux de plus grande taille seront nécessaires pour savoir si le "gap" d'énergie entre ces deux pics subsiste dans la limite thermodynamique.

Le rapport d'aspect $\alpha = L_\tau/L^z = 1/4$ utilisé ici peut aussi avoir une certaine importance : un autre rapport d'aspect pourrait montrer plus clairement la nature de la transition, la limite intéressante d'un point de vue expérimentale étant $\alpha \to 0$.

Ne tirons pas de conclusion hative de ces premiers résultats quant à la nature de la transition de phase pour des valeurs non entières du potentiel chimique; le mérite de ces calculs préliminaires est de nous inviter à beaucoup de précautions pour la suite des études.

b) Interactions à plus longue portée

Si l'on considère maintenant un terme d'interaction à plus longue portée dans le modèle (2), il est encore possible d'effectuer une décomposition de type Villain sur la fonction de partition et l'on obtient des termes supplémentaires dans le modèle classique. Par exemple avec une interaction entre premiers voisins, se rajoute à l'interaction entre liens via la condition de divergence nulle, un terme plus direct du type :

$$H_1 = \frac{U_1}{U} \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r'} \rangle, \tau} J^\tau_{\vec{r},\tau} J^\tau_{\vec{r'},\tau}, \tag{42}$$

où la somme est effectuée sur les paires de sites $\vec{r}$ et $\vec{r'}$ plus proches voisins [169].

Incorporer cette interaction supplémentaire dans l'algorithme de ver pourrait permettre, en plus de l'intérêt méthodologique certain, la mise en évidence de phases différentes comme cela semble avoir été vu lors des simulations effectuées avec l'algorithme local [168, 169, 170].

6.2 Perspectives d'étude en présence de désordre

En présence de désordre, les perspectives d'étude sont bien plus grandes non seulement parce que le nombre de paramètres physiques pertinents augmente mais aussi car les simulations de systèmes désordonnés demandent beaucoup d'effort numérique avec l'algorithme local, ce qui parfois a limité les études précédentes.

a) Désordre faible

Dans le cas du désordre faible, trois phases (isolant de Mott, verre de Bose et superfluide) sont présentes et on peut se demander quelles sont les types de transition possibles.

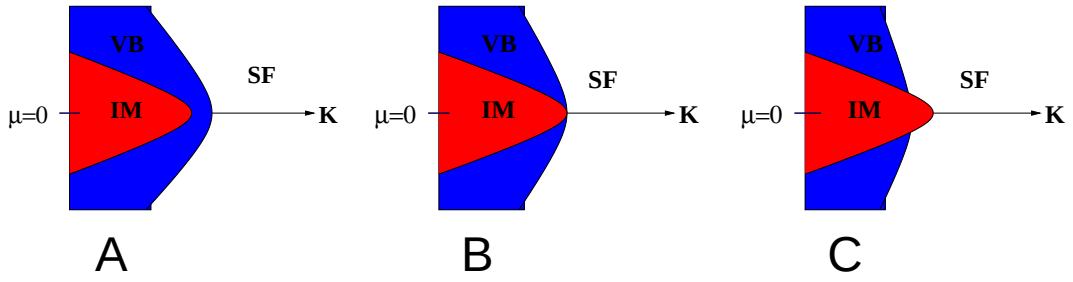


FIG. VI.8 – *Trois scénarii possibles autour de la pointe des lobes de Mott en présence de faible désordre (voir texte). Les notations restent les mêmes : isolant de Mott (IM), verre de Bose (VB) et suprafluide (SF).*

Une première étude intéressante serait de regarder avec grande précision ce qu'il se passe au niveau de la pointe des lobes : y a-t-il une transition suprafluide-isolant de Mott directe ou la transition par la phase vitreuse est-elle obligatoire ? Trois scenarii ont été envisagés jusqu'ici :

- La théorie d'échelle de Fisher *et al.* [151] ne prévoit pas de transition directe : la phase verre de Bose est toujours présente à la pointe des lobes de Mott (voir partie A de la figure VI.8).
- Kisker et Rieger [153, 154] trouvent numériquement une transition directe *exactement* aux valeurs entières du potentiel chimique. Ces auteurs proposent donc un diagramme de phase proche de la pointe du lobe de Mott comme celui présenté partie B de la figure VI.8.
- Plus récemment, Park *et al.* [155] étendent ce scénario et voient une transition directe pour μ entier *et* pour des valeurs du potentiel chimique très proches. Leur proposition est représentée dans la partie C de la figure VI.8.

Au travers de calculs des réseaux plus grands, nous souhaitons dégager le scénario le plus probable et vérifier si des effets de taille finie n'ont pas masqué la physique à la pointe des lobes de Mott. Cette étude doit être réalisée en s'intéressant plus particulièrement aux valeurs des exposants critiques lors des transitions.

Ainsi, Kisker et Rieger mettent en évidence une transition suprafluide-isolant de Mott avec $z = 1$ et $\nu = 0.7(1)$ pour $\mu = 0$ [153, 154], conduisant à une analogie avec le cas pur en ce point. De même, Park *et al.* [155] déterminent $z = 2$ et $\nu = 0.5(1)$ pour $\mu = 0.3$ dans le cas du faible désordre, correspondant aussi à une même transition champ moyen identique au cas pur.

Le fait que, pour ces résultats, le critère de Harris "quantique" [182, 183] $\nu \geqslant \frac{2}{d}$ soit violé[3] est assez étrange et semble signifier que le désordre, quand il est faible, n'est pas pertinent pour ce modèle.

S'il existe, comme nous le voyons dans la figure VI.7 des gaps d'énergie assez grands à cause d'effets de taille finie, il apparaît clair qu'il faudra un désordre conséquent pour changer de comportement critique sur des systèmes de faible taille. Il

