



Étude mathématique de l'instabilité de Peierls dans le modèle discret du polyacétylène

Adéchola Emile Kodjo Kouande

► To cite this version:

Adéchola Emile Kodjo Kouande. Étude mathématique de l'instabilité de Peierls dans le modèle discret du polyacétylène. Mathématiques générales [math.GM]. Université Paris sciences et lettres, 2023. Français. NNT : 2023UPSLD028 . tel-04383429

HAL Id: tel-04383429

<https://theses.hal.science/tel-04383429v1>

Submitted on 9 Jan 2024

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.



THÈSE DE DOCTORAT
DE L'UNIVERSITÉ PSL

Préparée à l'Université Paris-Dauphine

**Étude mathématique de l'instabilité de Peierls dans le
modèle discret du polyacétylène**

Soutenue par

**Adéchola Emile Kodjo
KOUANDE**

Le 18 octobre 2023

Ecole doctorale n° ED 543

Ecole doctorale SDOSE

Spécialité

Mathématiques Appliquées

Composition du jury :

M. Éric CANCÈS Professeur École des Ponts ParisTech	Président
Mme. Salma LAHBABI Professeur Université Hassan II de Casablanca & UM6P	Rapporteur
M. Antoine LEVITT Professeur Université Paris-Saclay	Rapporteur
Mme. Isabelle CATTO Chargée de recherches CNRS Université Paris-Dauphine	Examinatrice
M. Éric SÉRÉ Professeur Université Paris-Dauphine	Directeur de thèse
M. David GONTIER Maître de Conférences Université Paris-Dauphine & ENS-DMA	Co-Encadrant de thèse

Université Paris-Dauphine

École doctorale **École Doctorale Sciences de la Décision, des Organisations, de la Société
et de l'Échange**

Unité de recherche **Centre De Recherche en Mathématiques de la Décision, Université
Paris-Dauphine**

Thèse présentée par **Adéchola Emile Kodjo KOUANDE**

Soutenue le **18 octobre 2023**

En vue de l'obtention du grade de docteur de l'Université Paris-Dauphine

Discipline **Mathématiques appliquées**

Spécialité **Sciences**

Étude mathématique de l'instabilité de Peierls dans le modèle discret du polyacétylène

Thèse dirigée par **Éric SÉRÉ**
David GONTIER

Composition du jury

<i>Rapporteurs</i>	Mme. Salma LAHBABI	professeur à l'Université Hassan II Casablanca & UM6P
	M. Antoine LEVITT	professeur à l'Université Paris-Saclay
<i>Examineurs</i>	Mme. Isabelle CATTO	chargée de recherche à l'Université Paris-Dauphine
	M. Éric CANCÈS	professeur à l'École des Ponts ParisTech - Président
<i>Directeurs de thèse</i>	Éric SÉRÉ	professeur à l'Université Paris-Dauphine
	David GONTIER	MCF à l'Université Paris-Dauphine

COLOPHON

Mémoire de thèse intitulé « Étude mathématique de l'instabilité de Peierls dans le modèle discret du polyacétylène », écrit par [Adéchola Emile Kodjo KOUANDE](#), achevé le 12 décembre 2023, composé au moyen du système de préparation de document [L^AT_EX](#) et de la classe [yathesis](#) dédiée aux thèses préparées en France.

Université Paris-Dauphine

Doctoral School **École Doctorale Sciences de la Décision, des Organisations, de la Société
et de l'Échange**

University Department **Centre De Recherche en Mathématiques de la Décision, Université
Paris-Dauphine**

Thesis defended by **Adéchola Emile Kodjo KOUANDE**

Defended on **October 18, 2023**

In order to become Doctor from Université Paris-Dauphine

Academic Field **Applied mathematics**

Speciality **Sciences**

Mathematical study of Peierls instability in the discrete polyacetylene model

Thesis supervised by **Éric SÉRÉ**
David GONTIER

Committee members

<i>Referees</i>	Mme. Salma LAHBABI	Professor at Université Hassan II Casablanca & UM6P
	M. Antoine LEVITT	Professor at Université Paris-Saclay
<i>Examiners</i>	Mme. Isabelle CATTO	Junior Researcher at Université Paris-Dauphine
	M. Éric CANCÈS	Professor at École des Ponts ParisTech - Président
<i>Supervisors</i>	Éric SÉRÉ	Professor at Université Paris-Dauphine
	David GONTIER	Associate Professor at Université Paris-Dauphine

Cette thèse a été préparée au

**Centre De Recherche en Mathématiques de la
Décision, Université Paris-Dauphine**

Place du Maréchal De Lattre De Tassigny
75016 Paris
France

☎ +33 1 44 27 42 98

Site <http://ceremade.dauphine.fr>

CEREMADE
UMR CNRS 7534

À Bernard, Adjovi et Appoline.

The discovery of new laws in physics
has always been driven by the search
for mathematical beauty.

Rudolf Peierls

Remerciements

Seul devant cette feuille blanche que je suis censé remplir, confronté à l'ombre d'un oubli imminent et ne trouvant pas les mots justes ; Chers collègues, famille et amis qui découvrez ces modestes lignes, je vous demande humblement pardon pour mes imperfections et la simplicité de ces mots de reconnaissance, sachant qu'ils ne parviendront qu'à esquisser faiblement toute la gratitude que je souhaite vous exprimer.

Comme on le dit bien souvent, "À tout seigneur tout honneur". C'est dans ce sens que mes premiers mots vont à David et Éric, qui ont initié cette belle aventure. Je vous exprime ma profonde gratitude pour la confiance que vous m'avez accordée en me proposant ce sujet sur lequel j'ai pris plaisir à travailler. Vos précieux conseils tant sur le plan scientifique que sur le plan personnel, ainsi que votre complémentarité, ont été d'une valeur inestimable.

Merci Éric de m'avoir fait profiter de cette grande expérience d'excellent chercheur dont tu disposes. J'ai toujours été admiratif de la simplicité avec laquelle tu abordes les sujets que nous avons eu à traiter, de cette intuition que tu as à trouver les bonnes astuces pour débloquer les situations qui semblaient à mes yeux sans espoir, ainsi que de la rigueur mathématique que tu apportes à nos travaux.

David, en plus d'être un excellent chercheur qui force mon admiration, et pour moi un remarquable directeur de thèse, tu as su ajouter cette dimension d'application à ma thèse en m'incitant à m'intéresser davantage au numérique. J'ai toujours été impressionné par ta rigueur dans la rédaction, ta manière d'agencer les arguments en les rendant simples, concis et précis pour le bonheur du lecteur. La recherche, c'est de la joie, mais c'est aussi beaucoup de déceptions : des idées qui ne fonctionnent pas, une pensée venue de nulle part qui change tout. Merci de m'avoir prodigué ce précieux conseil qui consiste avant tout à s'amuser et à prendre plaisir. Je profite également de cette occasion pour faire un petit coucou à nos fidèles

compagnons de travail Félix et Valentin, ainsi qu'à Julia.

Je suis extrêmement reconnaissant envers Salma Lahbabi et Antoine Levitt d'avoir accepté de rapporter ce travail. Merci pour votre relecture assidue et pour vos suggestions pertinentes. J'exprime ma gratitude à Isabelle Catto et Éric Cancès pour m'avoir fait l'honneur de leur présence en tant qu'examineurs dans mon jury et pour l'attention particulière portée à ce travail.

Un grand merci à Mme. Béatrice de Tilière pour m'avoir fait profiter d'une partie du budget de l'école doctorale en me finançant un cours d'anglais intensif d'une année. Cette formation a été d'une utilité inouïe pour ma thèse, et je tiens à lui exprimer ma gratitude pour ce geste qui restera à jamais gravé dans ma mémoire. Voir cette initiative continuée dans la mesure du possible serait pour moi une très grande joie, car elle permettra aux jeunes enthousiastes et motivés par le travail, dont le niveau linguistique scientifique fait défaut, de s'accrocher.

Je suis très reconnaissant envers la DAAD, la Fondation Sciences Mathématiques de Paris-FSMP, le SCAC-ambassade de France à Lomé au Togo pour m'avoir octroyé des bourses d'études pour mes deux masters au Bénin à l'Institut de Mathématiques et de Sciences Physiques-ISMP et à l'Université Paris-Dauphine. Mes profondes gratitudes vont aussi à l'Université Paris-Dauphine qui m'a servi de cadre adéquat pendant ces quatre dernières années, à l'école doctorale SDOSE pour avoir financé mes trois années de thèse, aux personnels administratifs de Dauphine en général, notamment Mme. Béatrice Baeza pour avoir facilité mes démarches administratives, et aux personnels du CEREMADE en particulier. Merci à toi également Jacques pour avoir mené à bien ta mission de tuteur, je te suis sincèrement reconnaissant et j'espère que tu sauras pourquoi.

Je remercie Mathieu Lewin et Éric Cancès pour le cours de la "Théorie Spectrale et Méthodes Variationnelles", qui m'a fait découvrir un autre point de vue de la mécanique quantique. Merci également à Guillaume Legendre pour m'avoir fait confiance pour ses TD et TP de méthodes numériques. Je suis très reconnaissant envers M. Emmanuel Fromager et je tiens à le remercier de m'avoir donné un accès libre à la totalité des notes de cours présentes sur son site personnel.

La thèse a été aussi l'occasion de participer à de nombreuses conférences. De formidables personnes ont été mises à notre disposition afin de préparer au mieux ces voyages. Je tiens donc à dire merci à Mme. Isabelle Bellier, Mme Sylvie Lopes et à M. César Faivre pour le temps

consacré à valider mes différentes missions et à comptabiliser mes tickets de caisse au retour. Mes sincères remerciements vont également à Gilles et à Thomas pour tous les efforts mis en œuvre afin de maintenir opérationnels nos services informatiques.

Merci à toi, Jean, pour avoir initié ce groupe de travail d'un an pendant le Covid, qui m'a aidé à m'approprier certaines notions et références bibliographiques qui ont été très utiles pour ma thèse. Merci pour tes explications et la générosité dont tu as fait preuve en me fournissant ton fichier .tex, qui m'a servi de base pour la rédaction de ce manuscrit. Lukasz, I would like to thank you for these three years spent in your company, always focused on writing all day. I have greatly appreciated the few moments we spent discussing the problems I was trying to solve and your fruitful suggestions. Your way of working is quite remarkable and impressive. Camilo, gracias por el tiempo que pasaste hablando conmigo sobre el grafeno y tratando de explicarme tu tema de tesis. Disfruté compartir mis dos últimos años de doctorado contigo, con esos momentos que pasamos en Italia en ese restaurante asiático disfrutando de ese buffet libre. Grégoire-S, merci pour ces moments passés à parler de la finance, tu as suscité en moi un grand intérêt pour le domaine et je continue d'y penser.

Jean Paul, j'aimerais te féliciter de nouveau pour cet heureux évènement, et te remercier de m'avoir fait l'honneur de ton invitation. J'ai beaucoup apprécié nos échanges sur les différents aspects de nos vies. Cyprien, mon gars sûr, mon frère, tu as été pour moi plus qu'un ami, et je te serai toujours reconnaissant pour ce que notre rencontre a changé dans ma vie. Tu sais ce que je pense de toi, et ce n'est que le début d'une très belle aventure. Emmanuel-Z, l'éternel doyen, nos souvenirs de la résidence Cîteaux pendant le confinement sont bien gravés dans ma mémoire. Merci pour tes explications, tes conseils et les moments passés ensemble. Grâce-M, alias Petit Nangai, à toi aussi je dis merci pour ta joie de vivre débordante qui nous faisait oublier en l'espace d'une nuit ces moments pas tout à fait joyeux il y a quelques années au Bénin. Merci à toi Christ pour nos moments "Atassi", et pour m'avoir fait découvrir le welsh lors de mon passage à Lille. David-L, merci à toi, je n'ai pas oublié ton invitation à manger de la bonne pâte Béninoise.

Mes remerciements vont également à mes collègues de laboratoire. Je tiens à remercier tout particulièrement Théo (pour cette longue discussion que nous avons eue sur le projet Reconvert-AI, et bien d'autres sujets), et Rodrigue, pour m'avoir fait connaître le site Mathcha. Il a servi à faire la plus grande partie des figures de ma présentation. Merci également à toi pour tous tes cadeaux qui vont rendre la fête encore plus belle. Félicitations une fois de plus et beaucoup de courage pour la suite. Merci à Adrien-S (pour m'avoir fourni une copie du fichier .tex de

ta thèse et pour nos divers échanges qui m'ont été particulièrement profitables), Adrien-H, Antoine, Camilla, Changqing, Charly, Claudia, Daniele, Diego, Thinh, Elena, Giovanni, João, Kathi, Kexin, Lorenzo, Ruihua, Songbo, Umberto.

Yueh-Sheng et Quan, mes deux fidèles compagnons, mes sincères remerciements pour tout, et beaucoup de courage pour la suite.

À mes amis et camarades de promotion : Michel, Ismaïla, Danhane, Jean-Jacques, Branda, Rocard, Boris, Nestor, Emmanuel, Emmanuel-G, Romziath, Florent, Marcel-Z, je vous dis merci. Aux amis du groupe SEME-Rennes de Ravel Tech : Rémi, Ndjaka, Quyen, Elie et du SEME-Lille de Market Space : Elric, Annette, Yoba, Hai, je vous dis merci. Au groupe GT2D : Thaddeus, Antoine-L, Solal, Etienne, Eloïse, Laurent, Long, Alfred, Louis, Vincent, Hassan, je vous dis merci. Au groupe de prière de la paroisse Saint-Marguerite, en commençant par notre cher père Clément, à Pierre-Alexandre, Alice, Étienne, Kim, Marie Estelle, Georges, je vous dis merci.

Florette, merci de m'avoir fait passer de bons moments au Bénin. Je te souhaite beaucoup de courage pour ton nouveau projet d'étude.

Je suis éternellement reconnaissant envers ma famille qui m'a offert son soutien indéfectible. Je tiens à remercier mes petits frères : Paul, Axel, Thomas, Darren. Mes sincères remerciements vont aussi à ma grande sœur Sylvester, à Manu et à toute sa famille, à Papa Désiré, sa femme et tous ses enfants, ainsi qu'à mes tantes, cousins et cousines que je m'abstiens de citer au risque de ne jamais terminer. Vos encouragements sont à la base de mes accomplissements. Et puis, Papa et Mamans (oui, j'ai deux mamans formidables), merci de croire autant en moi. C'est évidemment à vous que je dédie ce travail.

Je remercie toutes les personnes qui ont cherché leur prénom dans ces remerciements. Pour ceux qui n'ont pas trouvé le leur, c'est une omission de ma part, et cela ne se reproduira plus. Votre soutien et votre amitié sont tout aussi importants, et je vous suis reconnaissant pour tout ce que vous avez apporté dans ma vie.

Ce travail n'aurait jamais existé sans la grâce, la force et le courage que m'accorde chaque jour le bon Dieu, que je remercie infiniment.

Seigneur, fais de moi un instrument de ta paix...

Prière de Saint François d'Assise.

Étude mathématique de l'instabilité de Peierls dans le modèle discret du polyacétylène

Résumé

Cette thèse présente une étude mathématique et numérique de l'instabilité de Peierls dans le modèle discret du polyacétylène. Nous commençons par présenter le cadre général de notre travail. Par la suite, nous étudions la transition de phase dans le modèle de Peierls-SSH pour le polyacétylène. Nous considérons le modèle discret des chaînes fermées du polyacétylène avec un nombre pair d'atomes de carbone, ainsi que des chaînes infinies en présence de température, et prouvons l'existence d'une température critique en dessous de laquelle la chaîne est dimérisée, et au-dessus de laquelle cette chaîne est 1-périodique. La chaîne se comporte comme un isolant en dessous de la température critique et comme un métal au-dessus. Nous caractérisons la température critique dans le modèle limite thermodynamique et prouvons qu'elle est exponentiellement petite en fonction de la rigidité de la chaîne. Nous étudions ensuite la transition de phase autour de cette température critique. Pour finir, nous montrons dans la dernière partie la décroissance exponentielle des points critiques de l'énergie associée au modèle discret du polyacétylène à température nulle. Plus précisément, nous considérons les états stationnaires du modèle discret pour des chaînes infinies de polyacétylène qui sont des connexions homoclines ou hétéroclines entre deux états dimérisés périodiques. Nous prouvons que ces états convergent exponentiellement vite vers les états périodiques asymptotiques correspondants.

Mots clés : analyse non linéaire, théorie des opérateurs, théorie de bifurcation, physique mathématique, instabilité de Peierls, dimérisation, polyacétylène, limite thermodynamique, transition de phase, configurations homoclines, configurations hétéroclines.