3. Dans cette inégalité, d est le nombre de directions dans lesquelles le désordre n'est pas corrélé : ici $d = 2$.

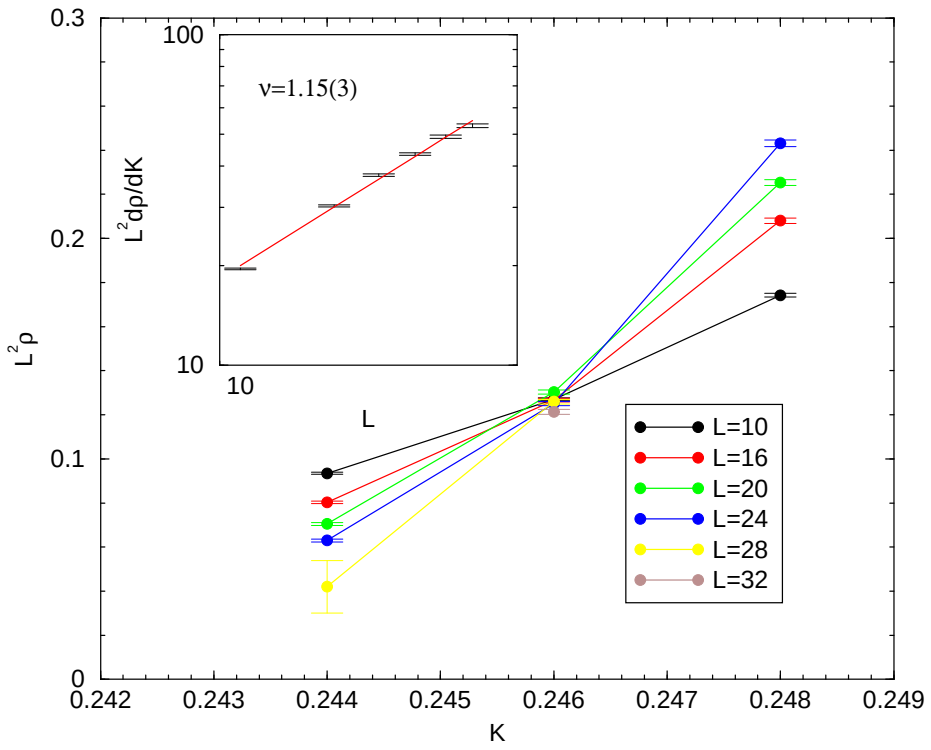


FIG. VI.9 – *ρL^2 en fonction de K pour différentes tailles de réseaux. Les courbes se croisent autour de la valeur $K_c \simeq 0.246(1)$. En encart : dérivée de ρL^2 par rapport à K au point critique K_c en fonction de la taille du système en échelle log-log. L'extrapolation en loi de puissance (ligne) donne $\nu = 1.15(3)$.*

est alors possible que la non pertinence du désordre (lorsqu'il est faible) ne soit qu'un artefact de taille finie. Dans ces conditions, le résultat à la limite thermodynamique peut être complétement différent de celui proposé dans les résultats précédents [153, 154, 155]. Ce point pourrait être vérifié avec le nouvel algorithme de ver.

b) Désordre fort

Dans le cas du désordre fort $\Delta = 0.5$, toutes les simulations [153, 154, 155, 166, 167, 172] estiment $z = 2$ (en accord avec la théorie de Fisher *et al.*) et $\nu = 0.9(1)$. Le critère de Harris n'est alors vérifié que comme une égalité au maximum des barres d'erreur.

Dans le but de vérifier la validité de ces résultats, nous avons mené pour le désordre fort $\Delta = 0.5$ des calculs préliminaires pour une valeur $\mu = 1/2$ du potentiel chimique sur des réseaux de taille $L \times L \times \alpha L^2$ avec $\alpha = 1/4$.

Le croisement des courbes de la quantité ρL^2 visible sur la figure VI.9 indique une transition de phase pour $K_c = 0.246(1)$. À ce point critique, la quantité $L^2 \frac{d\rho}{dK}$ suit une loi de puissance $L^{1/\nu}$ avec la taille des systèmes (voir la formule (39)). Les premières estimations conduisent à $\nu = 1.15(3)$ (voir encart de la figure VI.9), une

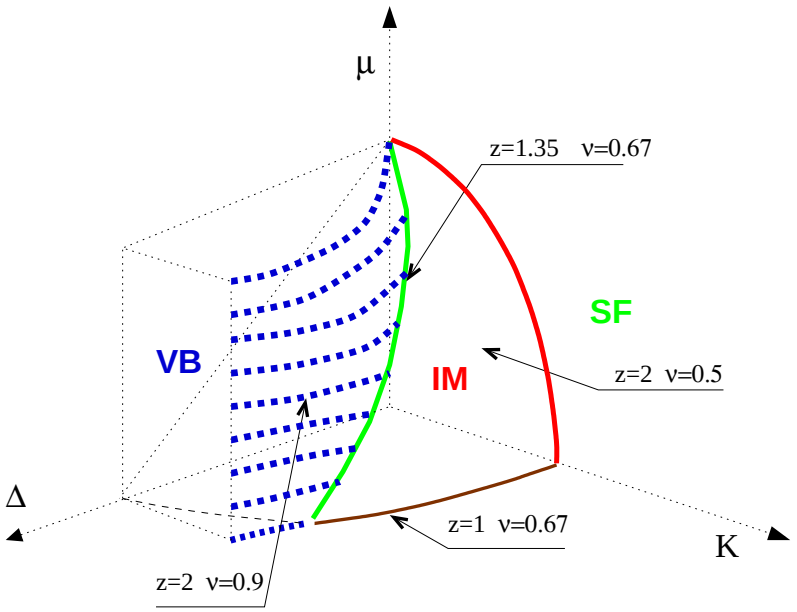


FIG. VI.10 – *Diagramme de phase tridimensionnel (μ,K,Δ) proposé dans la référence [172] en présence de désordre. Les régimes de faible et fort désordre sont séparés par une ligne multicritique aux exposants critiques inhabituels (figure tirée de la référence [172]).*

valeur bien différente des estimations précédentes. Ce résultat semble indiquer que le critère de Harris n'est pas violé. Il faut noter que l'estimation de ν dépend fortement de la valeur du point critique K_c : des calculs supplémentaires plus conséquents sont nécessaires pour confirmer ces résultats.

c) Désordre intermédiaire?

Dans un article très récent, Lee, Cha et Kim [172] proposent l'existence d'une ligne multi-critique séparant les régimes de désordre faible et de désordre fort. Sur cette ligne, l'exposant critique dynamique prendrait une valeur totalement inhabituelle $z = 1.35(5)$ et celui de la longueur de corrélation la valeur $\nu = 0.67(3)$, caractéristique de la classe d'universalité du modèle XY en trois dimensions. Le diagramme de phase que ces auteurs proposent est présenté dans la figure VI.10.

Pour comprendre ces résultats, il est, encore une fois, nécessaire de prendre d'extrêmes précautions quant aux effets de taille finie (le plus grand réseau simulé dans la référence [172] a pour dimensions $14 \times 14 \times 20$).

Conclusion

Au cours de ce mémoire, nous avons traité des phases magnétiques (chapitres IV et V) ou supraconductrices (chapitre VI) de différents modèles représentatifs de systèmes fortement corrélés. Ces études ont toutes été menées de façon numérique, avec des algorithmes de Monte Carlo non locaux.

Dans les chapitres II et III, deux algorithmes de Monte Carlo Quantique (l'algorithme de boucle en temps continu et la méthode de développement en séries stochastique), considérés comme les plus sophistiqués à l'heure actuelle, ont été présentés en détail.