Mathematical study of Peierls instability in the discrete polyacetylene model

Abstract

This thesis presents a mathematical and numerical study of the Peierls instability in the discrete polyacetylene model. We begin by presenting the general framework of our work. We then study the phase transition in the Peierls-SSH model for polyacetylene. We consider the discrete model of closed polyacetylene chains with an even number of carbon atoms, as well as infinite chains in the presence of temperature, and prove the existence of a critical temperature below which the chain is dimerized, and above which this chain is 1-periodic. The chain behaves like an insulator below the critical temperature and like a metal above it. We characterize the critical temperature in the thermodynamic limit model and prove that it is exponentially small as a function of chain rigidity. We then study the phase transition around this critical temperature. Finally, in the last section, we prove the exponential decay of the critical energy points associated with the discrete polyacetylene model at zero temperature. More precisely, we consider stationary states of the discrete model for infinite polyacetylene chains that are homoclinic or heteroclinic connections between two periodic dimerized states. We prove that these states converge exponentially fast to the corresponding asymptotic periodic states.

Keywords: nonlinear analysis, operators theory, bifurcation theory, mathematical physics, Peierls instability, dimerization, polyacetylene, thermodynamic limit, phase transition, homoclinic configurations, heteroclinic configurations.

Table des matières

Remerciements	xiii
Résumé	xvii
Table des matières	xix
1 Introduction	1
1.1 Les polymères	1
1.2 Introduction à la seconde quantification	3
1.3 Modèle de liaisons fortes (tight-binding)	7
1.4 Le modèle linéaire de Su-Schrieffer-Heeger	9
1.5 Les résultats de Kennedy-Lieb et García Arroyo- Séré	12
1.6 Présentation des résultats du Chapitre 2 : transition de phase	16
1.7 Présentation des résultats du Chapitre 3 : décroissance exponentielle des points critiques.	19
1.8 Conclusions et perspectives	21
2 Phase transition in the Peierls model for polyacetylene	23
1 Introduction	25
2 Proofs in the finite chain Peierls model with temperature	29
3 Proofs in the thermodynamic model	37
Appendix A Gain of energy in the thermodynamic limit	41
Annexe B Convexité de la trace	42
3 Exponential decay of the critical points	45
1 Introduction	47
2 Critical points for the infinite Peierls-SSH model, and main result	48
3 Smoothness and Taylor expansion of the map $\mathcal{F}_t$	54
4 Proofs of the Lemmas	59

A Le cas des chaînes ouvertes	65
1 Exemples des cas $L = 3$, et $L = 4$	65
Bibliographie	69

Introduction

Cette thèse présente une étude mathématique et numérique de l'instabilité de Peierls dans le modèle discret du polyacétylène. Pour commencer, nous présentons les polymères dont fait partie le polyacétylène et les modèles usuels qui les décrivent comme le modèle des liaisons fortes¹. Par la suite nous présenterons le célèbre exemple du modèle de Su-Shrieffer-Heeger (SSH) dans lequel se manifeste l'instabilité de Peierls. Nous présenterons également les résultats mathématiques déjà connus sur l'instabilité de Peierls et aussi quelques résultats numériques et terminerons par la présentation des résultats que nous avons obtenus au cours de nos travaux.

1.1 Les polymères

Les polymères sont des macromolécules formées par la répétition de petites unités appelées monomères. Ils sont présents dans de nombreux domaines de notre vie quotidienne, allant des plastiques aux fibres textiles en passant par les matériaux de construction et les emballages [Cha13]. Les polymères se distinguent par leurs propriétés uniques, leur diversité de structures et leurs multiples applications [CA07].

Les polymères peuvent être classés en différentes catégories en fonction de leur origine, de leur structure et de leurs propriétés. Les polymères naturels sont d'origine biologique et sont présents dans les plantes, les animaux et les micro-organismes. Un exemple courant de polymère naturel est l'amidon, qui se trouve dans les plantes et est utilisé comme source d'énergie. Les polymères synthétiques, quant à eux, sont fabriqués par l'homme et comprennent des matériaux tels que le polyéthylène, le polystyrène et le polypropylène.

L'étude des polymères a connu une croissance exponentielle au cours des dernières décennies, ce qui a conduit à de nombreuses avancées dans la synthèse, la caractérisation et les applications des polymères.

Les applications des polymères sont vastes et variées. Dans l'industrie, les polymères sont utilisés dans la fabrication de plastiques, de fibres synthétiques, de revêtements, de films et de matériaux composites. Les polymères jouent un rôle essentiel dans l'emballage alimentaire, les dispositifs médicaux, les textiles, les appareils électroniques et de nombreuses autres applications technologiques. Plus récemment, les polymères biodégradables sont de plus en plus utilisés pour réduire l'impact environnemental des déchets plastiques.

1. Tight-binding en anglais

1.1.1 Les polymères conducteurs

Les polymères conducteurs sont des polymères qui présentent des propriétés électriques de conductivité, ce qui les distingue des polymères traditionnels qui sont généralement des isolants. Ces polymères ont suscité un vif intérêt en raison de leurs applications potentielles dans les domaines de l'électronique organique, des capteurs, des dispositifs d'affichage et de l'énergie. Leur conductivité peut être ajustée par dopage avec certaines substances, ce qui permet de moduler leurs propriétés électriques.

L'un des premiers polymères conducteurs découverts est le polyacétylène, qui a été synthétisé pour la première fois en 1958. Depuis lors, de nombreux autres polymères conducteurs ont été développés, tels que le polypyrrole, le polythiophène et le polyaniline. Ces polymères présentent une structure chimique spécifique qui favorise le déplacement des charges le long de la chaîne polymérique, d'où leur grande conductivité.

1.1.2 Le polyacétylène

Le polyacétylène est un polymère conjugué d'importance significative dans le domaine de la chimie des polymères et de la science des matériaux. Il se distingue par ses propriétés électriques et optiques uniques, ce qui en fait un matériau d'intérêt pour diverses applications telles que les dispositifs électroniques organiques, les capteurs, les cellules solaires et les supercondensateurs [Shi+77].

On peut distinguer le trans-polyacétylène, avec toutes les liaisons doubles en configuration trans, du cis-polyacétylène, où toutes les liaisons sont en configuration cis.



FIGURE 1.1 – Les isomères du polyacétylène

Le polyacétylène présente des propriétés physiques et chimiques remarquables. Les propriétés optiques du polyacétylène dépendent de la longueur de la chaîne et peuvent être modulées par dopage ou par conjugaison avec des groupes fonctionnels. En 2000, H. Shirakawa, A. Heeger et A. MacDiarmid ont été récompensés du Prix Nobel de la chimie pour avoir démontré que la conductivité du polyacétylène peut être multipliée par 13 par dopage avec différentes substances (comme de l'iode par exemple) [Chi12].

En plus de ses propriétés électriques et optiques, le polyacétylène présente une bonne stabilité thermique et une résistance mécanique élevée. Cependant, il peut être sensible à l'oxydation et à l'humidité, ce qui limite ses applications pratiques. Des recherches sont en cours pour améliorer la stabilité du polyacétylène et développer des méthodes de fabrication plus efficaces.

Les applications du polyacétylène sont diverses et en constante expansion. Dans le domaine des dispositifs électroniques organiques, le polyacétylène est utilisé comme matériau actif dans les transistors, les diodes électroluminescentes organiques (OLED) et les cellules solaires. Sa conductivité élevée lorsqu'il est dopé et sa flexibilité en font un candidat prometteur pour les circuits imprimés souples et les écrans électroniques pliables.

Nous présentons dans la section suivante une introduction à la seconde quantification, per-

mettant de définir les opérateurs de création et d'annihilation, ainsi que la matrice densité à un corps. Ces opérateurs seront utilisés par la suite pour la définition et l'étude du modèle de SSH.

1.2 Introduction à la seconde quantification

Afin de présenter les modèles usuels qui décrivent ces chaînes, nous introduisons la notion de la seconde quantification. Nous commençons par définir les opérateurs de création et d'annihilation, par la suite, nous déduisons des différentes propriétés de ces deux opérateurs, les relations les liant communément appelées les relations d'anticommutation. La motivation derrière l'utilisation du formalisme de la seconde quantification provient du fait que la première quantification, qui est initialement utilisée pour décrire les concepts en mécanique quantique [Lew22, Chp 1.], devient plus compliquée lorsqu'il y a plusieurs électrons dans le système. Cependant, l'information contenue dans ce système est en réalité simple : chaque orbitale ne peut contenir qu'un électron avec une fonction d'onde antisymétrique. La seconde quantification offre une façon simple et concise d'écrire l'Hamiltonien quantique. L'idée ici n'est pas de présenter la théorie générale sur la seconde quantification, mais d'introduire certaines définitions et propriétés nécessaires pour l'écriture de l'Hamiltonien des modèles que nous étudions, notamment celui de SSH. Le lecteur intéressé par la théorie générale pourra consulter [SO12], [HJO13]. Nous commençons par définir l'espace de Fock, qui est le cadre de travail dans le formalisme de la seconde quantification.

Espace de Fock

Soit $\mathcal{H}$ l'espace de Hilbert décrivant les états quantiques à une particule, alors l'espace de **Fock** noté $\mathcal{F}_{\mathcal{H}}$ est l'espace de Hilbert (de dimension infinie si $\mathcal{H}$ est de dimension infinie) de tous les états quantiques incluant, l'état sans électron (l'état vide), à un électron, à deux électrons, etc... Considérons $\{\varphi_i\}_{i=1}^M$ ($M \in \mathbb{N}^*$) une base orthonormée d'orbitales moléculaires (qui sont des fonctions d'ondes monoélectroniques), et une suite croissante d'entiers $1 \leq i_1 < \dots < i_N \leq M$ ($N \in \mathbb{N}^*$ avec $N \leq M$). On définit le déterminant de Slater de N électrons comme une fonction antisymétrique normalisée donnée pour tout $x = (x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^{3N}$ ($x_i \in \mathbb{R}^3$) par

$$\psi(x_1, \dots, x_N) := \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{i_1}(x_1) & \dots & \varphi_{i_1}(x_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{i_N}(x_1) & \dots & \varphi_{i_N}(x_N) \end{vmatrix}. \quad (1.1)$$

Ainsi, l'espace de Fock $\mathcal{F}_{\mathcal{H}}$ est l'espace de Hilbert dans lequel chaque déterminant est représenté par un vecteur nombres d'occupation (NO) noté $|\mathbf{k}\rangle$, défini par

$$|\mathbf{k}\rangle = |k_1, k_2, \dots, k_M\rangle, \text{ avec } k_i = \begin{cases} 1 & \text{si } \varphi_i \text{ est occupée} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}, \quad (1.2)$$

où φ_i est occupée si $i \in \{i_1, \dots, i_N\}$. Les vecteurs NO $|\mathbf{k}\rangle$ forment une base orthonormée de l'espace de Fock et tout vecteur $|\mathbf{c}\rangle$ de $\mathcal{F}_{\mathcal{H}}$ s'écrit en fonction des $|\mathbf{k}\rangle$ sous la forme

$$|\mathbf{c}\rangle = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle.$$

Nous définissons à présent l'état vide, qui est l'état sans électron.

État vide

L'état vide n'est pas le vecteur nul (dont la norme est nulle) de l'espace de Hilbert des états quantiques à plusieurs électrons, mais un état quantique noté $|\mathbf{0}\rangle$ (ou $|\text{vac}\rangle$) sans électron qui satisfait la condition $\langle \mathbf{0} | \mathbf{0} \rangle = 1$, en utilisant la notation de Dirac.

Le vecteur nombres d'occupation sans électron est l'état vide et est donné par

$$|\mathbf{0}\rangle = |0, 0, \dots, 0\rangle. \quad (1.3)$$

Tous les opérateurs en seconde quantification peuvent être construits à partir d'un ensemble d'opérateurs de création, d'annihilation, et du vecteur nombres d'occupation sans électron $|\mathbf{0}\rangle$.

Remarque 1.1. *Afin de simplifier la présentation, nous omettons dans ce travail les variables de spin, car dans la plupart des études mathématiques comme dans notre cas par exemple, les variables de spin ne jouent aucun rôle sinon d'alourdir les notations.*

Opérateurs de création

Pour tout $p \in \llbracket 1, M \rrbracket$, les opérateurs de création sont définis par [HJO13]

$$c_p^\dagger |k_1, k_2, \dots, \underbrace{0}_p, \dots, k_M\rangle = \Gamma_p^{\mathbf{k}} |k_1, k_2, \dots, \underbrace{1}_p, \dots, k_M\rangle \quad (1.4)$$

$$c_p^\dagger |k_1, k_2, \dots, \underbrace{1}_p, \dots, k_M\rangle = 0, \quad (1.5)$$

avec $\Gamma_p^{\mathbf{k}} \in \{\pm 1\}$ défini par

$$\Gamma_p^{\mathbf{k}} = \prod_{j=1}^{p-1} (-1)^{k_j}. \quad (1.6)$$

Le facteur $\Gamma_p^{\mathbf{k}}$ vaut $\Gamma_p^{\mathbf{k}} = +1$ s'il y a un nombre pair d'électrons à gauche de la composante p dans le vecteur (NO) et vaut $\Gamma_p^{\mathbf{k}} = -1$, si au contraire il y a un nombre impair d'électrons. La définition (1.5) stipule que les électrons appartenant à un même système, ne peuvent pas se trouver simultanément dans le même état quantique. C'est le **principe d'exclusion de Pauli**.

Certaines propriétés des opérateurs de création peuvent être déduites des relations (1.4) et (1.5), nous les présentons comme suit. On a

$$c_p^\dagger |\mathbf{k}\rangle = \delta_{0,k_p} \Gamma_p^{\mathbf{k}} |k_1, \dots, \underbrace{1}_p, \dots, k_M\rangle. \quad (1.7)$$

En agissant deux fois $c_p^\dagger$ sur $|\mathbf{k}\rangle$ on obtient par (1.7) et (1.5)

$$c_p^\dagger c_p^\dagger |\mathbf{k}\rangle = c_p^\dagger \delta_{0,k_p} \Gamma_p^{\mathbf{k}} |k_1, \dots, \underbrace{1}_p, \dots, k_M\rangle = 0, \text{ ou encore } c_p^\dagger c_p^\dagger = 0. \quad (1.8)$$

Pour $p \neq q$, $c_p^\dagger$ et $c_q^\dagger$ peuvent agir sur $|\mathbf{k}\rangle$ de deux façons. Pour $q > p$, on obtient

$$c_p^\dagger c_q^\dagger |\dots, k_p, \dots, k_q, \dots\rangle = \delta_{0,k_p} \delta_{0,k_q} \Gamma_p^{\mathbf{k}} \Gamma_q^{\mathbf{k}} |\dots, \underbrace{1}_p, \dots, \underbrace{1}_q, \dots\rangle, \text{ et} \quad (1.9)$$

$$c_q^\dagger c_p^\dagger |\dots, k_p, \dots, k_q, \dots\rangle = \delta_{0,k_p} \delta_{0,k_q} \Gamma_p^{\mathbf{k}} (-\Gamma_q^{\mathbf{k}}) |\dots, \underbrace{1}_p, \dots, \underbrace{1}_q, \dots\rangle. \quad (1.10)$$

En additionnant (1.9) et (1.10) on a : $c_p^\dagger c_q^\dagger + c_q^\dagger c_p^\dagger = 0$, ce qui reste toujours vrai si $q < p$. Par (1.8), ceci est aussi vrai pour $p = q$. Par conséquent pour toute paire d'opérateurs de création, on a la relation d'anticommutation

$$c_p^\dagger c_q^\dagger + c_q^\dagger c_p^\dagger = \{c_p^\dagger, c_q^\dagger\} = 0. \quad (1.11)$$

En utilisant l'opérateur de création, l'état de l'espace de Fock à un électron dans l'état φ_p peut être réécrit sous la forme

$$\varphi_p = c_p^\dagger |\mathbf{0}\rangle. \quad (1.12)$$

Opérateurs d'annihilation

L'adjoint de l'opérateur de création $c_p^\dagger$ est appelé opérateur d'annihilation c_p . Les opérateurs de création et leurs adjoints sont des opérateurs distincts, par conséquent ne sont pas auto-adjoints.

Par la relation (1.11), en utilisant les propriétés de l'adjoint des opérateurs on a :

$$c_p c_q + c_q c_p = \{c_p, c_q\} = 0. \quad (1.13)$$

Pour un opérateur d'annihilation c_p agissant sur $|\mathbf{k}\rangle$, on a [HJO13]

$$c_p |\mathbf{k}\rangle = \delta_{1,k_p} \Gamma_p^{\mathbf{k}} |k_1, \dots, \underbrace{0}_p, \dots, k_M\rangle. \quad (1.14)$$

De plus agissant sur $|\mathbf{0}\rangle$, on obtient le vecteur nul ($c_p |\mathbf{0}\rangle = 0$).

Relations d'anticommutation

Les opérateurs de création anti-commutent entre eux, et par les propriétés de l'adjoint, il en est de même pour les opérateurs d'annihilation. En combinant (1.4) et (1.14), on a

$$c_p^\dagger c_p |\mathbf{k}\rangle = \delta_{1,k_p} |\mathbf{k}\rangle, \quad c_p c_p^\dagger |\mathbf{k}\rangle = \delta_{0,k_p} |\mathbf{k}\rangle, \quad \text{donc} \quad c_p^\dagger c_p + c_p c_p^\dagger = \{c_p^\dagger, c_p\} = 1. \quad (1.15)$$

Dans le cas $p \neq q$ on a pour $p > q$,

$$c_p^\dagger c_q |\mathbf{k}\rangle = -\delta_{0,k_p} \delta_{1,k_q} \Gamma_p^{\mathbf{k}} \Gamma_q^{\mathbf{k}} |k_1, \dots, \underbrace{0}_q, \dots, \underbrace{1}_p, \dots, k_M\rangle \text{ et} \quad (1.16)$$

$$c_q c_p^\dagger |\mathbf{k}\rangle = \delta_{0,k_p} \delta_{1,k_q} \Gamma_p^{\mathbf{k}} \Gamma_q^{\mathbf{k}} |k_1, \dots, \underbrace{0}_q, \dots, \underbrace{1}_p, \dots, k_M\rangle. \quad (1.17)$$

On a un signe négatif devant (1.16) car dans $c_q |\mathbf{k}\rangle$, le nombre d'orbitales moléculaires occupées situées à gauche de l'orbitale p est réduit de 1. En sommant (1.16) et (1.17) on obtient

$$(c_p^\dagger c_q + c_q c_p^\dagger) |\mathbf{k}\rangle = 0, \text{ pour } p > q. \quad (1.18)$$

Par le même argument, la dernière égalité reste vraie pour $p < q$, c'est-à-dire

$$(c_p^\dagger c_q + c_q c_p^\dagger) |\mathbf{k}\rangle = 0, \text{ pour } p < q. \quad (1.19)$$

En combinant, (1.15), (1.18) et (1.19), on a

$$c_p^\dagger c_q + c_q c_p^\dagger = \{c_p^\dagger, c_q\} = \delta_{p,q}. \quad (1.20)$$

En résumé nous avons pour tout p et q :

$$\boxed{\{c_p^\dagger, c_q^\dagger\} = 0, \quad \{c_p, c_q\} = 0, \text{ et } \{c_p^\dagger, c_q\} = \delta_{p,q}}. \quad (1.21)$$

De ces simples relations appelées **CAR**² découlent toutes les autres propriétés algébriques du formalisme de la seconde quantification.

2. Canonical Anticommutation Relations.

Les opérateurs nombres d'occupation

Les opérateurs nombres d'occupation sont définis par

$$N_p = c_p^\dagger c_p. \quad (1.22)$$

L'opérateur N_p compte le nombre d'électrons de l'orbitale p . Lorsqu'il agit sur le vecteur NO $|\mathbf{k}\rangle$ On a

$$N_p|\mathbf{k}\rangle = c_p^\dagger c_p|\mathbf{k}\rangle = \delta_{1,k_p}|\mathbf{k}\rangle = k_p|\mathbf{k}\rangle, \quad (1.23)$$

donc les vecteurs $|\mathbf{k}\rangle$ sont des vecteurs propres de N_p de valeurs propres $k_p \in \{0, 1\}$. Les opérateurs NO sont hermitiens et commutent entre eux car

$$N_p^\dagger = (c_p^\dagger c_p)^\dagger = c_p^\dagger c_p = N_p, \quad \text{et} \quad N_p N_q |\mathbf{k}\rangle = k_p k_q |\mathbf{k}\rangle = k_q k_p |\mathbf{k}\rangle = N_q N_p |\mathbf{k}\rangle. \quad (1.24)$$

Dans la base des orbitales moléculaires, ces opérateurs sont des projections car ils vérifient

$$N_p^2 = c_p^\dagger c_p c_p^\dagger c_p = c_p^\dagger (1 - c_p^\dagger c_p) c_p = c_p^\dagger c_p = N_p. \quad (1.25)$$

De plus on a

$$\text{pour } |\mathbf{c}\rangle = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle \in \mathcal{F}, \quad N_p |\mathbf{c}\rangle = \sum_{\mathbf{k}} k_p c_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle, \quad (1.26)$$

$$[N_p, c_q^\dagger] = N_p c_q^\dagger - c_q^\dagger N_p = \delta_{p,q} c_q^\dagger \quad \text{et} \quad [N_p, c_q] = -\delta_{p,q} c_q. \quad (1.27)$$

L'opérateur nombre de particules

La somme de tous les opérateurs $N_p, p \in \llbracket 1, M \rrbracket$ notée N_{pa} est appelée opérateur nombre de particules donnée par

$$N_{\text{pa}} = \sum_{p=1}^M c_p^\dagger c_p, \quad (1.28)$$

et agissant sur le vecteur NO $|\mathbf{k}\rangle$ donne

$$N_{\text{pa}}|\mathbf{k}\rangle = \sum_{p=1}^M k_p |\mathbf{k}\rangle = N|\mathbf{k}\rangle, \quad (1.29)$$

où $N = \sum_{p=1}^M k_p$ est le nombre de particules ou le nombre d'orbitales occupées dans le déterminant de Slater représenté par le vecteur $|\mathbf{k}\rangle$.

La matrice densité à un corps

Soit $|\mathbf{f}\rangle \in \mathcal{F}_{\mathcal{H}}$ un état normalisé. La matrice densité à un corps de $|\mathbf{f}\rangle$ est la matrice $M \times M$ notée $\gamma := \gamma^{\mathbf{f}}$, définie par $\gamma = (\gamma_{p,q})_{1 \leq p,q \leq M}$, avec ses éléments donnés par

$$\gamma_{p,q} = \langle \mathbf{f} | c_p^\dagger c_q | \mathbf{f} \rangle, \quad (1.30)$$

La matrice γ est hermitienne car vérifie

$$\gamma_{q,p}^* = \langle \mathbf{f} | c_q^\dagger c_p | \mathbf{f} \rangle^* = \langle \mathbf{f} | c_p^\dagger c_q | \mathbf{f} \rangle = \gamma_{p,q},$$

où l'étoile signifie le complexe conjugué. γ vérifie l'inégalité $0 \leq \gamma \leq 1$ [HJO13, Section 1.7], c'est-à-dire, les valeurs propres de la matrice densité à un corps γ appartiennent à $[0, 1]$. Les éléments diagonaux de la matrice γ notés ρ_p sont appelés les nombres d'occupation de l'état électronique et donnés par

$$\rho_p = \gamma_{p,p} = \langle \mathbf{f} | N_p | \mathbf{f} \rangle. \quad (1.31)$$

Si $|\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{k}\rangle$ (où $|\mathbf{k}\rangle$ est un vecteur NO), alors $\langle \mathbf{k} | N_p | \mathbf{k} \rangle = k_p$. En utilisant (1.26) et le fait les vecteurs $|\mathbf{k}\rangle$ sont orthonormés on a :

$$\rho_p = \langle \mathbf{f} | N_p | \mathbf{f} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} k_p |\mathbf{f}_{\mathbf{k}}|^2.$$

Comme $|\mathbf{f}\rangle$ se normalise à 1, on a $\sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{f}_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. Rappelons que $k_p \in \{0, 1\}$, ainsi les ρ_p sont égaux à 0 pour les orbitales non-occupées et à 1 pour les orbitales occupées pour tous vecteurs NO de la base. Pour les orbitales occupées pour certains vecteurs NO de la base mais non-occupées pour d'autres on a

$$0 \leq \rho_p \leq 1. \quad (1.32)$$

La trace de la matrice densité à un corps est donnée par

$$\text{Tr}(\gamma) = \sum_{p=1}^M \rho_p = \sum_{p=1}^M \langle \mathbf{f} | N_p | \mathbf{f} \rangle = \langle \mathbf{f} | N_{\text{pa}} | \mathbf{f} \rangle = N. \quad (1.33)$$

Pour un état électronique contenant plusieurs vecteurs NO, les éléments de la matrice densité à un corps satisfont par l'inégalité de Cauchy-Schwarz,

$$|\gamma_{p,q}| = |\langle \mathbf{f} | c_p^\dagger c_q | \mathbf{f} \rangle| \leq \sqrt{\langle \mathbf{f} | c_p^\dagger c_p | \mathbf{f} \rangle \langle \mathbf{f} | c_q^\dagger c_q | \mathbf{f} \rangle} = \sqrt{\rho_p \rho_q}. \quad (1.34)$$

Nous passons à présent à la deuxième notion de cette partie, qui introduit le modèle de liaisons fortes (tight-binding). Ce modèle prend en compte uniquement les interactions entre les plus proches voisins. Dans toute notre étude, nous ne nous intéressons qu'aux modèles unidimensionnels qui sont soit finis, soit infinis. Les deux prochaines parties ont été inspirées du livre [BF04]. Les simulations numériques ont été réalisées en python par l'auteur de cette thèse.

1.3 Modèle de liaisons fortes (tight-binding)

La forme générale de l'Hamiltonien des modèles de liaisons fortes est donnée par [BF04]

$$H := H_{TB} = \sum_{x,y} t_{x,y} c_x^\dagger c_y, \quad (1.35)$$

où on somme sur les sites du réseau x et y , $t_{x,y} \in \mathbb{C}$ l'amplitude de saut, décrivant le mouvement d'un électron du site x vers l'un de ses sites voisins y , $c_x^\dagger$ crée un électron au site x , et c_y détruit un électron au site y . Pour avoir un Hamiltonien hermitien, nous imposons que $t_{x,y} = t_{y,x}^*$. Cet Hamiltonien peut être écrit sous la forme

$$H = \sum_x e_x c_x^\dagger c_x + \sum_{\langle x,y \rangle} t_{x,y} c_x^\dagger c_y, \quad (1.36)$$

où $t_{x,x} = e_x$. Très souvent, on ne considère que les couples $\langle x, y \rangle$ où x et y sont des sites voisins. Ce modèle décrit de nombreux matériaux de la matière condensée, ainsi que de nombreux systèmes moléculaires. Cet Hamiltonien est dit quadratique en raison des paires d'opérateurs de création et d'annihilation, $c_x^\dagger$ et c_y . L'une des techniques utilisées pour l'étude de ces modèles, dans certains cas particuliers, est la transformation canonique.

1.3.1 Transformation canonique

La meilleure approche pour étudier les modèles de liaisons fortes (pour un système infini) consiste à effectuer une "transformation canonique" afin de ramener H sous une forme diagonale pour les systèmes sans interaction [BF04].

La transformation canonique est une transformation qui préserve les relations d'anticommutation des opérateurs fermioniques originaux. D'après la section précédente, pour un ensemble d'opérateurs fermioniques que nous désignons par les opérateurs de création $c_x^\dagger$, et d'annihilation c_x nous rappelons les relations d'anticommutation

$$\{c_x, c_y^\dagger\} = \delta_{x,y}, \quad \{c_x^\dagger, c_y^\dagger\} = \{c_x, c_y\} = 0.$$

Nous cherchons une transformation linéaire de ces opérateurs fermioniques qui préserve les relations d'anticommutation. Nous définissons la transformation canonique de c_i par

$$F_k = \sum_{x \in \mathbb{Z}} \mathcal{U}_{x,k}^* c_x, \quad (1.37)$$

avec $\mathcal{U} = (\mathcal{U}_{x,y})_{x,y}$ un opérateur unitaire ($\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U} = \mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger = 1$). Ces opérateurs F_k , satisfont les relations d'anticommutation, c'est-à-dire

$$\{F_k, F_{k'}^\dagger\} = \delta_{k,k'}, \quad \{F_k^\dagger, F_{k'}^\dagger\} = \{F_k, F_{k'}\} = 0.$$

Soit C et F des vecteurs d'opérateurs définis par

$$C = (c_1, c_2, \dots)^T \quad \text{and} \quad F = (F_1, F_2, \dots)^T,$$

où c_x est l'opérateur d'annihilation et F_k défini en (1.37). Puisque $\mathcal{U}$ est unitaire, C est lié à F en utilisant la transformation canonique définie par la relation $C = \mathcal{U}F$. Nous pouvons maintenant écrire H sous la forme compacte

$$H = C^\dagger T C = F^\dagger \mathcal{U}^\dagger T \mathcal{U} F = F^\dagger D F, \quad (1.38)$$

où $C^\dagger = (c_1^\dagger, c_2^\dagger, \dots)$, avec $D = \mathcal{U}^\dagger T \mathcal{U}$, et $T = (t_{x,y})_{x,y}$ défini par

$$T = \begin{pmatrix} t_{1,1} & t_{1,2} & t_{1,3} & \dots \\ t_{2,1} & t_{2,2} & t_{2,3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix}. \quad (1.39)$$

Il reste maintenant à trouver une matrice unitaire $\mathcal{U}$ telle que $\mathcal{U}^\dagger T \mathcal{U} = D$ soit diagonale. Une fois cet opérateur unitaire trouvé, on obtient $D = (D_{k,k'})_{k,k'}$, avec $D_{k,k'} = \varepsilon_k \delta_{k,k'}$ appelée énergie associée à une particule. Comme D est diagonale, l'Hamiltonien H peut être écrit sous la forme

$$H = \sum_k \varepsilon_k F_k^\dagger F_k.$$

Par conséquent, si nous disposons de l'Hamiltonien d'un modèle quadratique de liaisons fortes, nous pouvons toujours former cette matrice T , la diagonaliser et obtenir les énergies le long des éléments diagonaux ainsi que les fonctions d'onde.

1.3.2 Le modèle de liaisons fortes 1D à un site par cellule unité

Nous présentons un exemple de modèle de liaisons fortes 1D avec un site par cellule unité. Un exemple du modèle avec deux sites par cellule unité est le célèbre modèle de SSH qui sera développé dans la section suivante.

Considérons N sites avec une orbitale par cellule, où chaque site a la même énergie constante $e_x = e \in \mathbb{R}$, avec la même amplitude $t \in \mathbb{R}$ entre les orbitales, notée par les liens horizontaux. Pour une simulation numérique du système par exemple, nous pouvons garder N fini, mais nous pouvons aussi considérer un système avec un nombre infini de sites. Pour un système fini (voir

Figure 1.2), nous pouvons relier le premier site au N -ème site pour former un anneau et avoir des conditions aux limites périodiques, ou le laisser tel quel et obtenir des conditions aux limites ouvertes.

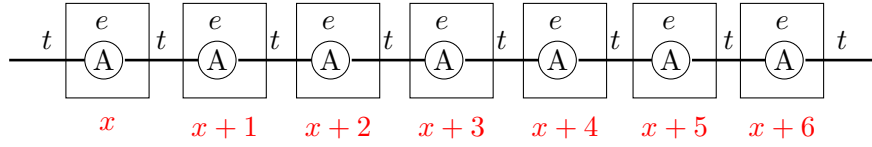


FIGURE 1.2 – Modélisation d’une chaîne 1D à un site par cellule unité, t représente l’amplitude entre les cellules unités, e est l’énergie par site.

Pour un nombre fini N de sites, l’Hamiltonien est

$$H = e \sum_{x=1}^N c_x^\dagger c_x + \sum_{x=1}^{N-1} t(c_x^\dagger c_{x+1} + c_{x+1}^\dagger c_x). \quad (1.40)$$

Ce modèle est appelé modèle à une bande, puisque nous avons une orbitale par cellule unité. Fixons $e = 0$ et considérons maintenant un système infini (nous obtenons ce que l’on appelle un fil quantique infini 1D). L’Hamiltonien obtenu est

$$H = \sum_{x \in \mathbb{Z}} t(c_x^\dagger c_{x+1} + c_{x+1}^\dagger c_x). \quad (1.41)$$

En raison de la simplicité de ce modèle, nous pouvons le résoudre analytiquement en utilisant la **transformation canonique** des opérateurs pour mettre le système sous forme diagonale. Dans ce cas, la transformation canonique sera la transformée de Fourier en raison de la périodicité du système. Soit c_k la série de Fourier de c_x définie pour $k \in [-\pi, \pi]$ par

$$c_k = Z \sum_{x \in \mathbb{Z}} e^{-ikx} c_x,$$

où k est la quantité de mouvement le long de la direction x , qui appartient à l’espace réciproque de l’espace réel, et Z est un facteur de normalisation. Par la transformation inverse de Fourier, on a $c_x = Z \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{ikx} c_k$. Ces transformations sont des transformations canoniques, puisque nous avons

$$\{c_k, c_{k'}\} = \{c_k^\dagger, c_{k'}^\dagger\} = 0, \quad \text{et} \quad \{c_k, c_{k'}^\dagger\} = \delta_{k,k'}$$

L’expression de l’Hamiltonien en utilisant cette transformation canonique est donnée par

$$H = t \int_{-\pi}^{\pi} dk \int_{-\pi}^{\pi} dk' (e^{ik'} + e^{-ik}) Z \sum_{x \in \mathbb{Z}} e^{ix(k'-k)} c_k^\dagger c_{k'} = \int_{-\pi}^{\pi} dk \varepsilon_k c_k^\dagger c_k,$$

où dans la dernière égalité, nous avons utilisé $Z \sum_{x \in \mathbb{Z}} e^{ix(k'-k)} = \delta_{k,k'}$, et $\varepsilon_k = 2t \cos(k)$. L’Hamiltonien a été complètement diagonalisé, et la fonction $[-\pi, \pi] \ni k \mapsto \varepsilon_k$ nous indique comment l’énergie est liée à la quantité de mouvement. Cette fonction est souvent appelée bande de Bloch.