Dans les deux chapitres suivants, nous avons traité de systèmes de spins 1. Le chapitre IV, menant une étude en relation directe avec les expériences, était dédié à la reconstruction numérique de spectres de Résonance Magnétique Nucléaire de chaînes de Haldane dopées avec des impuretés non magnétiques. Les résultats des simulations sont en très bon accord avec les spectres expérimentaux obtenus sur le composé $Y_2BaNi_{1-x}Mg_xO_5$ par Tedoldi et collaborateurs.

L'étude de la transition de phase quantique prenant place dans des chaînes de Haldane faiblement couplées à l'aide d'une nouvelle méthode numérique auto-adaptante constitue le chapitre V. Grâce à cette méthode, nous obtenons avec grande précision et peu d'effort la valeur du couplage interchaîne nécessaire pour ordonner antiferromagnétiquement ce système.

Enfin le chapitre VI expose un nouvel algorithme Monte Carlo Quantique non local (dit algorithme de "ver") destiné à l'étude du modèle de Hubbard bosonique dans l'approximation de phase. Son efficacité, caractérisée par un exposant dynamique $z_{\mathrm{MC}} = 0.3(1)$ très faible, a été démontrée avec des simulations de haute précision pour la valeur $\mu = 0$ du potentiel chimique. En outre, une démonstration explicite du bilan détaillé est donnée pour cet algorithme.

Les développements naturels possibles des différentes études menées, qu'ils soient dans le but d'ouvrir de nouvelles voies d'études ou de nature méthodologique, ont été présentés à la fin de chaque partie.

Dans le cadre du chapitre IV, l'étude systématique de l'effet d'impuretés magnétiques dans des chaînes de spin 1 a une implication directe sur les expériences menées sur de vrais composés de Haldane dopés. Un autre axe possible d'étude est l'ajout d'impuretés non magnétiques dans un système bidimensionnel (présentant un gap) composé de chaînes de Haldane couplées. La compréhension de la phase à faible concentration en impuretés est une question d'intérêt autant d'un point de vue théorique que d'un point de vue expérimental.

La méthode auto-adaptante que nous avons présentée dans le chapitre V peut

s'appliquer tout naturellement à d'autres transitions de phase quantiques mais aussi à des transitions de phase thermiques. La nature des boucles dans les algorithmes Monte Carlo Quantique et leurs propriétés de percolation constituent aussi une piste d'études intéressante.

Enfin, le nouvel algorithme de ver introduit dans le chapitre VI pourrait avoir des répercussions importantes dans la simulation numérique du modèle de Hubbard bosonique (dans l'approximation de phase), pour sonder la nature des phases à la fois dans le système pur et dans le système désordonné. Beaucoup de questions restent ouvertes dans ce dernier cas, et nous avons indiqué à la fin de ce chapitre plusieurs points particuliers qui peuvent faire l'objet d'études plus poussées.

Achevons cette thèse sur quelques réflexions plus générales concernant l'intérêt des simulations numériques dans la physique des solides moderne. Il apparaît un peu prétentieux de considérer la physique numérique comme une troisième voie indépendante, à mi-chemin entre la physique théorique "analytique" et la physique expérimentale. Toutefois, il est certain que les méthodes numériques sont celles de choix pour tester la validité d'une nouvelle proposition théorique mais aussi pour faire un lien direct avec les résultats d'expériences sur de vrais matériaux. Le succès depuis une vingtaine d'années des simulations numériques dans ces deux cadres est dû à la croissance exponentielle de la puissance de calcul des ordinateurs mais aussi à la qualité des algorithmes développés. C'est pourquoi apparaît constamment nécessaire un effort de méthodologie pour améliorer l'efficacité des algorithmes, afin de mieux comprendre et interpréter les résultats expérimentaux. Espérons que ce mémoire pourra être considéré comme une contribution valide dans ce sens.

Bibliographie

[1] J. G. Bednorz et K. A. Müller, "Possible high Tc superconductivity in the Ba-La-Cu-O system", Z. f. Physik B **64**, 189 (1986).

[2] C. N. R. Rao et B. Raveau (éds.), *Colossal Magnetoresistance, Charge Ordering, and Related Properties of Manganese Oxides*, World Scientific, Singapore (1998).

[3] J. C. Bonner et M. E. Fisher, "Linear magnetic chains with anisotropic coupling", Phys. Rev. **135**, A640 (1964).

[4] E. Dagotto, "Correlated electrons in high-temperature superconductors", Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).

[5] D. Poilblanc, "Exact diagonalisation methods for models of strongly correlated fermions", dans *Numerical Methods for Strongly Correlated Systems* (D. J. Scalapino, éd.), Frontiers in Physics (1997).

[6] C. Lanczos, "An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators", J. Res. Natl. Bur. Stand. **45**, 255 (1950).

[7] S. R. White, "Density Matrix Formulation for Quantum Renormalization Groups", Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).

[8] S. R. White, "Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups", Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).

[9] T. Nishino, "Density Matrix Renormalization Group Method for 2D Classical Models", J. Phys. Soc. Japan **64**, 3598 (1995).

[10] S. Moukouri et L. G. Caron, "Thermodynamic Density Matrix Renormalization Group Study of the Magnetic Susceptibility of Half-Integer Quantum Spin Chains", Phys. Rev. Lett. **77**, 4640 (1996).

[11] X. Wang et T. Xiang, "Transfer-matrix density-matrix renormalization-group theory for thermodynamics of one-dimensional quantum systems", Phys. Rev. B **56**, 5061 (1997).

[12] M. P. Gelfand, R. R. P. Singh et D. A. Huse, "Perturbation expansions for quantum many-body systems", J. Stat. Phys. **59**, 1093 (1990).

[13] M. P. Gelfand et R. R. P. Singh, "High-order convergent expansions for quantum many particle systems", Adv. Phys. **49**, 93 (2000).

[14] H. G. Evertz, "The Loop Algorithm", prépublication cond-mat/9707221

[15] A. W. Sandvik et J. Kurkijärvi, "Quantum Monte Carlo simulation method for spin systems", Phys. Rev. B **43**, 5950 (1991).

[16] A. W. Sandvik, "Stochastic series expansion method with operator-loop update", Phys. Rev. B **59**, R14157 (1999).

[17] M. Imada et Y. Hatsugai, "Numerical studies on the Hubbard model and the $t-J$ model in one- and two-dimensions", J. Phys. Soc. Japan **58**, 3752 (1989).

[18] N. Trivedi et D. M. Ceperley, "Ground-state correlations of quantum antiferromagnets: A Green-function Monte Carlo study", Phys. Rev. B **41**, 4552 (1990).

[19] R. H. Swendsen et J. S. Wang, "Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations", Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).

[20] U. Wolff, "Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems", Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).

[21] H. G. Evertz et W. von der Linden, "Simulations on Infinite Size Lattices", Phys. Rev. Lett. **86**, 5164 (2001).

[22] S. Todo et K. Kato, "Cluster Algorithms for General-S Quantum Spin Systems", Phys. Rev. Lett. **87**, 047203 (2001).