1.4 Le modèle linéaire de Su-Schrieffer-Heeger

Nous allons maintenant étudier un exemple de modèle unidimensionnel (1D) avec deux sites par cellule unité, le modèle de SSH [SSH79; Su80].

Le modèle de Su-Schrieffer-Heeger (SSH) est un modèle unidimensionnelle (1D) qui se comporte comme un isolant lorsqu’on se trouve au milieu de la chaîne, loin des bords, avec

deux sites par cellule unité. Ce modèle a un trou spectral. Dans le cas d'une chaîne finie (chaîne avec un nombre fini de sites), on a des états de bord localisés, qui se trouvent juste aux bords de la chaîne. Ces états sont exponentiellement localisés si l'on considère la fonction d'onde.

Le modèle de SSH est une chaîne 1D dimérisée avec deux amplitudes de saut alternant entre les sites voisins. Il a été proposé comme modèle pour décrire **une chaîne de polyacétylène**, qui présente les deux structures suivantes :

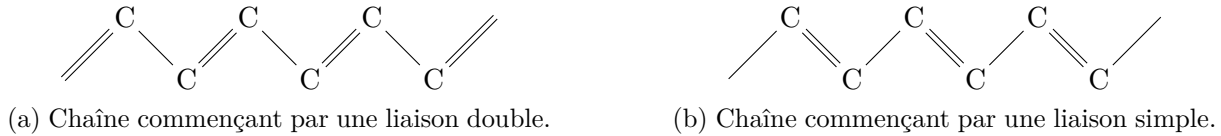


FIGURE 1.3 – Les deux structures dimérisées d'une chaîne de polyacétylène.

Nous avons un système alternant des liaisons doubles et simples ou des liaisons simples et doubles en dimension 1. Pour une étude mathématique on pourrait considérer un système constitué de deux atomes différents dans une cellule unité à deux sites, avec deux amplitudes différentes. Ce modèle étant constitué de deux sites par cellule unité, on a deux bandes de Bloch (comme nous le montrons ci-dessous) appelées bandes de valence et de conduction.

Instabilité de Peierls

L'instabilité de Peierls [Pei55; Frö54] est un phénomène par lequel une chaîne fermée unidimensionnelle à moitié remplie (chaîne 1-périodique) déforme spontanément sa structure pour ouvrir un espace (spectral gap en anglais) entre les bandes de valence et de conduction. La chaîne obtenue est appelée chaîne dimérisée. L'énergie de l'état fondamental de la chaîne dimérisée est inférieure à celle de la chaîne homogène (1-périodique), car à mi-remplissage, la bande de valence remplie est déplacée vers le bas et son énergie est abaissée par l'ouverture du trou spectral (confère Figure 1.5).

Au cours de cette déformation de la chaîne 1-périodique, certains sites se rapprochent les uns des autres en formant des liaisons doubles (liaisons fortes), et en ce faisant, s'éloignent des autres formant ainsi des liaisons simples (liaisons faibles). On obtient alors une alternance de liaisons fortes (en bleu) et de liaisons faibles (en rouge), ce qui constitue une brisure de symétrie spontanée (on pourrait avoir également les liaisons doubles entre deux sites de la même cellule et les liaisons simples entre les cellules unités). Cela permet d'ouvrir un trou dans le spectre de l'Hamiltonien. On obtient deux structures de bandes. La bande inférieure est complètement remplie, et est appelée la bande de valence, et la bande supérieure est complètement vide, appelée la bande de conduction. Le modèle de SSH décrit l'instabilité de Peierls (et d'autres systèmes aussi).

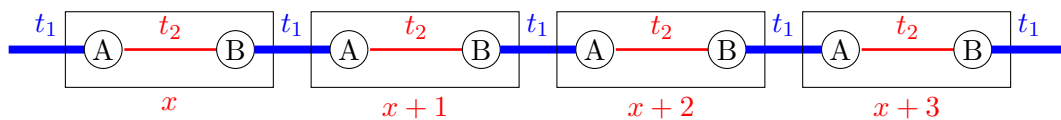


FIGURE 1.4 – Modélisation de la distorsion de Peierls pour une chaîne infinie, t_1 est l'amplitude entre les cellules unités, alors que t_2 est celle à l'intérieur des cellules unités.

Nous décrivons le modèle linéaire de SSH à l'aide de la Figure 1.4. Désignons la cellule unité de cette chaîne à deux sites par $x \in \mathbb{Z}$ et le voisin de droite par $x+1$ ainsi de suite. À l'intérieur de la cellule unité, on désigne le site de gauche par A, et celui de droite par B. En ne considérant

que la partie quadratique, l'Hamiltonien du modèle de SSH est donné par [SSH80 ; SSH79]

$$H_{SSH} = \sum_{x \in \mathbb{Z}} \left(t_2 (c_{x,A}^\dagger c_{x,B} + c_{x,B}^\dagger c_{x,A}) + t_1 (c_{x,B}^\dagger c_{x+1,A} + c_{x+1,A}^\dagger c_{x,B}) \right), \quad (1.42)$$

avec t_1 et t_2 des réels positifs. Cet Hamiltonien est celui du système infini, et peut être écrit sous une forme compacte comme suit :

$$H_{SSH} = \sum_{x \in \mathbb{Z}} \left(C_x^\dagger E C_x + C_x^\dagger T C_{x+1} + C_{x+1}^\dagger T^\dagger C_x \right), \quad (1.43)$$

où, $C_x = (c_{x,A}, c_{x,B})^T$, $C_x^\dagger = (c_{x,A}^\dagger, c_{x,B}^\dagger)$, $E = \begin{pmatrix} 0 & t_2 \\ t_2 & 0 \end{pmatrix}$, $T = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ t_1 & 0 \end{pmatrix}$, et $T^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & t_1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$.

L'objectif est de diagonaliser cet Hamiltonien par la transformée de Fourier comme dans la section précédente. Introduisons les vecteurs d'opérateurs C_k , définis pour $k \in [-\pi, \pi]$ par

$$C_k = Z \sum_{x \in \mathbb{Z}} e^{-ikx} C_x, \quad \text{avec} \quad C_k^\dagger = Z \sum_{x \in \mathbb{Z}} e^{ikx} C_x^\dagger$$

Alors, $C_x = Z \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{ikx} C_k^\dagger$, et $C_x^\dagger = Z \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{-ikx} C_k$. En remplaçant cette expression dans (1.43) on obtient,

$$\begin{aligned} H_{SSH} &= \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk dk' \left(C_k^\dagger E C_{k'} \delta_{k,k'} + C_k^\dagger T C_{k'} \delta_{k,k'} e^{ik'} + C_k^\dagger T^\dagger C_{k'} \delta_{k,k'} e^{-ik} \right) \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} dk C_k^\dagger M(k) C_k, \end{aligned}$$

où $M(k) = E + T e^{ik} + T^\dagger e^{-ik} = \begin{pmatrix} 0 & t_2 + t_1 e^{-ik} \\ t_2 + t_1 e^{ik} & 0 \end{pmatrix}$. Cette matrice n'a pas d'éléments diagonaux, et les éléments hors diagonaux sont conjugués les uns des autres, puisque $t_1^* = t_1$ et $t_2^* = t_2$. Pour diagonaliser cette matrice, on peut prendre son carré donnée par

$$M(k)^2 = \begin{pmatrix} (t_2 + t_1 e^{-ik})(t_2 + t_1 e^{ik}) & 0 \\ 0 & (t_2 + t_1 e^{-ik})(t_2 + t_1 e^{ik}) \end{pmatrix} = (t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos(k)) \mathbb{1}_2,$$

où $\mathbb{1}_2$ est la matrice identité 2×2 , et on peut écrire que $M(k)^2 = \left((t_1 - t_2)^2 + 4t_1 t_2 \cos^2\left(\frac{k}{2}\right) \right) \mathbb{1}_2$. Les valeurs propres de $M(k)$ sont données par

$$\lambda_+(k) = \sqrt{(t_1 - t_2)^2 + 4t_1 t_2 \cos^2\left(\frac{k}{2}\right)} \quad \text{et} \quad \lambda_-(k) = -\sqrt{(t_1 - t_2)^2 + 4t_1 t_2 \cos^2\left(\frac{k}{2}\right)}.$$

Puisqu'il y a deux sites par cellule unité pour ce problème, nous obtenons des matrices 2×2 , et en fin de compte, nous avons deux valeurs propres de la matrice $M(k)$, ce qui correspond aux deux bandes de ce système. Comme les valeurs propres diffèrent l'une de l'autre par un signe moins, il y aura un écart qui séparera les deux bandes. Cet écart est appelé **trou spectral**. La taille du trou spectral est donnée par

$$\Delta = \min_{k \in [-\pi, \pi]} (\lambda_+(k) - \lambda_-(k)) = 2|t_1 - t_2|.$$

Lorsque $t_1 = t_2$, il n'y a pas de trou spectral, et nous avons un système qui se comporte comme un métal, ce qui signifie que nous avons une chaîne 1-périodique, et cela correspond au fil quantique 1D étudié dans la section précédente. Dans le cas $t_1 \neq t_2$, le système se comporte comme un isolant, puisque nous avons deux bandes séparées par un trou de taille Δ . L'Hamiltonien sous

sa forme diagonale est donnée par

$$H_{SSH} = \int_{-\pi}^{\pi} dk \sum_{\alpha=\pm} \lambda_{\alpha}(k) F_{\alpha,k}^{\dagger} F_{\alpha,k},$$

où $F_k = (F_{+,k}, F_{-,k})$, avec $C_k = \mathcal{U}F_k$, tel que $\mathcal{U}M(k)\mathcal{U} = \begin{pmatrix} \lambda_{+}(k) & 0 \\ 0 & \lambda_{-}(k) \end{pmatrix}$.

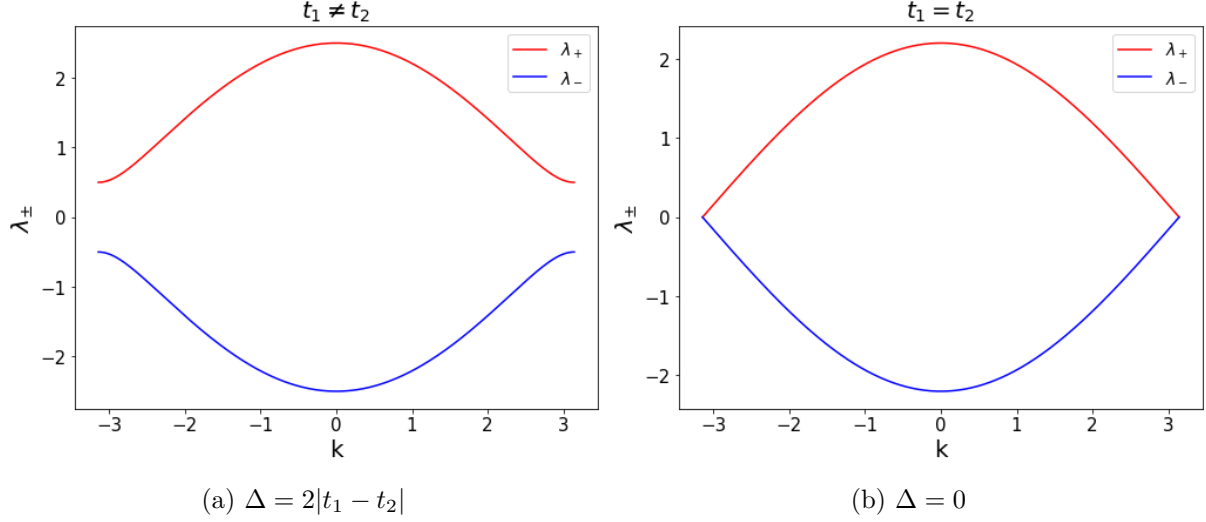


FIGURE 1.5 – La structure de bande du modèle de SSH en ne considérant que le terme quadratique. Dans les deux cas on a représenté les valeurs propres de H_{SSH} pour $k \in [-\pi, \pi]$.

Dans la section suivante, nous nous concentrons sur quelques résultats connus dans le cas des chaînes fermées, notamment celui de Kennedy et Lieb ainsi que celui de García Arroyo et Séré.

1.5 Les résultats de Kennedy-Lieb et García Arroyo- Séré

Dans cette partie nous présentons quelques résultats connus sur le modèle discret périodique du polyacétylène, en particulier les résultats de T. Kennedy et E. Lieb [KL04] sur une preuve de l'instabilité de Peierls en dimension 1, ainsi que celui de M. García Arroyo et E. Séré [GS12] sur l'existence des solutions "kink" dans un modèle discret de la molécule de polyacétylène.

En 1954, H. Fröhlich [Frö54] et R. Peierls [Pei55] ont montré qu'un système unidimensionnel avec une bande à moitié remplie baisse son énergie par dimérisation, passant d'une structure homogène à une structure dimérisée. On a donc une brisure de symétrie. La question était de savoir si cette dimérisation était exacte. C'est-à-dire si d'autres brisures de symétries pourraient baisser davantage l'énergie d'un système unidimensionnel. La réponse à cette question fut donnée par T. Kennedy et E. Lieb [KL04] en 1987, dans le cas d'une chaîne finie périodique avec un nombre pair d'atome d'atomes de carbone $L = 2N$.

1.5.1 Description du modèle (chaîne fermée périodique)

Considérons une chaîne fermée périodique unidimensionnelle, avec $L \in \mathbb{N}^*$ atomes de carbone. La description du modèle se fait pour tout nombre entier naturel d'atomes de carbone, mais le résultat de Kennedy et Lieb ne concerne que le cas $L = 2N$. On note t_i , l'amplitude de saut entre les sites i et $i+1$, et on suppose que cette amplitude est une fonction affine de la distance entre ces deux sites. La périodicité de la chaîne se traduit par la relation $t_{i+L} = t_i$. Soit $\{\mathbf{t}\} = \{t_1, \dots, t_L\}$,

la configuration formée par ces t_i . L'énergie de distorsion est donnée par,

$$U(\{\mathbf{t}\}) = \frac{1}{2}g \sum_{i=1}^L (t_i - b)^2,$$

où $g > 0$ est la rigidité de la chaîne et $b > 0$ une constante positive. Lorsqu'on considère une chaîne à moitié remplie, on a L (spin 1/2) électrons non appariés qui peuvent voyager le long de la chaîne, passant d'un site à un autre avec cette amplitude de saut t_i entre deux sites i et $i + 1$. En représentant les électrons par la matrice densité à un corps γ , qui est une matrice $L \times L$, auto-adjoint dont les valeurs propres sont comprises entre 0 et 1 (vérifiant le principe de Pauli), l'énergie de l'état fondamental des électrons du système est donnée par : $\forall i = 1, \dots, L$

$$K(\{\mathbf{t}\}) = 2 \sum_{\lambda_i(T) \leq 0} \lambda_i(T) = 2 \min_{0 \leq \gamma = \gamma^\dagger \leq 1} \text{Tr}(T\gamma),$$

où le facteur 2 représente le spin, $\lambda_i(T)$ les valeurs propres de T , et la matrice T donnée par

$$T := \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 & \cdots & t_L \\ t_1 & 0 & t_2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & t_{L-2} & 0 & t_{L-1} \\ t_L & 0 & \cdots & 0 & t_{L-1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.44)$$

Cette énergie électronique correspond à l'énergie fondamentale de l'Hamiltonien du modèle de liaison forte définie par $H = \sum_{i=1}^L t_i(c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i) = C^\dagger T C$, où $C^\dagger = (c_1^\dagger, c_2^\dagger, \dots, c_L^\dagger)$.

L'énergie totale du système est donc donnée par la somme des deux énergies $U(\{\mathbf{t}\})$ et $K(\{\mathbf{t}\})$,

$$\tilde{\mathcal{E}}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) = \frac{1}{2}g \sum_{i=1}^L (t_i - b)^2 + 2 \min_{0 \leq \gamma = \gamma^\dagger \leq 1} \text{Tr}(T\gamma).$$

Quitte à remplacer les t_i par bt_i , on peut réécrire la dernière expression par remise à l'échelle en posant $\mu = gb$ sous la forme

$$\tilde{\mathcal{E}}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) = b \left(\frac{1}{2}\mu \sum_{i=1}^L (t_i - 1)^2 + 2 \min_{0 \leq \gamma = \gamma^\dagger \leq 1} \text{Tr}(T\gamma) \right) = b\mathcal{E}(\{t\}).$$

Il suffit donc de considérer le problème de minimisation suivant :

$$E^{(L)} = \inf \left\{ \mathcal{E}^{(L)}(\{t\}, \gamma), \{\mathbf{t}\} \in (\mathbb{R}_+)^L, 0 \leq \gamma = \gamma^\dagger \leq 1 \right\},$$

où $\mathcal{E}^{(L)}$ est donnée par [KL04 ; LSM61 ; MN96 ; Pei55 ; SSH79 ; GKS23],

$$\mathcal{E}^{(L)}(\{t\}, \gamma) := \frac{1}{2}\mu \sum_{i=1}^L (t_i - 1)^2 + 2\text{Tr}(T\gamma). \quad (1.45)$$

$\mathcal{E}^{(L)}$ est appelée énergie de Peierls-SSH. C'est l'énergie d'une chaîne discrète de polyacétylène, comme introduite par SSH, pour décrire l'instabilité de Peierls. Dans le cas L infini, on a une chaîne de polyacétylène infinie. Dans le cas contraire on a une chaîne finie avec des conditions aux bords périodiques (chaînes fermées) ou ouvertes (chaînes ouvertes). On a le premier résultat suivant.

Lemme 1.2.

$$\min_{0 \leq \gamma = \gamma^\dagger \leq 1} \text{Tr}(T\gamma) = \text{Tr}(T\mathbb{1}(T \leq 0)) = -\frac{1}{2}\text{Tr}(|T|),$$

où $\mathbb{1}(T \leq 0)$ est la projection sur la partie négative de T et $|T| = \sqrt{T^2}$, car T est symétrique puisque les t_i sont réels.

Démonstration. Comme les coefficients diagonaux de T sont nuls, $\text{Tr}(T) = 0$. Alors

$$\text{Tr}(|T|) = -2\text{Tr}(T\mathbb{1}(T \leq 0)),$$

car $\text{Tr}(T) = \text{Tr}(T\mathbb{1}(T \leq 0)) + \text{Tr}(T\mathbb{1}(T > 0))$. De plus on a

$$\text{Tr}(T\gamma) = \text{Tr}(T\gamma\mathbb{1}(T \leq 0)) + \text{Tr}(T\gamma\mathbb{1}(T > 0)),$$

et en minimisant sur $0 \leq \gamma = \gamma^\dagger \leq 1$, on obtient

$$\min_{0 \leq \gamma = \gamma^\dagger \leq 1} \text{Tr}(T\gamma) = \text{Tr}(T\mathbb{1}(T \leq 0)).$$

□

On obtient un nouveau problème de minimisation

$$E^{(L)} = \inf \left\{ \mathcal{E}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}), \{\mathbf{t}\} \in (\mathbb{R}_+)^L \right\},$$

où $\mathcal{E}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) = \frac{1}{2}\mu \sum_{i=1}^L (t_i - 1)^2 - \text{Tr}(|T|)$ est invariant par translation entière, c'est-à-dire

$$\mathcal{E}^{(L)}(\{\tau_k \mathbf{t}\}) = \mathcal{E}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}), \text{ avec } \{\tau_k \mathbf{t}\} := \{t_{k+1}, \dots, t_{L+k}\}, k \in \mathbb{Z},$$

car $\Theta_k T(\{\mathbf{t}\})\Theta_k^{-1} = T(\{\tau_k \mathbf{t}\})$, avec Θ_k défini en (1.47).

1.5.2 Résultat de Kennedy et Lieb

Le résultat de Kennedy et Lieb concerne le cas des chaînes avec un nombre pair d'atomes et s'énonce comme suit.

Théorème 1.3. Soit $L = 2N$, avec $N \geq 2$ (N un entier). Pour N assez grand, $\mathcal{E}^{(2N)}$ a exactement deux configurations minimisantes de la forme

$$t_i^* = W + (-1)^i \delta \quad \text{ou} \quad t_i^* = W - (-1)^i \delta, \text{ avec } \delta > 0. \quad (1.46)$$

Remarque 1.4. Dans [KH82], $\delta > 0$ pour tout N pair ($L = 0 \pmod{4}$), alors que δ peut s'annuler pour N impair ($L = 2 \pmod{4}$), et est toujours non nul pour une valeur assez grande de N .

Démonstration. On définit par $\langle T^2 \rangle$, la moyenne de T^2 donnée par

$$\langle T^2 \rangle := \frac{1}{2N} \sum_{k=1}^{2N} \Theta_k T^2 \Theta_k^{-1}, \text{ où } \Theta_k = \Theta_1^k, \text{ avec } \Theta_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.47)$$

En utilisant le Théorème 2.15 (Hansen-Pederson), avec $f(x) = -\sqrt{x}$, qui est convexe, et en posant $\forall k \ A_k = T^2$ et $X_k = \frac{1}{\sqrt{2N}} \Theta_k$, on a

$$-\text{Tr}(\sqrt{T^2}) \geq -\text{Tr}(\sqrt{\langle T^2 \rangle}),$$

avec égalité pour les configurations $\{\mathbf{t}^*\}$ ayant leurs t_i^* données par la relation (1.46). Pour montrer que les configurations dont les t_i sont de la forme (1.46) sont les seuls minimiseurs de $\mathcal{E}^{(2N)}$, il suffit de montrer que cette fonctionnelle est strictement convexe. Les détails de cette partie peuvent être consultés dans [KL04]. $\square$

Kennedy et Lieb ont donc prouvé que dans le cas d'une chaîne avec un nombre pair d'atomes de carbones $L = 2N$, quitte à prendre N assez grand, qu'il n'existe pas d'autres brisures de symétries qui pourraient baisser l'énergie autre que la dimérisation. La dimérisation est donc exacte dans ce cas.

1.5.3 Résultats numériques dans le cas L pair

D'après la Figure 1.6, on constate que pour $\mu = 0.6$, la configuration minimisante pour $L = 10, 20, 50$, est celle qui est dimérisée, dont les t_i , sont de la forme (1.46) .

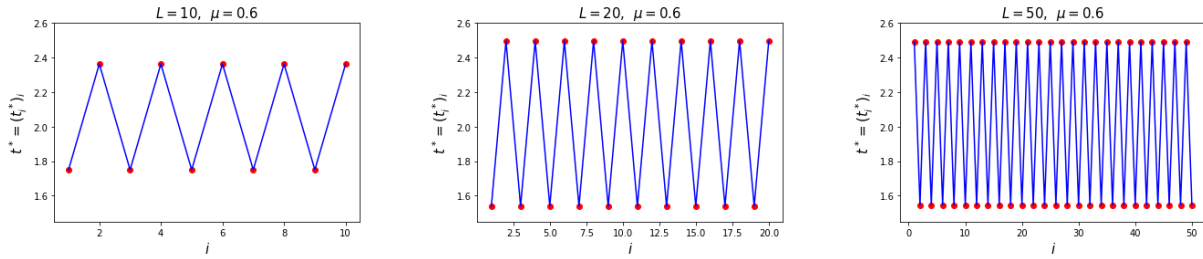


FIGURE 1.6 – Simulation numérique de la configuration minimisante $\mathbf{t}^* = (t_i^*)_{i=1}^L$ dont les composantes t_i^* sont représentées par les points rouge (à température nulle).

Pour $\mu = 1$, dans le cas $L = 10$, on a $\delta = 0$. Mais dans les cas $L = 20$ et $L = 50$, on constate que $\delta > 0$. Cependant, en continuant d'augmenter la valeur de μ , on finira par avoir $\delta = 0$ pour le cas $L = 50$, alors que $\delta > 0$ dans le cas $L = 20$, même si on augmente davantage la valeur de μ . C'est ce que montre les Figures 1.7 et 1.8.

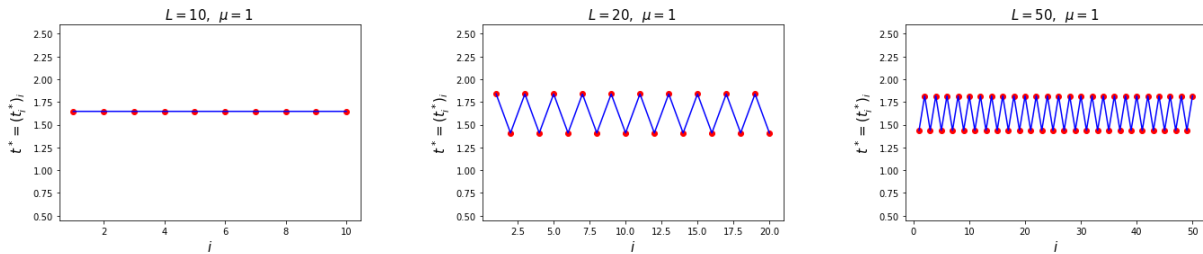


FIGURE 1.7 – Simulation numérique de la configuration minimisante $\mathbf{t}^* = (t_i^*)_{i=1}^L$ dont les composantes t_i^* sont représentées par les points rouge (à température nulle), et pour une valeur constante de $\mu = 1$, dans le cas L pair.

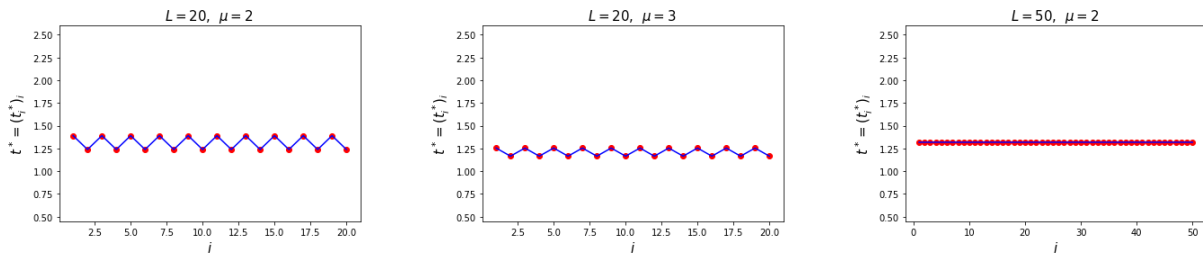


FIGURE 1.8 – Configuration $\mathbf{t}^* = (t_i^*)_{i=1}^L$ dont les composantes t_i^* sont représentées par les points rouge (à température nulle), et pour une valeur constante de $\mu = 2, 3$, dans le cas L pair.

On remarque que si $L = 2N$, avec N pair (c'est-à-dire L multiple de 4), pour toute valeur de μ , la configuration minimisante est dimérisée. Tandis que dans le cas où N est impair, il existe une valeur critique μ_c , telle que pour tout $\mu > \mu_c$, la configuration minimisante est celle qui est 1-périodique c'est-à-dire, pour laquelle $\delta = 0$. On montrera ce résultat plus tard dans le cas du modèle avec température [GKS23].

1.5.4 Résultat de García Arroyo et Séré

Le cas d'une chaîne avec un nombre impair d'atomes de carbone a été étudié par García Arroyo et Séré.

L'objectif de García Arroyo et Séré était d'étudier ce modèle dans le cas où L est impair. Plus précisément ils ont montré l'existence des solutions "kinks" dans le cas $L = 2N + 1$. Ils ont procédé comme suit [GS12]. Lorsqu'on considère l'énergie du modèle pour une chaîne avec un nombre impair d'atomes de carbone $L = 2N + 1$, et qu'on note $\mathbf{t}(2N + 1) = (t_i(2N + 1))_{i=1}^{2N+1}$, un minimiseur global de cette énergie, à sous suite et à translation près, le minimiseur converge vers une configuration infinie connectant les deux configurations dimérisées (1.46), lorsque N tend vers $+\infty$. Ils ont montré le résultat suivant [GS12].

Théorème 1.5. *Soit $\mu > 1$, et $\mathbf{t}(2N + 1) = (t_i(2N + 1))_{i=1}^{2N+1}$ un minimiseur global de $\mathcal{E}^{(2N+1)}$. À translation et à sous suite près, $t_i(2N + 1)$ converge vers t_i^∞ lorsque $N \rightarrow +\infty$, vérifiant la relation suivante :*

$$\sum_{i \geq 1} |t_i^\infty - (W + (-1)^{i+\tau} \delta)|^2 = \sum_{i \leq 0} |t_i^\infty - (W - (-1)^{i+\tau} \delta)|^2 < +\infty,$$

où $\tau \in \{0, 1\}$. Les détails de la preuve peuvent être consultés dans [GS12].

1.5.5 Résultats numériques dans le cas L impair

Dans les cas $L = 21, 51, 101$, avec $\mu = 0.6$ Figure 1.9, on constate un défaut localisé au centre de la chaîne grâce à l'invariance par translation de l'énergie. On remarque également que lorsqu'on s'éloigne suffisamment du centre, la configuration minimisante obtenue converge à gauche et à droite vers les deux configurations dimérisées (1.46). C'est ce résultat qu'ont montré García Arroyo et Séré.

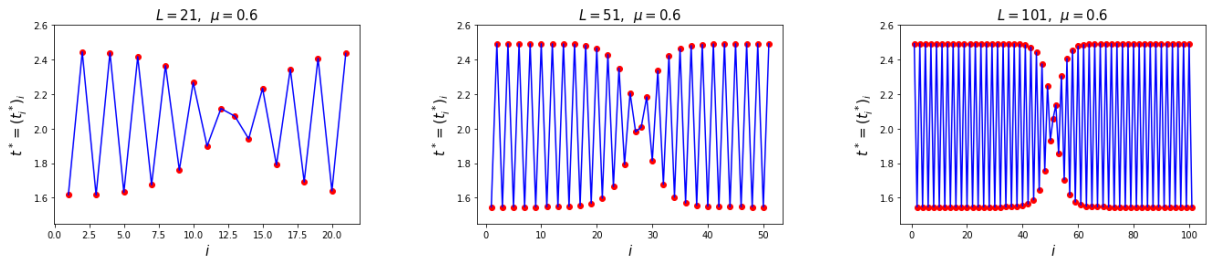


FIGURE 1.9 – Simulation numérique de la configuration minimisante $\mathbf{t}^* = (t_i^*)_{i=1}^L$ dont les composantes t_i^* sont représentées par les points rouge (à température nulle), et pour une valeur constante de $\mu = 0.6$, dans le cas L impair.

1.6 Présentation des résultats du Chapitre 2 : transition de phase

Dans ce chapitre, nous présentons les résultats de l'article [GKS23] portant sur la transition de phase dans le modèle de Peierls-SSH pour le polyacétylène. Les détails de ces résultats ainsi

que leurs preuves se trouvent dans le Chapitre 2.

Dans [GKS23], nous considérons le modèle de Peierls-SSH pour des chaînes fermées de polyacétylène avec un nombre pair d'atomes de carbone ainsi que des chaînes infinies, en présence de la température. Nous prouvons l'existence d'une température critique en dessous de laquelle la chaîne est dimérisée, et au-dessus de laquelle elle est 1-périodique. La chaîne se comporte comme un isolant en dessous de la température critique et comme un métal au-dessus. Nous caractérisons la température critique dans le modèle de la limite thermodynamique, et prouvons qu'elle est exponentiellement petite comme fonction de la rigidité de la chaîne μ . Nous étudions la transition de phase autour de cette température critique.

1.6.1 Le modèle de Peierls-SSH avec température et les résultats principaux.

Dans cette partie, on étend le résultat de Kennedy et Lieb au cas d'une température positive en modifiant le modèle afin de prendre en compte l'entropie des électrons. Nous désignons par θ la température (la lettre T est réservée à la matrice dans (1.44)). En suivant le schéma général décrit dans [BLS94, Section 4], l'énergie libre est maintenant donnée par (comparer avec (1.45))

$$\mathcal{F}_{\text{full},\theta}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}, \gamma) := \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^L (t_i - 1)^2 + 2 \{ \text{Tr}(T\gamma) + \theta \text{Tr}(S(\gamma)) \}, \quad (1.48)$$

avec $S(x) := x \ln(x) + (1 - x) \ln(1 - x)$ l'entropie fermionique usuelle [BLS94, Section 4], γ représente la matrice densité à un corps vérifiant la condition de Pauli $0 \leq \gamma \leq 1$ et le facteur 2 dans le second terme représente le spin. Nous considérons à nouveau la minimisation sur toutes les matrices de densité à un corps, et étudions le problème de minimisation

$$F_{\theta}^{(L)} := \min \left\{ \mathcal{F}_{\text{full},\theta}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}, \gamma), \quad \mathbf{t} \in \mathbb{R}_+^L, \quad 0 \leq \gamma = \gamma^* \leq 1 \right\}. \quad (1.49)$$

Il y a maintenant deux paramètres dans le modèle, à savoir μ et θ . L'objectif principal est d'étudier le diagramme de phase dans le plan (μ, θ) . Comme dans le cas à température nulle, on fait d'abord la minimisation sur γ .