[23] B. B. Beard, *Improvements in Cluster Algorithms for Quantum Spin Systems*, Thèse de doctorat, Massachussets Institute of Technology (1996).

[24] B. B. Beard et U. J. Wiese, "Simulations of Discrete Quantum Systems in Continuous Euclidean Time", Phys. Rev. Lett. **77**, 5130 (1996).

[25] K. Binder, "Introduction: Theory and "Technical" Aspects of Monte Carlo Simulations", dans *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (K. Binder, éd.), Springer Verlag Topics in Currents Physics, Second Edition (1986).

[26] W. Krauth, "Introduction to Monte Carlo Algorithms", dans *Advances in Computer Simulation* (J. Kertesz et I. Kondor, éds.), Springer Verlag Lecture Notes in Physics (1998).

[27] M. E. J. Newman et G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press (1999).

[28] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller et E. Teller, "Equation of State Calculations by Fast Computing Machines", J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).

[29] R. Assaraf et M. Caffarel, "Zero-Variance Principle for Monte Carlo Algorithms", Phys. Rev. Lett. **83**, 4682 (1998).

[30] H. De Raedt et A. Lagendijk, "Monte Carlo simulation of quantum statistical lattice model", Physics Reports **127**, 233 (1985).

[31] H. F. Trotter, "On the product of semi-groups of operators", Proc. Amer. Math. Soc. **10**, 545 (1959).

[32] M. Suzuki, "Generalized Trotters formula and systematic approximants of exponential operators and inner derivations with applications to many-body problems", Commun. Math. Phys. **51**, 183 (1976).

[33] M. Suzuki, "Relationship between D-dimensional quantal spin systems and (D+1)-Dimensional Ising systems - Equivalence, critical exponents and systematic approximations of partition-function and spin correlations", Prog. Theor. Phys. **56**, 1454 (1976).

[34] M. Barma et B. S. Shastry, "Classical equivalents of one-dimensional quantum-mechanical system", Phys. Rev. B **18**, 3351 (1978).

[35] H. G. Evertz, G. Lana et M. Marcu, "Cluster Algorithm for Vertex Models", Phys. Rev. Lett. **70**, 875 (1993).

[36] J. J. Cullen et D. P. Landau, "Monte Carlo studies of one-dimensional Heisenberg and XY models", Phys. Rev. B **27**, 297 (1983).

[37] G. A. Baker Jr. et N. Kawashima, "Renormalized Coupling Constant for the Three-Dimensional Ising Model", Phys. Rev. Lett. **75**, 994 (1995).

[38] F. Cooper, B. Freedman et D. Preston, "Solving ϕ-4(1,2) field-theory with Monte Carlo", Nucl. Phys. B **210**, 210 (1982).

[39] N. Kawashima et J. E. Gubernatis, "Loop algorithms for Monte Carlo simulations of quantum spin systems", Phys. Rev. Lett. **73**, 1295 (1994).

[40] N. Kawashima et J. E. Gubernatis, "Generalization of the Fortuin-Kasteleyn transformation and its application to quantum spin simulations", J. Stat. Phys. **80**, 169 (1995).

[41] K. Harada, M. Troyer et N. Kawashima, "The Two-Dimensional S= 1 Quantum Heisenberg Antiferromagnet at Finite Temperatures", J. Phys. Soc. Japan **67**, 1130 (1998).

[42] O. F. Syljuåsen, "Loop algorithms for asymmetric Hamiltonians", Phys. Rev. B **61**, R846 (2000).

[43] H. Onishi, M. Nishino, N. Kawashima et S. Miyashita, "Quantum Monte Carlo Study on Magnetization Processes", J. Phys. Soc. Japan **68**, 2547 (1999).

[44] N. Kawashima, J. E. Gubernatis et H. G. Evertz, "Loop algorithms for quantum simulations of fermion models on lattices", Phys. Rev. B **50**, 136 (1994).

[45] B. Ammon, H. G. Evertz, N. Kawashima, M. Troyer et B. Frischmuth, "Quantum Monte Carlo loop algorithm for the t-J model", Phys. Rev. B **58**, 4304 (1998).

[46] M. Brunner et A. Muramatsu, "Quantum Monte Carlo simulations of infinitely strongly correlated fermions", Phys. Rev. B **58**, R10100 (1998).

[47] M. Brunner, F. Assaad et A. Muramatsu, "Single hole dynamics in the one dimensional t-J model", Eur. Phys. J. B **16**, 209 (2000).

[48] S. Chandrasekharan et U. J. Wiese, "Meron-Cluster Solution of Fermion Sign Problems", Phys. Rev. Lett. **83**, 3116 (1999).

[49] A. W. Sandvik, "A generalization of Handscomb's quantum Monte Carlo scheme-application to the 1D Hubbard model", J. Phys. A **25**, 3667 (1992).

[50] A. W. Sandvik, "Finite-Size Scaling of the Ground State Parameters of the Two-Dimensional Heisenberg Model", Phys. Rev. B **56**, 11678 (1997).

[51] A. Dorneich et M. Troyer, "Accessing the dynamics of large many-particle systems using Stochastic Series Expansion", Phys. Rev. E **64**, 066701 (2001).

[52] A. W. Sandvik, R. R. P. Singh et D. K. Campbell, "Quantum Monte Carlo in the Interaction Representation — Application to a Spin-Peierls Model", Phys. Rev. B **56**, 14510 (1997).

[53] P. Henelius, A. W. Sandvik, C. Timm et S. M. Girvin, "Monte Carlo study of a two-dimensional quantum ferromagnet", Phys. Rev. B **61**, 364 (2000).

[54] P. Henelius et A. W. Sandvik, "Sign problem in Monte Carlo simulations of frustrated quantum spin systems", Phys. Rev. B **62**, 1102 (2000).

[55] O. F. Syljuåsen et A. W. Sandvik, "Quantum Monte Carlo with directed loops", prépublication cond-mat/0202316

[56] D. C. Handscomb, "Monte Carlo method in quantum statistical mechanics", Proc. Cambridge Philos. Soc. **58**, 594 (1962).

[57] A. W. Sandvik, "Critical Temperature and the Transition from Quantum to Classical Order Parameter Fluctuations in the Three-Dimensional Heisenberg Antiferromagnet", Phys. Rev. Lett. **80**, 5196 (1998).

[58] A. J. F. de Souza et M. L. Lyra, "Reweighting histograms in quantum Monte Carlo studies of the Heisenberg model", Phys. Rev. B **65**, 100405(R) (2002).

[59] A. M. Ferrenberg et R. H. Swendsen, "New Monte Carlo technique for studying phase transitions", Phys. Rev. Lett. **61**, 2635 (1988).

[60] A. M. Ferrenberg et R. H. Swendsen, "Optimized Monte Carlo data analysis", Phys. Rev. Lett. **63**, 1195 (1989).