Lemme 1.6. *On a*

$$\min_{0 \leq \gamma \leq 1} 2 \{ \text{Tr}(T\gamma) + \theta \text{Tr}(S(\gamma)) \} = -\text{Tr} \left(h_{\theta}(T^2) \right), \quad (1.50)$$

avec la fonction h_{θ} définie par

$$h_{\theta}(x) := 2\theta \ln \left(2 \cosh \left(\frac{\sqrt{x}}{2\theta} \right) \right).$$

Ce problème de minimisation à un unique minimiseur $\gamma_* = (1 + e^{T/\theta})^{-1}$.

Le problème de minimisation (1.49) se simplifie donc en un problème de minimisation en $\{\mathbf{t}\}$ seulement :

$$F_{\theta}^{(L)} = \inf \left\{ \mathcal{F}_{\theta}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}), \quad \mathbf{t} \in \mathbb{R}_+^L \right\}, \quad \text{avec} \quad \mathcal{F}_{\theta}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) := \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^L (t_i - 1)^2 - \text{Tr} \left(h_{\theta}(T^2) \right).$$

(1.51)

Comme dans le cas de la température nulle pour $L = 2N$, les minimiseurs sont toujours 2-périodiques (Théorème 2.2), et le problème de minimisation est donc une minimisation sur les

deux variables W et δ . En fait, nous avons

$$F_\theta^{(2N)} = (2N) \min \left\{ g_\theta^{(2N)}(W, \delta), \quad W \geq 0, \delta \geq 0 \right\},$$

avec l'énergie *par atome* (l'expression suivante est justifiée ci-dessous dans le Chapitre 2)

$$g_\theta^{(2N)}(W, \delta) = \frac{\mu}{2} \left[(W - 1)^2 + \delta^2 \right] - \frac{1}{2N} \sum_{k=1}^{2N} h_\theta \left(4W^2 \cos^2 \left(\frac{2k\pi}{2N} \right) + 4\delta^2 \sin^2 \left(\frac{2k\pi}{2N} \right) \right). \quad (1.52)$$

Dans le second terme de (1.52) nous avons une somme de Riemann. On peut donc prendre la limite $L \rightarrow \infty$ dans (1.52), et ceci permet de définir l'énergie libre limite thermodynamique (par d'atome) comme suit

$$f_\theta := \liminf_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{2N} F_\theta^{(2N)}. \quad (1.53)$$

Nous obtenons les résultats suivants.

Lemme 1.7. *On a $f_\theta = \min \{g_\theta(W, \delta), \quad W \geq 0, \delta \geq 0\}$ avec*

$$g_\theta(W, \delta) := \frac{\mu}{2} \left[(W - 1)^2 + \delta^2 \right] - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} h_\theta \left(4W^2 \cos^2(s) + 4\delta^2 \sin^2(s) \right) ds.$$

Le théorème suivant montre l'existence d'une température critique pour le modèle limite thermodynamique. Sa preuve est basée sur l'étude des équations d'Euler-Lagrange de g_θ .

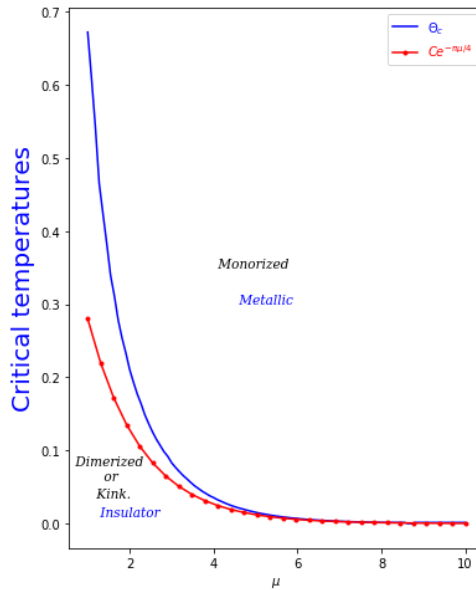


FIGURE 1.10 – La température critique $\mu \mapsto \theta_c(\mu)$ et son asymptotique $Ce^{-\frac{\pi}{4}\mu}$.

Théorème 1.8. *Il existe une température critique (thermodynamique) strictement positive $\theta_c = \theta_c(\mu) > 0$, telle que pour tout $\theta \geq \theta_c$, le minimiseur de g_θ satisfait $\delta = 0$, tandis que pour tout $\theta < \theta_c$, il satisfait $\delta > 0$.*

Dans la limite μ grand, nous avons

$$\theta_c(\mu) \sim_{+\infty} C \exp \left(-\frac{\pi}{4} \mu \right), \quad \text{avec} \quad C \approx 0.61385.$$

Ceci reflète le fait que pour une chaîne infinie, il y a une transition entre les états dimérisés ($\delta > 0$), qui sont isolants et l'état 1-périodique (avec $\delta = 0$), qui est métallique, au fur et à mesure

que la température augmente. Nous avons représenté à la Figure 1.10 la fonction $\mu \mapsto \theta_c(\mu)$ dans le plan (μ, θ) .

Dans (1.53), nous ne considérons que la limite $L = 2N \rightarrow \infty$ pour définir la température critique thermodynamique θ_c . Nous nous attendons également à ce que les chaînes impaires se comportent comme les chaînes paires, mais l'étude du cas impair est plus délicate car nous n'avons pas d'analogue de (1.52) et nous la laissons pour de futurs travaux. Enfin, nous étudions la nature de la transition. On remarque que $\delta \rightarrow 0$ lorsque $\theta \rightarrow \theta_c$. En fait, il y a une bifurcation autour de cette température critique, voir aussi la Figure 1.11. On a le résultat suivant :

Théorème 1.9. *Il existe $C > 0$, tel que $\delta(\theta) = C\sqrt{(\theta_c - \theta)_+} + o\left(\sqrt{(\theta_c - \theta)_+}\right)$.*

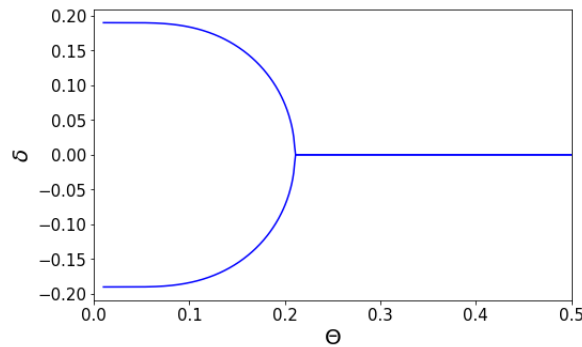


FIGURE 1.11 – La bifurcation de δ dans le modèle thermodynamique. Nous avons pris $\mu = 2$, et la température critique est $\theta_c = 0,2112$.

La preuve de ce résultat utilise principalement le théorème des fonctions implicites. La valeur de C est explicite et est donnée dans la preuve.

1.7 Présentation des résultats du Chapitre 3 : décroissance exponentielle des points critiques.

Cette partie a pour objectif de présenter un résultat sur la décroissance exponentielle des points critiques de l'énergie du modèle de Peierls-SSH, et est un travail en collaboration avec D. Gontier et E. Séré, qui a été soumis à la revue Nonlinearity à comité de lecture.

En effet, Kennedy et Lieb [KL04] d'une part, et Lieb et Nachtergaele [LN95] d'autre part ont prouvé que les minimiseurs de l'énergie associée à la chaîne fermée de polyacétylène avec un nombre pair L d'atomes de carbone sont toujours 2-périodiques. Lorsque $L = 0 \bmod 4$ ou lorsque $L = 2 \bmod 4$ est suffisamment grand, ces minimiseurs sont dimérisés, dans le sens où ils sont 2-périodiques, mais pas 1-périodiques. Dans cette situation, il existe exactement deux configurations minimisantes de cette énergie, que nous appelons $\mathbf{t}^-$ et $\mathbf{t}^+$. Elles sont de la forme

$$t_n^- := W - (-1)^n \delta, \quad \text{et} \quad t_n^+ := W + (-1)^n \delta. \quad (1.54)$$

Ce phénomène de distorsion subsiste dans la limite thermodynamique, c'est-à-dire lorsque le nombre d'atomes est infini. Nous avons prouvé dans [GKS23] que cette distorsion disparaît à une température suffisamment élevée. Plus précisément, il existe une température critique en dessous de laquelle la chaîne de polyacétylène est dimérisée ($\delta > 0$) et se comporte comme un isolant, et au-dessus de laquelle elle est 1-périodique ($\delta = 0$) et se comporte comme un métal.

Nous étudions une famille de points critiques, à savoir les points critiques homoclines et hétéroclines, pour le modèle infini de Peierls à température nulle. En utilisant la terminologie

des systèmes dynamiques, une configuration $\mathbf{t} = (t_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ est **homocline** si

$$\lim_{n \rightarrow -\infty} |t_n - t_n^+| = \lim_{n \rightarrow +\infty} |t_n - t_n^+| = 0, \quad (1.55)$$

et est **hétérocline** si

$$\lim_{n \rightarrow -\infty} |t_n - t_n^-| = \lim_{n \rightarrow +\infty} |t_n - t_n^+| = 0. \quad (1.56)$$

Notre objectif principal est de prouver que les points critiques homoclines et hétéroclines convergent exponentiellement vite vers les états dimérisés correspondants. Afin d'énoncer notre résultat, nous devons d'abord définir la notion de points critiques pour notre modèle infini.

1.7.1 Points critiques du modèle infini de Peierls-SSH, et résultat principal

Afin de définir les points critiques pour le modèle de Peierls-SSH infini, nous commençons par le modèle de Peierls-SSH pour une chaîne linéaire périodique avec L atomes classiques, ainsi que des électrons quantiques sans interaction. Nous prendrons la limite $L \rightarrow \infty$ à la fin.

L'énergie de Peierls-SSH de la chaîne correspondante est la suivante (Eqn (1.45))

$$\mathcal{E}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) := \frac{\mu}{2} \sum_{n=1}^L (t_n - 1)^2 - 2\text{Tr}(T_-), \quad (1.57)$$

La différence d'énergie

Fixons une configuration $\mathbf{t}$, et considérons la fonctionnelle de différence d'énergie $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}^{(L)}$, définie par

$$\mathcal{F}_{\mathbf{t}}^{(L)}(\mathbf{h}) := \mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t} + \mathbf{h}) - \mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t}) = \frac{\mu}{2} \sum_{n=1}^L (h_n + 2t_n - 2)h_n - 2\text{Tr}((T + H)_- - T_-), \quad (1.58)$$

où $T = T(\{\mathbf{t}\})$ et $H = T(\{\mathbf{h}\})$ sont les matrices hermitiennes construites à partir de $\{\mathbf{t}\}$ et $\{\mathbf{h}\}$ respectivement. Il est clair que $\{\mathbf{t}\}$ est un point critique de $\mathcal{E}^{(L)}$ si $\{\mathbf{0}\}$ est un point critique de $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}^{(L)}$. Nous avons soustrait la quantité $\mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t})$ afin d'avoir une différence d'énergie finie à la limite $L \rightarrow \infty$. En fait, Eqn. (1.58) admet un analogue clair lorsque $L \rightarrow \infty$, à savoir, pour deux suites bornées $\mathbf{t} : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{R}^+$ et $\mathbf{h} : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{R}$, en supposant que $h \in \ell^1(\mathbb{Z}, \mathbb{R})$ et que $(T + H)_- - T_-$ est à trace en tant qu'opérateur agissant sur $\ell^2(\mathbb{Z}, \mathbb{C})$, nous posons

$$\boxed{\mathcal{F}_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}) := \frac{\mu}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} (h_n + 2t_n - 2)h_n - 2\text{Tr}((T + H)_- - T_-)} \quad (1.59)$$

Maintenant, l'opérateur $T := T(\{\mathbf{t}\})$ (et de même pour $T + H$) agit sur l'espace de Hilbert de dimension infinie $\ell^2(\mathbb{Z}, \mathbb{C})$, dont les coefficients dans la base canonique sont

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad T_{n,n+1} = T_{n+1,n} = t_n, \quad T_{i,j} = 0 \quad \text{if } |i - j| \neq 1.$$

Le fait que l'application $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}$ est bien définie et lisse autour de $\{\mathbf{0}\}$ lorsque $\{\mathbf{t}\}$ est une configuration homocline ou hétérocline est donné par les Lemmes 3.1 et 3.2 du Chapitre 3.

Points critiques pour le modèle infini de Peierls, et résultat principal

Nous pouvons maintenant définir la notion de points critiques pour le modèle infini de Peierls.

Définition 1.10. Soit $\{\mathbf{t}\}$ une configuration homocline ou hétérocline telle que $\mathbf{t} \geq \tau$ pour $\tau > 0$. On dit que $\{\mathbf{t}\}$ est un point critique si la différentielle de $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}$ en $\{\mathbf{t}\}$ notée $L_{\mathbf{t}}$ est l'application nulle.

Nous pouvons maintenant présenter notre résultat principal, qui stipule que tous les points critiques homoclines ou hétéroclines de $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}$ convergent exponentiellement vite vers $\mathbf{t}^+$ à $+\infty$.

Théorème 1.11. *Soit $\{\mathbf{t}\}$ un point critique homocline ou hétérocline, et soit $\{\mathbf{u}\}$ la suite $u_n := t_n - t_n^+$. Si $\mathbf{u}$ est de carré intégrable en $+\infty$ ($\mathbf{u} \in \ell^2(\mathbb{Z}^+)$), alors $\mathbf{u}$ est exponentiellement localisé à $+\infty$: il existe $C \geq 0$ et $\alpha > 0$ de sorte que*

$$|u_n| \leq Ce^{-\alpha n}.$$

La même chose s'applique dans la direction $-\infty$, et nous avons une convergence exponentielle vers $\mathbf{t}^+$ ou $\mathbf{t}^-$ à ∞ selon que la configuration critique est homocline ou hétérocline. Les détails de la preuve de ce résultat sont donnés au Chapitre 3.

1.8 Conclusions et perspectives

Cette thèse présente une étude mathématique, théorique et numérique de l'instabilité de Peierls dans les chaînes fermées unidimensionnelles. Nous avons étudié plus précisément l'instabilité de Peierls dans le cas des chaînes fermées de polyacétylène. Après avoir présenté les différentes propriétés et les applications pratiques et technologiques des polymères, polymères conducteurs en général et polyacétylène en particulier, nous avons introduit certains concepts importants pour la compréhension et description du modèle que nous avons étudié (la seconde quantification et le modèle des liaisons fortes). Par la suite nous avons étudié l'exemple de ce qu'on appelle communément le câble quantique 1D. Nous avons pour cet exemple une orbitale par cellule unité et par conséquent une bande, ce qui permet de déduire que ce modèle se comporte comme un métal. Dans le même sens nous avons présenté les résultats concernant un modèle avec deux sites par cellule unité. Il s'agit de l'exemple du modèle de SSH. Dans ce cas nous avons deux bandes, une supérieure appelée bande de conduction et une inférieure appelée bande de valence. On a l'apparition d'un trou spectral dans le cas $t_1 \neq t_2$ comme le montre la Figure 1.5 faisant de ce modèle un isolant, la bande de valence est complètement remplie tandis que celle de conduction est totalement vide empêchant toute conductivité électrique. Ce trou spectral disparaît dans le cas où $t_1 = t_2$, connectant ainsi la bande de valence à la bande de conduction permettant aux électrons de voyager à travers la chaîne et favorisant donc la conductivité électrique dans la chaîne. Nous avons aussi présenté quelques résultats concernant la convexité de la fonction trace.

Dans la Section 1.5, nous avons présenté les résultats connus sur le modèle de Peierls-SSH pour le polyacétylène à température nulle. Il s'agit du modèle avec un nombre pair d'atomes de carbone étudié par T. Kennedy et E. Lieb et du modèle avec un nombre impair d'atomes de carbone étudié par García Arroyo et Séré. Nous donnons aussi quelques résultats numériques dans chacun des cas. Ensuite, nous présentons les résultats des deux papiers rédigés au cours de cette thèse. Le premier concerne la transition de phase dans le modèle de Peierls-SSH pour le polyacétylène. Il s'agit d'une extension des résultats de Kennedy et Lieb dans le cas d'un modèle avec une température. Nous avons montré l'existence d'une température critique au dessus de laquelle la chaîne se comporte comme un métal et en dessous de laquelle elle est un isolant. On s'attend à une extension de ce comportement dans le cas d'une chaîne avec un nombre impair d'atomes, mais nous ne disposons d'arguments suffisants pour conclure. Il serait intéressant de clarifier ce qui se passe dans ce cas ($L = 2N + 1$). Toujours dans cet article, nous avons montré l'existence et l'unicité d'une température critique dans la limite thermodynamique c'est-à-dire $L = 2N$, avec $N \rightarrow \infty$. Il faudrait faire de même dans le cas $L = 2N + 1$ avec $N \rightarrow \infty$. La clé serait peut-être de trouver une analogue de (1.52). Nous caractérisons également cette

température critique dans le cas limite thermodynamique.

Le second papier porte sur la décroissance exponentielle des points critiques de l'énergie de Peierls. Nous montrons que les points critiques homoclines et hétéroclines convergent exponentiellement vite vers les états dimérisés correspondants dans le cas d'une chaîne à température nulle. On pourra reprendre le modèle de Peierls-SSH à température nulle et montrer l'existence de points critiques correspondant à des états excités ou à des multi-kinks faisant des allers-retours entre les solutions dimérisées.

Phase transition in the Peierls model for polyacetylene

This chapter corresponds to [\[GKS23\]](#), published online in Annales Henri Poincaré (2023).

Abstract

We consider the Peierls model for closed polyacetylene chains with an even number of carbon atoms as well as infinite chains, in the presence of temperature. We prove the existence of a critical temperature below which the chain is dimerized, and above which it is 1-periodic. The chain behaves like an insulator below the critical temperature and like a metal above it. We characterize the critical temperature in the thermodynamic limit model, and prove that it is exponentially small in the rigidity of the chain. We study the phase transition around this critical temperature.

Contents

1	Introduction	25
1.1	The Peierls model at null temperature	25
1.2	The Peierls model with temperature, main results.	26
2	Proofs in the finite chain Peierls model with temperature	29
2.1	Proof of Lemma 2.1, and properties of the h functional	29
2.2	Proof of Theorem 2.2 : Existence of a critical temperature	30
3	Proofs in the thermodynamic model	37
3.1	Proof of Lemma 2.3 : Justification of the thermodynamic model	37
3.2	Proof of Theorem 2.4 : Estimation of the critical temperature.	37
3.3	Proof of Theorem 2.5 : study of the phase transition	39
Appendix A	Gain of energy in the thermodynamic limit	41
Annexe B	Convexité de la trace	42
Annexe B.1	Définitions de base et notation	42
Annexe B.2	Propriété de convexité de la trace	43

1 Introduction

It is a well known fact that in closed polyacetylene molecular chains having an even number of carbon atoms (*e.g.* benzene), the valence electrons arrange themselves one link in two. This phenomenon is well understood in the Peierls model, introduced in 1930 (see [Pei55, p.108] and [Frö54]), which is a simple non-linear functional describing, in particular, polyacetylene chains. This model is invariant under 1-translations, but there is a symmetry breaking: the minimizers are dimerized, in the sense that they are 2-periodic, but not 1-periodic. This is known as **Peierls instability** or **Peierls distortion** and is responsible for the high diamagnetism and low conductivity of certain materials such as bismuth [Jon34].

In this paper, we study the Peierls model with temperature, and describe the corresponding phase diagram. We prove the existence of a critical temperature below which the chain is dimerized, and above which the chain is 1-periodic. We characterize this critical temperature, and study the transition around it. In order to state our main results, let us first recall what is known for the Peierls model without temperature.

1.1 The Peierls model at null temperature

We focus on the case of even chains: We consider a periodic linear chain with $L = 2N$ classical atoms (for an integer $N \geq 2$), together with quantum non-interacting electrons. We denote by t_i the distance between the i -th and $(i+1)$ -th atoms, and set $\{\mathbf{t}\} := \{t_1, \dots, t_L\}$. By periodicity, we mean that the atoms indices are taken modulo L . The electrons are represented by a one-body density matrix γ , which is a self-adjoint operator on $\ell^2(\mathbb{C}^L)$, satisfying the Pauli principle $0 \leq \gamma \leq 1$. In this simple model, the electrons can hop between nearest-neighbour atoms, and feel a Hamiltonian of the form

$$T = T(\{\mathbf{t}\}) := \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 & \cdots & t_L \\ t_1 & 0 & t_2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & t_{L-2} & 0 & t_{L-1} \\ t_L & 0 & \cdots & 0 & t_{L-1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

The Peierls energy of such a system reads [KL04; LSM61; MN96; Pei55; SSH79]

$$\tilde{\mathcal{E}}_{\text{full}}^{(L)}(\{\tilde{\mathbf{t}}\}, \gamma) := \frac{1}{2}g \sum_{i=1}^L (\tilde{t}_i - b)^2 + 2\text{Tr}(T(\{\tilde{\mathbf{t}}\})\gamma).$$

The first term is the distortion energy of the atoms. Here, $b > 0$ is the equilibrium distance between two atoms and $g > 0$ is the rigidity of the chain. The second term models the electronic energy of the valence electrons (the 2 factor stands for the spin). By scaling, setting $\tilde{t}_i = bt_i$ and $\mu = gb$, we have $\tilde{\mathcal{E}}_{\text{full}}^{(L)}(\{\tilde{t}\}, \gamma) = b\mathcal{E}_{\text{full}}^{(L)}(\{t\}, \gamma)$, with the energy

$$\mathcal{E}_{\text{full}}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}, \gamma) := \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^L (t_i - 1)^2 + 2\text{Tr}(T(\{\mathbf{t}\})\gamma). \quad (2.2)$$

There is only one parameter in the model, which is the strength $\mu > 0$. In the so-called *half-filled* model, this energy is minimized over all $t_i > 0$ and all one-body density matrices (there is no

constraint on the number of electrons):

$$E^{(L)} := \min \left\{ \mathcal{E}_{\text{full}}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}, \gamma), \quad \mathbf{t} \in \mathbb{R}_+^L, \quad 0 \leq \gamma = \gamma^* \leq 1 \right\}.$$

One can perform the minimization in γ first. We get

$$\min_{0 \leq \gamma = \gamma^* \leq 1} 2\text{Tr}(T\gamma) = 2\text{Tr}(T\mathbb{1}(T < 0)) = -\text{Tr}(|T|) = -\text{Tr}(\sqrt{T^2}), \quad (2.3)$$

where we used here that T is unitarily equivalent to $-T$, so that its spectrum is symmetric with respect to the origin. The optimal density matrix in this case is $\gamma_* = \mathbb{1}(T < 0)$, which has $\text{Tr}(\gamma_*) = N$ electrons (hence the denomination *half-filled*). The energy simplifies into

$$E^{(L)} = \min \left\{ \mathcal{E}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}), \quad \mathbf{t} \in \mathbb{R}_+^L \right\}, \quad \text{with} \quad \mathcal{E}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) := \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^L (t_i - 1)^2 - \text{Tr}(\sqrt{T^2}).$$

The energy $\mathcal{E}^{(L)}$ only depends on $\{\mathbf{t}\}$, and is translationally invariant, in the sense that $\mathcal{E}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) = \mathcal{E}^{(L)}(\{\tau_k \mathbf{t}\})$ where $\{\tau_k \mathbf{t}\} := \{t_{k+1}, \dots, t_{k+L}\}$. However, the minimizers of this energy are usually 2-periodic, as proved by Kennedy and Lieb [KL04] and Lieb and Nachtergaele [LN95]. More specifically, they proved the following:

Case $L \equiv 0 \pmod{4}$. There are two minimizing configurations for $E^{(2N)}$, of the form

$$t_i = W + (-1)^i \delta \text{ or } t_i = W - (-1)^i \delta, \quad \text{with } \delta > 0. \quad (2.4)$$

These two configurations are called **dimerized** configurations [KH82]: they are 2-periodic but not 1-periodic. In other words, it is energetically favorable for the chain to break the 1-periodicity of the model. We prove in [Appendix A](#) that the corresponding gain of energy is actually exponentially small in the limit $\mu \rightarrow \infty$.

Case $L \equiv 2 \pmod{4}$. This case is similar, but we may have $\delta = 0$ for small values of L , or large values of μ (see also [KH82]). There is $0 < \mu_c(L) < \infty$ so that, for $0 < \mu < \mu_c(L)$, there are still two dimerized minimizers, as in (2.4), while for $\mu > \mu_c(L)$, there is only one minimizer, which is 1-periodic, that is $\delta = 0$.

In all cases (with L even), one can restrict the minimization problem to configurations $\{\mathbf{t}\}$ of the form $t_i = W \pm (-1)^i \delta$, and obtain a minimization problem with only two parameters.

Although L is always even in the present paper, let us mention that molecules with L odd and very large have been studied at zero temperature by Garcia Arroyo and Séré [GS12]. In that case one gets “kink solutions” in the limit $L \rightarrow \infty$.

1.2 The Peierls model with temperature, main results.

In the present article, we extend the results in the positive temperature case by modifying the Peierls model in order to take the entropy of the electrons into account. We denote by θ the temperature (the letter T is reserved for the matrix in (3.5)). Following the general scheme described in [BLS94, Section 4], the free energy is now given by (compare with (2.2))

$$\mathcal{F}_{\text{full}, \theta}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}, \gamma) := \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^L (t_i - 1)^2 + 2 \{ \text{Tr}(T\gamma) + \theta \text{Tr}(S(\gamma)) \}, \quad (2.5)$$

with $S(x) := x \ln(x) + (1-x) \ln(1-x)$ the usual entropy function. We consider again the minimization over all one-body density matrices, and study the minimization problem

$$F_\theta^{(L)} := \min \left\{ \mathcal{F}_{\text{full},\theta}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}, \gamma), \quad \mathbf{t} \in \mathbb{R}_+^L, \quad 0 \leq \gamma = \gamma^* \leq 1 \right\}.$$

There are now two parameters in the model, namely μ and θ . The main goal of the paper is to study the phase diagram in the (μ, θ) plane.

As in (2.3), one can perform the minimization in γ first (see Section 2.1 for the proof).

Lemma 2.1. *We have*

$$\min_{0 \leq \gamma \leq 1} 2 \{ \text{Tr}(T\gamma) + \theta \text{Tr}(S(\gamma)) \} = -\text{Tr} \left(h_\theta(T^2) \right), \quad (2.6)$$

with the function

$$h_\theta(x) := 2\theta \ln \left(2 \cosh \left(\frac{\sqrt{x}}{2\theta} \right) \right).$$

The minimization problem in the l.h.s of (2.6) has the unique minimizer $\gamma_* = (1 + e^{T/\theta})^{-1}$.

The properties of the function h_θ is given below in Proposition 2.6. The free Peierls energy therefore simplifies into a minimization problem in $\{\mathbf{t}\}$ only:

$$F_\theta^{(L)} = \inf \left\{ \mathcal{F}_\theta^{(L)}(\{\mathbf{t}\}), \quad \mathbf{t} \in \mathbb{R}_+^L \right\}, \quad \text{with} \quad \mathcal{F}_\theta^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) := \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^L (t_i - 1)^2 - \text{Tr} \left(h_\theta(T^2) \right). \quad (2.7)$$

Our first theorem states that minimizers are always 2-periodic, and that they become 1-periodic when the temperature is large enough (phase transition).

Theorem 2.2. *For any $L = 2N$, with N an integer and $N \geq 2$, there exists a critical temperature $\theta_c^{(L)} := \theta_c^{(L)}(\mu) \geq 0$ such that:*

- for $\theta \geq \theta_c^{(L)}$, the minimizer of $\mathcal{F}_\theta^{(L)}$ is unique and 1-periodic;
- for $\theta \in (0, \theta_c^{(L)})$ (this set is empty if $\theta_c^{(L)} = 0$), there are exactly two minimizers, which are dimerized, of the form (2.4).

In addition,

1. If $L \equiv 0 \pmod{4}$, this critical temperature is positive ($\theta_c^{(L)}(\mu) > 0$ for all $\mu > 0$).
2. If $L \equiv 2 \pmod{4}$, there is $\mu_c := \mu_c(L) > 0$ such that for $\mu \leq \mu_c$, $\theta_c^{(L)}$ is positive ($\theta_c^{(L)} > 0$), whereas for $\mu > \mu_c$, $\theta_c^{(L)} = 0$. Moreover as a function of L we have $\mu_c(L) \sim \frac{2}{\pi} \ln(L)$ at $+\infty$.

This theorem only deals with an even number L of atoms. One expects a similar behaviour for L odd and large, but the arguments in the proof are not sufficient to guarantee this: they only imply that the minimizer is one-periodic when the temperature is large enough (see Remark 2.9). We do not know what exactly happens for a small positive temperature and an odd number L .

We postpone the proof of Theorem 2.2 until Section 2. The first part uses the concavity of the function h_θ on $\mathbb{R}_+$, while those of 1. and 2. are based on the Euler-Lagrange equations.

As in the null temperature case, minimizers are always 2-periodic, hence the minimization problem is a minimization over the two variables W and δ . Actually, we have

$$F_\theta^{(2N)} = (2N) \min \left\{ g_\theta^{(2N)}(W, \delta), \quad W \geq 0, \quad \delta \geq 0 \right\},$$

with the energy *per unit atom* (the following expression is justified below in Eqn. (2.14))

$$g_\theta^{(2N)}(W, \delta) = \frac{\mu}{2} [(W-1)^2 + \delta^2] - \frac{1}{2N} \sum_{k=1}^{2N} h_\theta \left(4W^2 \cos^2 \left(\frac{2k\pi}{2N} \right) + 4\delta^2 \sin^2 \left(\frac{2k\pi}{2N} \right) \right). \quad (2.8)$$

We recognize a Riemann sum in the last expression. This suggests that we can take the thermodynamic limit $L \rightarrow \infty$. This limit is quite standard in the physics literature on long polymers: many theoretical papers present models of polymers at null temperature that are directly written for infinite chains (see *e.g.* [SSH79]).

We define the thermodynamic limit free energy (per unit atom) as

$$f_\theta := \liminf_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{2N} F_\theta^{(2N)}. \quad (2.9)$$

As expected, we have the following (see Section 3.1 for the proof).

Lemma 2.3. *We have $f_\theta = \min \{g_\theta(W, \delta), \quad W \geq 0, \delta \geq 0\}$ with*

$$g_\theta(W, \delta) := \frac{\mu}{2} [(W-1)^2 + \delta^2] - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} h_\theta \left(4W^2 \cos^2(s) + 4\delta^2 \sin^2(s) \right) ds.$$

The next theorem is similar to Theorem 2.2, and shows the existence of a critical temperature for the thermodynamic model. Its proof is postponed until Section 3.2, and is based on the study of the Euler-Lagrange equations.

Theorem 2.4. *There is a critical (thermodynamic) temperature $\theta_c = \theta_c(\mu) > 0$, which is always positive, and so that for all $\theta \geq \theta_c$, the minimizer of g_θ satisfies $\delta = 0$, whereas for all $\theta < \theta_c$, it satisfies $\delta > 0$.*

In the large μ limit, we have

$$\theta_c(\mu) \sim C \exp \left(-\frac{\pi}{4} \mu \right), \quad \text{with } C \approx 0.61385.$$

This reflects the fact that for an infinite chain, there is a transition between the dimerized states ($\delta > 0$), which are insulating (actually, one can show that the gap of the T matrix is of order δ), to the 1-periodic state (with $\delta = 0$), which is metallic, as the temperature increases. This can be interpreted as an insulating/metallic transition for polyacetylene. Such a phase transition has been observed experimentally in the blue bronze in [Pou+83]. We display in Figure 2.2 (left) the map $\mu \mapsto \theta_c(\mu)$ in the (μ, θ) plane.

In (2.9), we only consider the limit $L = 2N \rightarrow \infty$ to define the thermodynamic critical temperature θ_c . Note that the cases $L \equiv 0 \pmod{4}$ and $L \equiv 2 \pmod{4}$ merge when L tends to infinity: this is consistent with the fact that the critical stiffness $\mu_c(L)$ tends to infinity as $L \rightarrow \infty$ in Theorem 2.2. We also expect odd chains to behave like even chains, but the study of the odd case is more delicate since we do not have an analogue of (2.8) and we leave it for future work.

Finally, we study the nature of the transition. It is not difficult to see that $\delta \rightarrow 0$ as $\theta \rightarrow \theta_c$. Actually, there is a bifurcation around this critical temperature, see also Figure 2.2.