[61] K. Binder, "Finite Size Scaling Analysis of Ising Model Block Distribution Functions", Z. f. Physik B **43**, 119 (1981).

[62] C. Holm et W. Janke, "Critical exponents of the classical three-dimensional Heisenberg model: A single-cluster Monte Carlo study", Phys. Rev. B **48**, 936 (1993).

[63] K. Chen, A. M. Ferrenberg et D. P. Landau, "Static critical behavior of three-dimensional classical Heisenberg models: A high-resolution Monte Carlo study", Phys. Rev. B **48**, 3249 (1993).

[64] H. Bethe, "Zur Theorie der Metalle, I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der Atomkette", Z. f. Physik **71**, 205 (1931).

[65] F. D. M. Haldane, "Non-linear field-theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets - Semi-classically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Néel state", Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).

[66] F. D. M. Haldane, "Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet - Identification with the $O(3)$ non-linear sigma-model", Phys. Lett. A **93**, 464 (1983).

[67] M. Kenzelmann, R. A. Cowley, W. J. L. Buyers, Z. Tun, R. Coldea et M. Enderle, "Properties of Haldane excitations and multiparticle states in the antiferromagnetic spin-1 chain compound $CsNiCl_3$", Phys. Rev. B **66**, 024407 (2002).

[68] G. E. Granroth, M. W. Meisel, M. Chaparala, T. Jolicoeur, B. H. Ward et D. R. Talham, "Experimental Evidence of a Haldane Gap in an S = 2 Quasi-Linear-Chain Antiferromagnet", Phys. Rev. Lett. **77**, 1616 (1996).

[69] W. J. L. Buyers, R. M. Morra, R. L. Armstrong, M. J. Hogan, P. Gerlach et K. Hirakawa, "Experimental evidence for the Haldane gap in a spin-1 nearly isotropic, antiferromagnetic chain", Phys. Rev. Lett. **56**, 371 (1986).

[70] A. Zheludev, T. Masuda, I. Tsukada, Y. Uchiyama, K. Uchinokura, P. Böni et S.-H. Lee, "Magnetic excitations in coupled Haldane spin chains near the quantum critical point", Phys. Rev. B **62**, 8921 (2000).

[71] J. P. Renard, M. Verdaguer, L. P. Regnault, W. A. C. Erkelens, J. Rossat-Mignod et W. G. Stirling, "Presumption for a quantum energy-gap in the quasi one-dimensional S=1 Heisenberg-antiferromagnet $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$", Europhys. Lett. **3**, 945 (1987).

[72] J. P. Renard, M. Verdaguer, L. P. Regnault, W. A. C. Erkelens, J. Rossat-Mignod, J. Ribas, W. G. Stirling et C. Vettier, "Quantum energy-gap in 2 quasi-one-dimensional S=1 Heisenberg antiferromagnet", J. Appl. Phys. **63**, 1425 (1988).

[73] L. P. Regnault, I. Zaliznyak, J. P. Renard et C. Vettier, "Inelastic-neutron-scattering study of the spin dynamics in the Haldane-gap system $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2ClO_4$", Phys. Rev. B **50**, 9174 (1994).

[74] P. Millet, F. Mila, F. C. Zhang, M. Mambrini, A. B. V. Oosten, V. A. Pashchenko, A. Sulpice et A. Stepanov, "Biquadratic Interactions and Spin-Peierls Transition in the Spin-1 Chain $LiVGe_2O_6$", Phys. Rev. Lett. **83**, 4176 (1999).

[75] J. L. Gavilano, S. Mushkolaj, H. R. Ott, P. Millet et F. Mila, "$LiVGe_2O_6$ an Anomalous Quasi-1D, S=1 System, as Revealed by NMR", Phys. Rev. Lett. **85**, 409 (2000).

[76] M. D. Lumsden, G. E. Granroth, D. Mandrus, S. E. Nagler, J. R. Thompson, J. P. Castellan et B. D. Gaulin, "Long-range antiferromagnetic order in the S = 1 chain compound $LiVGe_2O_6$", Phys. Rev. B **62**, R9244 (2000).

[77] P. Vonlanthen, K. B. Tanaka, A. Goto, W. G. Clark, P. Millet, J. Y. Henry, J. L. Gavilano, H. R. Ott, F. Mila, C. Berthier, M. Horvatić, Y. Tokunaga, P. Kuhns, A. P. Reyes et W. G. Moulton, "High-magnetic-field NMR studies of $LiVGe_2O_6$, A quasi-one-dimensional spin $S = 1$ system", Phys. Rev. B **65**, 214413 (2002).

[78] G. Xu, J. F. DiTusa, T. Ito, K. Oka, H. Takagi, C. Broholm et G. Aeppli, "Y_2BaNiO_5: A nearly ideal realization of the S=1 Heisenberg chain with antiferromagnetic interactions", Phys. Rev. B **54**, R6827 (1996).

[79] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb et H. Tasaki, "Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets", Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).

[80] U. Schollwöck, T. Jolicoeur et T. Garel, "Onset of incommensurability at the valence-bond-solid point in the S=1 quantum spin chain", Phys. Rev. B **53**, 3304 (1996).

[81] M. Laukamp, G. B. Martins, C. Gazza, A. L. Malvezzi, E. Dagotto, P. M. Hansen, A. C. López et J. Riera, "Enhancement of antiferromagnetic correlations induced by nonmagnetic impurities: Origin and predictions for NMR experiments", Phys. Rev. B **57**, 10755 (1998).

[82] A. K. Hassan, L. A. Pardi, G. B. Martins, G. Cao et L.-C. Brunel, "High-Field Electron Spin Resonance of $Cu_{1-x}Zn_xGeO_3$", Phys. Rev. Lett. **80**, 1984 (1998).

[83] J. Kikuchi, T. Matsuoka, K. Motoya, T. Yamauchi et Y. Ueda, "Absence of Edge Localized Moments in the Doped Spin-Peierls System $CuGe_{1-x}Si_xO_3$", Phys. Rev. Lett. **88**, 037603 (2002).

[84] B. Normand et F. Mila, "Absence of effective spins 1/2 induced by nonmagnetic impurities in a class of low-dimensional magnets", Phys. Rev. B **64**, 104411 (2002).

[85] E. Polizzi, F. Mila et E. S. Sørensen, "S=1/2 chain-boundary excitations in the Haldane phase of one-dimensional S=1 systems", Phys. Rev. B **58**, 2407 (1998).

[86] T. Kennedy, "Exact diagonalisations of open spin-1 chains", J. Phys. Cond. Matt. **2**, 5737 (1990).

[87] E. S. Sørensen et I. Affleck, "Equal-time correlations in Haldane-gap antiferromagnets", Phys. Rev. B **49**, 15771 (1994).

[88] S. R. White et D. A. Huse, "Numerical renormalization-group study of low-lying eigenstates of the antiferromagnetic S=1 Heisenberg chain", Phys. Rev. B **48**, 3844 (1993).

[89] S. Miyashita et S. Yamamoto, "Effects of edges in S=1 Heisenberg antiferromagnetic chains", Phys. Rev. B **48**, 913 (1993).

[90] P. Lecheminant et E. Orignac, "Magnetization and dimerization profiles of the cut two-leg spin ladder", Phys. Rev. B **65**, 174406 (2002).

[91] S. H. Glarum, S. Geschwind, K. M. Lee, M. L. Kaplan et J. Michel, "Observation of fractional spin S=1/2 on open ends of S=1 linear antiferromagnetic chains: Nonmagnetic doping", Phys. Rev. Lett. **67**, 1614 (1991).

[92] M. Hagiwara, K. Katsumata, I. Affleck, B. I. Halperin et J. P. Renard, "Observation of S=1/2 degrees of freedom in an S=1 linear-chain Heisenberg antiferromagnet", Phys. Rev. Lett. **65**, 3181 (1990).

[93] G. E. Granroth, S. Maegawa, M. W. Meisel, J. Krzystek, L.-C. Brunel, N. S. Bell, J. H. Adair, B. H. Ward, G. E. Fanucci, L.-K. Chou et D. R. Talham, "Magnetic studies of end-chain spin effects in the Haldane-gap material $Ni(C_3H_{10}N_2)_2N_3(ClO_4)$", Phys. Rev. B **58**, 9312 (1998).

[94] C. D. Batista, K. Hallberg et A. A. Aligia, "Electron spin resonance of defects in the Haldane system Y_2BaNiO_5", Phys. Rev. B **60**, R12553 (1999).

[95] A. P. Ramirez, S.-W. Cheong et M. L. Kaplan, "Specific heat of defects in Haldane systems Y_2BaNiO_5 and NENP: Absence of free spin-1/2 excitations", Phys. Rev. Lett. **72**, 3108 (1994).

[96] C. D. Batista, K. Hallberg et A. A. Aligia, "Specific heat of defects in the Haldane system Y_2BaNiO_5", Phys. Rev. B **58**, 9248 (1998).

[97] T. Asano, Y. Ajiro, M. Mekata, K. Kamishima, K. Koui, T. Goto, M. Furusawa et H. Hori, "The Haldane State in C_sNiCl_3 Detected by Magnetization Measurements - Observation of Quantum-Classical Crossover and the Valence Bond Solid State -", J. Phys. Soc. Japan **66**, 460 (1997).

[98] F. Tedoldi, R. Santachiara et M. Horvatić, "^{89}Y NMR Imaging of the Staggered Magnetization in the Doped Haldane Chain $Y_2BaNi_{1-x}Mg_xO_5$", Phys. Rev. Lett. **83**, 412 (1999).

[99] A. Abragam, *Principles of Nuclear Magnetism*, Oxford University Press (1989).

[100] C. B. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance, 3rd ed.*, Springer-Verlag (1990).

[101] F. Tedoldi, *Magnetic correlations and spin dynamics in pure and doped Haldane chains :* ^{89}*Y NMR in* $Y_{2-y}Ca_yBaNi_{1-x}Mg_xO_5$, Thèse de doctorat, Università degli Studi di Pavia (1999).

[102] E. S. Sørensen et I. Affleck, "Large-scale numerical evidence for Bose condensation in the S=1 antiferromagnetic chain in a strong field", Phys. Rev. Lett. **71**, 1633 (1993).

[103] C. Payen, E. Janod, K. Schoumacker, C. D. Batista, K. Hallberg et A. A. Aligia, "Evidence of quantum criticality in the doped Haldane system Y_2BaNiO_5", Phys. Rev. B **62**, 2998 (2000).

[104] E. S. Sørensen et I. Affleck, "Impurities in s=1 Heisenberg antiferromagnets", Phys. Rev. B **51**, 16115 (1995).

[105] E. F. Shender et S. A. Kivelson, "Dilution-induced order in quasi-one-dimensional quantum antiferromagnets", Phys. Rev. Lett. **66**, 2384 (1991).

[106] H. Fukuyama, T. Tanimoto et M. Saito, "Antiferromagnetic Long Range Order in Disordered Spin-Peierls Systems", J. Phys. Soc. Japan **65**, 1182 (1996).

[107] M. Imada et Y. Iino, "Scaling Properties of Antiferromagnetic Transition in Coupled Spin Ladder Systems Doped with Nonmagnetic Impurities", J. Phys. Soc. Japan **66**, 568 (1997).

[108] S. Wessel, B. Normand, M. Sigrist et S. Haas, "Order by Disorder from Nonmagnetic Impurities in a Two-Dimensional Quantum Spin Liquid", Phys. Rev. Lett. **86**, 1086 (2001).

[109] C. Yasuda, S. Todo, M. Matsumoto et H. Takayama, "Site-dilution-induced antiferromagnetic long-range order in a two-dimensional spin-gapped Heisenberg antiferromagnet", Phys. Rev. B **64**, 092405 (2001).

[110] M. Azuma, Y. Fujishiro, M. Takano, M. Nohara et H. Takagi, "Switching of the gapped singlet spin-liquid state to an antiferromagnetically ordered state in $Sr(Cu_{1-x}Zn_x)_2O_3$", Phys. Rev. B **55**, R8658 (1997).

[111] Y. Sasago, N. Koide, K. Uchinokura, M. C. Martin, M. Hase, K. Hirota et G. Shirane, "New phase diagram of Zn-doped $CuGeO_3$", Phys. Rev. B **54**, R6835 (1996).

[112] Y. Uchiyama, Y. Sasago, I. Tsukada, K. Uchinokura, A. Zheludev, T. Hayashi, N. Miura et P. Böni, "Spin-Vacancy-Induced Long-Range Order in a New Haldane-Gap Antiferromagnet", Phys. Rev. Lett. **83**, 632 (1999).

[113] F. J. Dyson, E. H. Lieb et B. Simon, "Phase-transitions in quantum spin systems with isotropic and non-isotropic interactions", J. Stat. Phys. **18**, 335 (1978).

[114] E. J. Neves et J. F. Perez, "Long-range order in the ground-state of two-dimensional antiferromagnets", Phys. Lett. A **114**, 331 (1986).

[115] E. Dagotto et T. M. Rice, "Surprises on the Way from 1D to 2D Quantum Magnets: the Novel Ladder Materials", Science **271**, 618 (1996).

[116] H. J. Schulz, "Dynamics of Coupled Quantum Spin Chains", Phys. Rev. Lett. **77**, 2790 (1996).

[117] A. W. Sandvik, "Multichain Mean-Field Theory of Quasi-One-Dimensional Quantum Spin Systems", Phys. Rev. Lett. **83**, 3069 (1999).

[118] Y. J. Kim et R. J. Birgeneau, "Monte Carlo study of the $S = 1/2$ and $S = 1$ Heisenberg antiferromagnet on a spatially anisotropic square lattice", Phys. Rev. B **62**, 6378 (2000).

[119] M. Azzouz et B. Douçot, "Effect of small interchain coupling on one-dimensional antiferromagnetic quantum Heisenberg spin systems: The integer-spin case", Phys. Rev. B **47**, 8660 (1993).

[120] T. Sakai et M. Takahashi, "The ground-state of quasi-one-dimensional Heisenberg antiferomagnets", J. Phys. Soc. Japan **58**, 3131 (1989).

[121] T. Sakai et M. Takahashi, "Effect of the Haldane gap on quasi-one-dimensional systems", J. Phys. Soc. Japan **42**, 4537 (1990).

[122] A. Koga et N. Kawakami, "Quantum phase transitions for the Haldane system in higher dimensions: A mixed-spin cluster expansion approach", Phys. Rev. B **61**, 6133 (2000).

[123] M. Matsumoto, C. Yasuda, S. Todo et H. Takayama, "Ground-State Phase Diagram of Quantum Heisenberg Antiferromagnets on the Anisotropic Dimerized Square Lattice", Phys. Rev. B **65**, 014407 (2002).

[124] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press (1999).

[125] M. Troyer, M. Imada et K. Ueda, "Critical exponents of the quantum phase transition in a planar antiferromagnet", J. Phys. Soc. Japan **66**, 2957 (1997).

[126] N. Katoh et M. Imada, "Phase Diagram of S=1/2 Quasi-One-Dimensional Heisenberg Model with Dimerized Antiferromagnetic Exchange", J. Phys. Soc. Japan **63**, 4529 (1994).

[127] M. Troyer et M. Imada, "Quantum critical exponents of a planar antiferromagnet", dans *Computer Simulations in Condensed Matter Physics X* (D. P. Landau *et al.*, éd.), Springer Verlag (1997).

[128] A. V. Chubukov et S. Sachdev, "Universal magnetic properties of $La_{2-\delta}Sr_{\delta}CuO_4$ at intermediate temperatures", Phys. Rev. Lett. **71**, 169 (1993).

[129] A. V. Chubukov, S. Sachdev et J. Ye, "Theory of two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnets with a nearly critical ground state", Phys. Rev. B **49**, 11919 (1994).

[130] S. Chakravarty, B. I. Halperin et D. R. Nelson, "Low-temperature behavior of two-dimensional quantum antiferromagnets", Phys. Rev. Lett. **60**, 1057 (1988).

[131] S. Chakravarty, B. I. Halperin et D. R. Nelson, "Two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnet at low temperatures", Phys. Rev. B **39**, 2344 (1989).

[132] A. M. Ferrenberg et D. P. Landau, "Critical behavior of the three-dimensional Ising model: A high-resolution Monte Carlo study", Phys. Rev. B **44**, 5081 (1991).

[133] J. Machta, Y. S. Choi, A. Lucke, T. Schweizer et L. V. Chayes, "Invaded Cluster Algorithm for Equilibrium Critical Points", Phys. Rev. Lett. **75**, 2792 (1995).

[134] Y. Tomita et Y. Okabe, "Probability-Changing Cluster Algorithm for Potts Models", Phys. Rev. Lett. **86**, 572 (2001).

[135] A. Coniglio et W. Klein, "Clusters and Ising critical droplets: a renormalisation group approach", J. Phys. A **13**, 2775 (1980).

[136] M. Aizenman, J. T. Chayes, L. Chayes et C. M. Newman, "Discontinuity of the magnetization in one-dimensional 1/ [X-Y] 2/ Ising and Potts models", J. Stat. Phys. **50**, 1 (1988).

[137] T. B. Liverpool et S. C. Glotzer, "Fixed-cluster algorithm acceleration algorithm for spin systems", Phys. Rev. E **53**, R4255 (1996).

[138] J.-K. Kim, "Application of finite size scaling to Monte Carlo simulation", Phys. Rev. Lett. **70**, 1735 (1993).

[139] S. Carraciolo, R. G. Edwards, S. J. Ferreira, A. Pelisetto et A. D. Sokal, "Extrapolating Monte Carlo Simulations to Infinite Volume: Finite-Size Scaling at $\xi/L \gg 1$", Phys. Rev. Lett. **74**, 2969 (1995).

[140] S. Carraciolo, R. G. Edwards, A. Pelisetto et A. D. Sokal, "Asymptotic Scaling in the Two-Dimensional O(3) sigma Model at Correlation Length 10^5", Phys. Rev. Lett. **75**, 1891 (1995).

[141] Y. Tomita et Y. Okabe, "Probability-changing cluster algorithm for two-dimensional XY and clock models", Phys. Rev. B **65**, 184405 (2002).

[142] K. Harada et N. Kawashima, "Kosterlitz-Thouless transition of quantum XY model in two dimensions", J. Phys. Soc. Japan **68**, 2768 (1998).

[143] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello et T. V. Ramakrishnan, "Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions", Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).

[144] S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov et M. D'Iorio, "Possible metal-insulator transition at B=0 in two dimensions", Phys. Rev. B **50**, 8039 (1994).

[145] E. Abrahams, S. V. Kravchenko et M. P. Sarachik, "Metallic behavior and related phenomena in two dimensions", Rev. Mod. Phys. **73**, 251 (2001).

[146] F. Hébert, *Étude numérique de modèles de Hubbard fermioniques et bosoniques bidimensionnels*, Thèse de doctorat, Université Paris 7 (2001).

[147] M. P. A. Fisher, G. Grinstein et S. M. Girvin, "Presence of quantum diffusion in two dimensions: Universal resistance at the superconductor-insulator transition", Phys. Rev. Lett. **64**, 587 (1990).

[148] D. Das et S. Doniach, "Existence of a Bose metal at $T = 0$", Phys. Rev. B **60**, 1261 (1999).

[149] D. Dalidovich et P. Phillips, "Interaction-induced Bose metal in two dimensions", Phys. Rev. B **64**, 052507 (2001).

[150] D. S. Fisher et M. P. A. Fisher, "Onset of superfluidity in random media", Phys. Rev. Lett. **61**, 1847 (1989).

[151] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein et D. S. Fisher, "Boson localization and the superfluid-insulator transition", Phys. Rev. B **40**, 546 (1989).

[152] D. Dalidovich et P. Phillips, "Phase Glass is a Bose Metal: A New Conducting State in Two Dimensions", Phys. Rev. Lett. **89**, 027001 (2002).

[153] J. Kisker et H. Rieger, "The Two-Dimensional Disordered Boson Hubbard Model: Evidence for a Direct Mott Insulator-to-Superfluid Transition and Localization in the Bose Glass Phase", Physica A **246**, 348 (1997).

[154] J. Kisker et H. Rieger, "Bose-glass and Mott-insulator phase in the disordered boson Hubbard model", Phys. Rev. B **55**, R11981 (1997).

[155] S. Y. Park, J.-W. Lee, M.-C. Cha, M. Y. Choi, B. J. Kim et D. Kim, "Possibility of direct Mott insulator-to-superfluid transitions in weakly disordered boson systems", Phys. Rev. B **59**, 8420 (1999).

[156] A. Dorneich, W. Hanke, E. Arrigoni, M. Troyer et S. C. Zhang, "Phase Diagram and Dynamics of the Projected SO(5) Symmetric Model of High-Tc Superconductivity", Phys. Rev. Lett. **88**, 057003 (2002).

[157] E. Altman et A. Auerbach, "Plaquette boson-fermion model of cuprates", Phys. Rev. B **65**, 104508 (2002).

[158] D. B. Haviland, Y. Liu et A. M. Goldman, "Onset of Superconductivity in the Two-Dimensional Limit", Phys. Rev. Lett. **62**, 2180 (1989).

[159] Y. Liu, K. A. McGreer, B. Nease, D. B. Haviland, G. Martinez, J. W. Halley et A. M. Goldman, "Scaling of the insulator-to-superconductor transition in ultrathin amorphous Bi films", Phys. Rev. Lett. **67**, 2068 (1991).

[160] N. Markovic, C. Christiansen, A. M. Mack, W. H. Huber et A. M. Goldman, "Superconductor-insulator transition in two dimensions", Phys. Rev. B **60**, 4320 (1999).

[161] A. F. Hebard et M. A. Paalanen, "Magnetic-field-tuned superconductor-insulator transition in two-dimensional films", Phys. Rev. Lett. **65**, 927 (1990).

[162] D. Finotello, K. A. Gillis, A. Wong et M. H. W. Chan, "Sharp Heat-Capacity Signature at the Superfluid Transition of Helium Films in Porous Glasses", Phys. Rev. Lett. **61**, 1954 (1988).

[163] L. J. Geerligs, M. Peters, L. E. M. de Groot, A. Verbruggen et J. E. Mooij, "Charging effects and quantum coherence in regular Josephson junction arrays", Phys. Rev. Lett. **63**, 326 (1999).

[164] H. S. J. van der Zant, F. C. Fritschy, W. J. Elion, L. J. Geerligs et J. E. Mooij, "Field-induced superconductor-to-insulator transitions in Josephson-junction arrays", Phys. Rev. Lett. **69**, 2971 (1992).

[165] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch et I. Bloch, "Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms", Nature **415**, 39 (2002).

[166] E. S. Sørensen, M. Wallin, S. M. Girvin et A. P. Young, "Universal conductivity of dirty bosons at the superconductor-insulator transition", Phys. Rev. Lett. **69**, 828 (1992).

[167] M. Wallin, E. S. Sørensen, S. M. Girvin et A. P. Young, "Superconductor-insulator transition in two-dimensional dirty boson systems", Phys. Rev. B **49**, 12115 (1994).

[168] A. van Otterlo et K.-H. Wagenblast, "Coexistence of diagonal and off-diagonal long-range order: A Monte Carlo study", Phys. Rev. Lett. **72**, 3598 (19944).

[169] A. van Otterlo, K.-H. Wagenblast, R. Baltin, C. Bruder, R. Fazio et G. Schön, "Quantum phase transitions of interacting bosons and the supersolid phase", Phys. Rev. B **52**, 16176 (1995).

[170] E. S. Sørensen et E. Roddick, "First-order superconductor-to-insulator transition: Evidence for a supersolid phase", Phys. Rev. B **53**, R8867 (1996).

[171] R. Baltin et K.-H. Wagenblast, "Quantum phase transitions for bosons in one dimension", Europhys. Lett. **39**, 7 (1997).

[172] J.-W. Lee, M.-C. Cha et D. Kim, "Phase diagram of a disordered Boson Hubbard model in two dimensions", Phys. Rev. Lett. **87**, 247006 (2001).

[173] M. P. A. Fisher et G. Grinstein, "Quantum Critical Phenomena in Charged Superconductors", Phys. Rev. Lett. **60**, 208 (1988).

[174] J. Villain, "Theory of one-dimensional and two-dimensional magnets with an easy magnetization plane. 2. The planar, classical, two-dimensional magnet", J. Phys. **36**, 581 (1975).

[175] J. K. Freericks et H. Monien, "Phase Diagram of the Bose-Hubbard Model", Europhys. Lett. **26**, 545 (1994).

[176] N. Elstner et H. Monien, "Dynamics and Thermodynamics of the Bose-Hubbard model", Phys. Rev. B **59**, 12184 (1999).

[177] N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov et I. S. Tupitsyn, ""Worm" algorithm in quantum Monte Carlo simulations", Phys. Lett. A **238**, 253 (1998).

[178] N. V. Prokof'ev et B. V. Svistunov, "Worm Algorithms for Classical Statistical Models", Phys. Rev. Lett. **87**, 160601 (2001).

[179] S. Wansleben et D. P. Landau, "Monte Carlo investigation of critical dynamics in the three-dimensional Ising model", Phys. Rev. B **43**, 6006 (1991).

[180] M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi et E. Vicari, "Critical behavior of the three-dimensional XY universality class", Phys. Rev. B **63**, 214503 (2001).

[181] J. Lee et J. M. Kosterlitz, "New numerical method to Study Phase Transitions", Phys. Rev. Lett. **65**, 137 (1990).

[182] A. B. Harris, "Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models", J. Phys. C **7**, 1671 (1971).

[183] J. T. Chayes, L. Chayes, D. S. Fisher et T. Spencer, "Finite-Size Scaling and Correlation Lengths for Disordered Systems", Phys. Rev. Lett. **57**, 2999 (1986).

Publications

Publications présentées :

- *Magnetization profiles and NMR spectra of doped Haldane chains at finite temperatures*, **F. Alet**, E. Sørensen, Phys. Rev. B **62**, 14116 (2000)

- *Self-adapting method for the localization of quantum critical points using Quantum Monte Carlo techniques*, **F. Alet**, E. Sørensen, Phys. Rev. B **65**, 092408 (2002)

- *Cluster Monte Carlo algorithm for the quantum rotor model*, **F. Alet**, E. Sørensen, soumis à Phys. Rev. Lett.

Publications annexes :

- *Aging phenomena in spin glasses and frustated ferromagnets*, E. Vincent, **F. Alet**, M. Alba, J. Hammann, M. Ocio, J.-P. Bouchaud, Physica B **280**, 260 (2000)

- *A Quantum Monte Carlo algorithm to calculate the free energy of a quantum system*, M. Troyer, S. Wessel, **F. Alet**, soumis à Phys. Rev. Lett. (cond-mat/0207138)