Theorem 2.5. *There is $C > 0$, such that $\delta(\theta) = C\sqrt{(\theta_c - \theta)_+} + o\left(\sqrt{(\theta_c - \theta)_+}\right)$.*

We postpone the proof of Theorem 2.5 until Section 3.3. It mainly uses the implicit function theorem. The value of C is explicit and is given in the proof.

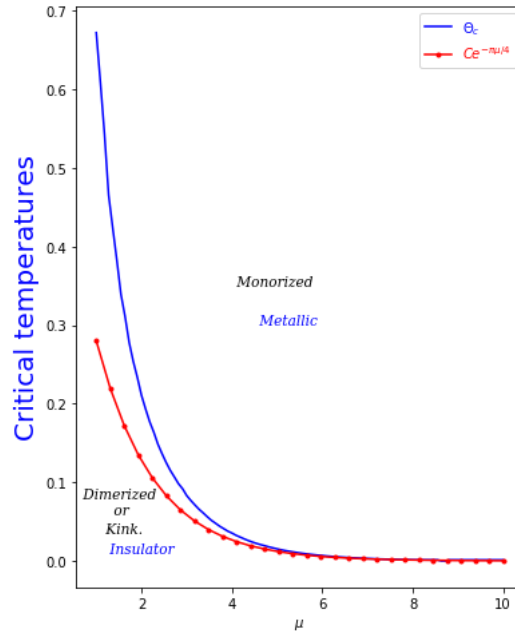


Figure 2.1 – The critical temperature $\mu \mapsto \theta_c(\mu)$ and its asymptotic $Ce^{-\frac{\pi}{4}\mu}$.

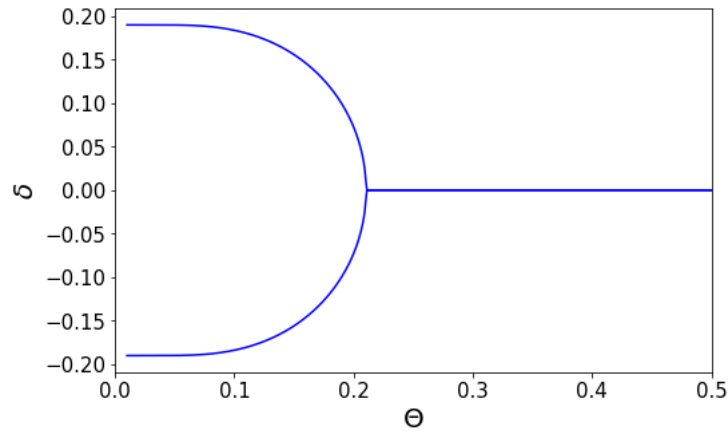


Figure 2.2 – The bifurcation of δ in the thermodynamic model. We took $\mu = 2$, and the critical temperature is found to be $\theta_c = 0.2112$.

2 Proofs in the finite chain Peierls model with temperature

We now provide the proofs of our results. We gather in this section the proofs of the finite $L = 2N$ model, and postpone the ones of the thermodynamic model to the next Section.

2.1 Proof of Lemma 2.1, and properties of the h functional

First, we justify the functional $\mathcal{F}_\theta^{(L)}$ appearing in (2.7), and provide the proof of Lemma 2.1.

Proof. We study the minimization problem

$$\min_{0 \leq \gamma \leq 1} 2 \{ \text{Tr}(T\gamma) + \theta \text{Tr}(S(\gamma)) \}.$$

Any critical point γ^* of the functional satisfies the Euler-Lagrange equation

$$T + \theta S'(\gamma_*) = 0, \quad \text{that is} \quad T + \theta \ln \left(\frac{\gamma_*}{1 - \gamma_*} \right) = 0. \quad (2.10)$$

There is therefore only one such critical point, given by

$$\gamma_* = \frac{1}{1 + e^{T/\theta}} = \frac{e^{-T/(2\theta)}}{2 \cosh(T/(2\theta))}, \quad \text{hence} \quad 1 - \gamma_* = \frac{1}{1 + e^{-T/\theta}} = \frac{e^{T/(2\theta)}}{2 \cosh(T/(2\theta))}.$$

By convexity of the functional, this critical point is the minimizer. For this one-body density matrix, we obtain, using (2.10)

$$\begin{aligned} 2 \{ \text{Tr}(T\gamma_*) + \theta \text{Tr}(S(\gamma_*)) \} &= 2 \text{Tr} \left(\gamma_* \left[T + \theta \ln \left(\frac{\gamma_*}{1 - \gamma_*} \right) \right] + \theta \ln(1 - \gamma_*) \right) \\ &= 2\theta \text{Tr}(\ln(1 - \gamma_*)) = 2\theta \text{Tr}(T/2\theta) - 2\theta \text{Tr}(\ln[2 \cosh(T/2\theta)]). \end{aligned}$$

Finally, since $\text{Tr}(T) = 0$, this gives as wanted

$$\min_{0 \leq \gamma \leq 1} 2 \{ \text{Tr}(T\gamma) + \theta \text{Tr}(S(\gamma)) \} = -\text{Tr} \left(h_\theta(T^2) \right), \quad \text{with} \quad h_\theta(x) := 2\theta \ln \left(2 \cosh \left(\frac{\sqrt{x}}{2\theta} \right) \right).$$

□

Let us gather here some properties of the function h_θ , that we will use throughout the article.

Proposition 2.6. *We have $h_\theta(x) = \theta h\left(\frac{x}{4\theta^2}\right)$ and $h'_\theta(x) = \frac{1}{4\theta} h'\left(\frac{x}{4\theta^2}\right)$, with*

$$h(y) = 2 \ln(2 \cosh(\sqrt{y})), \quad \text{and} \quad h'(y) = \frac{\tanh(\sqrt{y})}{\sqrt{y}}.$$

In particular, h (hence h_θ) is positive, increasing and concave. We have $\lim_{y \rightarrow 0} h'(y) = 1$, and the inequality $h_\theta(x) \geq \sqrt{x}$, valid for all $\theta > 0$ and all $x \geq 0$. In addition, we have the pointwise convergence $h_\theta(x) \rightarrow \sqrt{x}$ as $\theta \rightarrow 0$.

The last part shows that we recover the model at zero temperature. The concavity of h comes from the fact that h' is positive and decreasing. Another way to see concavity is that $h_\theta(t) = \min_{0 \leq g \leq 1} 2\{tg + \theta S(g)\}$ is the minimum of linear functions (in t), hence concave. The inequality $h_\theta(x) \geq \sqrt{x}$ comes from $2 \cosh(x) \geq e^x$.

2.2 Proof of Theorem 2.2: Existence of a critical temperature

We now study the minimizers of $\mathcal{F}_\theta^{(L)}(\{\mathbf{t}\})$ in (2.7), which we recall is given by

$$\mathcal{F}_\theta^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) := \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^L (t_i - 1)^2 - \text{Tr} \left(h_\theta(T^2) \right).$$

First, we prove that the minimizers are always 2-periodic. We then study the existence of a critical temperature. For the first part, our strategy follows closely the argument of Kennedy and Lieb in [KL04], and relies on the concavity of h_θ .

All minimizers are 2-periodic. Recall that if $x \mapsto \varphi(x)$ is concave over $\mathbb{R}_+$, then $A \mapsto \text{Tr}(\varphi(A))$ is concave over the set of positive matrices (see [Annexe B](#)). Applying this property to h_θ which is concave on $\mathbb{R}_+$, we have

$$\text{Tr}(h_\theta(T^2)) \leq \text{Tr}(h_\theta(\langle T^2 \rangle)),$$

where $\langle T^2 \rangle$ is defined as in [KL04] as the average of T^2 over all translations:

$$\langle T^2 \rangle = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \Theta_k T^2 \Theta_k^{-1}, \text{ with } \Theta_k = \Theta_1^k \text{ and } \Theta_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

This implies the lower bound

$$F_\theta^{(L)} \geq G_\theta^{(L)} \quad (2.11)$$

where

$$G_\theta^{(L)} := \inf \left\{ \mathcal{G}_\theta^{(L)}(\{\mathbf{t}\}), \mathbf{t} \in \mathbb{R}_+^L \right\}, \quad \text{with } \mathcal{G}_\theta^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) = \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^L (t_i - 1)^2 - \text{Tr} \left(h_\theta(\langle T^2 \rangle) \right). \quad (2.12)$$

In addition, we have equality in (2.11) iff the optimal $\{\mathbf{t}\}$ for $G_\theta^{(L)}$ satisfies $T(\{\mathbf{t}\})^2 = \langle T(\{\mathbf{t}\})^2 \rangle$. Note that

$$T^2 = \begin{pmatrix} t_L^2 + t_1^2 & 0 & t_1 t_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & t_1^2 + t_2^2 & 0 & t_2 t_3 & \cdots & t_L t_1 \\ t_1 t_2 & 0 & t_2^2 + t_3^2 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ t_{L-1} t_L & 0 & \cdots & 0 & t_{L-2}^2 + t_{L-1}^2 & 0 \\ 0 & t_L t_1 & \cdots & t_{L-1} t_L & 0 & t_L^2 + t_1^2 \end{pmatrix}.$$

So we have $T(\{\mathbf{t}\})^2 = \langle T(\{\mathbf{t}\})^2 \rangle$ iff $t_i^2 + t_{i+1}^2$ and $t_i t_{i+1}$ are independent of i . This happens only if T is 2-periodic.

Introducing the variables (our notation slightly differ from the ones in [KL04]: we put z^2 instead of z , so that all quantities (x, y, z) are homogeneous)

$$x := \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L t_i, \quad y^2 := \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L t_i^2, \quad z^2 = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L t_i t_{i+1}, \quad (2.13)$$

we obtain $\langle T^2 \rangle = 2y^2 \mathbb{I}_L + z^2 \Omega_L$ with $\Omega_L := \Theta_2 + \Theta_2^*$, and

$$\mathcal{G}_\theta^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) = \tilde{\mathcal{G}}_\theta^{(L)}(x, y, z) := \frac{\mu L}{2} (y^2 - 2x + 1) - \text{Tr} \left(h_\theta(2y^2 \mathbb{I}_L + z^2 \Omega_L) \right).$$

The function $\tilde{\mathcal{G}}_\theta^{(L)}$ is much easier to study, as it only depends on the three variables (x, y, z) . Let us identify the triplets (x, y, z) coming from a 2-periodic or 1-periodic state.

Lemma 2.7.

— For all $\mathbf{t} \in \mathbb{R}_+^L$, the corresponding triplet (x, y, z) belongs to

$$X := \left\{ (x, y, z) \in \mathbb{R}_+^3, \quad y^2 \geq x^2, \quad z^2 \geq \max\{0, 2x^2 - y^2\} \right\}.$$

— If $L = 2N$ is even, the configuration $\mathbf{t}$ is 2-periodic of the form (2.4) iff the triple (x, y, z) belongs to

$$X_2 := \left\{ (x, y, z) \in \mathbb{R}_+^3 \text{ of the form } x = W, \quad y^2 = W^2 + \delta^2, \quad z^2 = W^2 - \delta^2 \right\}.$$

This happens iff $z^2 = 2x^2 - y^2$.

— The configuration $\mathbf{t}$ is 1-periodic, of the form $\mathbf{t} = (W, \dots, W)$ iff (x, y, z) belongs to

$$X_1 := \left\{ (x, y, z) \in \mathbb{R}_+^3 \text{ of the form } x = y = z = W \right\}.$$

This happens iff $z^2 = 2x^2 - y^2$ and $x = y$.

Proof. By Cauchy-Schwarz, we have

$$x^2 = \frac{1}{L^2} \left(\sum_{i=1}^L t_i \right)^2 \leq \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L t_i^2 = y^2,$$

which is the first equality. Next, we have,

$$z^2 = \frac{1}{2L} \sum_{i=1}^L \left[(t_i + t_{i+1})^2 - t_i^2 - t_{i+1}^2 \right] = \frac{1}{2L} \sum_{i=1}^L (t_i + t_{i+1})^2 - y^2.$$

On the other hand, we have by Cauchy-Schwarz,

$$x^2 = \left(\frac{1}{2L} \sum_{i=1}^L (t_i + t_{i+1}) \right)^2 \leq \frac{1}{4L} \sum_{i=1}^L (t_i + t_{i+1})^2.$$

This proves that $z^2 \geq 2x^2 - y^2$.

For $L = 2N$, consider a 2-periodic configuration $\mathbf{t} = (t_i)_{i \in \mathbb{Z}/2N\mathbb{Z}}$, with $t_i = W \pm (-1)^i \delta$. For all triplets (x, y, z) defined as in (2.13), we have $x = W$, $y^2 = W^2 + \delta^2$, and $z^2 = W^2 - \delta^2$. Then, $(x, y, z) \in X_2$. The other parts of the Lemma can be easily checked. $\square$

Lemma 2.8. For any integer $L > 2$ and all $\theta \geq 0$, the minimizers of $\tilde{\mathcal{G}}_\theta^{(L)}$ over X belong to X_2 .

Proof. Let us fix x and y , and look at the minimization over the variable z only. Setting $Z := z^2$, we see that

$$\varphi : Z \mapsto \text{Tr} \left(h_\theta(2y^2 \mathbb{I}_L + Z \Omega_L) \right)$$

is concave. In addition, the derivative of φ at $Z = 0$ equals

$$\varphi'(Z) = \text{Tr} \left(h'_\theta(2y^2) \Omega_L \right) = h'_\theta(2y^2) \text{Tr}(\Omega_L) = 0,$$

where we used that Ω_L only has null elements on its diagonal. We deduce that φ is decreasing on $\mathbb{R}_+$. So the minimizer of $\tilde{\mathcal{G}}_\theta^{(L)}$ must saturate the lower bound constraint $z^2 = \max\{0, 2x^2 - y^2\}$.

We now claim that the optimal triplet (x, y, z) satisfies $2x^2 - y^2 \geq 0$. Assume otherwise that $2x^2 - y^2 < 0$, hence $z^2 = 0$. We have

$$\tilde{\mathcal{G}}_\theta^{(L)}(x, y, 0) = \frac{\mu L}{2} (y^2 - 2x + 1) - \text{Tr} \left(h_\theta(2y^2) \right) = L \left(\frac{\mu}{2} (y^2 - 2x + 1) - h_\theta(2y^2) \right).$$

This function is decreasing in x , so the optimal x saturates the constraint $x^2 = y^2$. But in this case, we have $2x^2 - y^2 = y^2 \geq 0$, a contradiction. This proves that, for the optimizer, we have $2x^2 - y^2 \geq 0$, and $z^2 = 2x^2 - y^2$. Finally, (x, y, z) belongs in X_2 . $\square$

Let $(x_*, y_*, z_*) \in X_2$ be the minimizer of $\tilde{\mathcal{G}}_\theta^{(L)}$, and let $W \geq 0$ and $\delta \geq 0$ be so that $x_* = W$, $y_*^2 = W^2 + \delta^2$, and $z_* = W^2 - \delta^2$. Let $\mathbf{t}_*$ be one of the two 2-periodic states $W \pm (-1)^i \delta$. We have $T(\{\mathbf{t}_*\})^2 = \langle T(\{\mathbf{t}_*\})^2 \rangle$, which leads to the chain of inequalities

$$F_\theta^{(L)} \geq G_\theta^{(L)} \geq \min_{(x, y, z)} \tilde{\mathcal{G}}_\theta^{(L)} = \tilde{\mathcal{G}}_\theta^{(L)}(x_*, y_*, z_*) = G_\theta^{(L)}(\{\mathbf{t}_*\}) = \mathcal{F}_\theta(\{\mathbf{t}_*\}) \geq F_\theta^{(L)}.$$

We therefore have equalities everywhere. Since only the 2-periodic states $W \pm (-1)^i \delta$ gives the optimal triplet (x_*, y_*, z_*) , they are the only minimizers. This proves that all minimizer of $\mathcal{F}_\theta^{(L)}$ are 2-periodic. They are two dimerized minimizers if $\delta > 0$, and a unique 1-periodic minimizer if $\delta = 0$.

Remark 2.9. *In the case of odd chains, we still have the equation $F_\theta^{(L)} \geq G_\theta^{(L)}$ in (2.11). However, the optimal triplet (x_*, y_*, z_*) does not usually come from a state $\{\mathbf{t}_*\}$: an odd chain cannot be dimerized. It can however come from such a state if $\delta = 0$, that is if $\mathbf{t}_*$ is actually one-periodic. One can therefore prove that also for odd chains, minimizers become 1-periodic for large enough temperature.*

Existence of the critical temperature. Since all minimizers are 2-periodic, we can parametrize $\mathcal{G}_\theta^{(L)}$ as a function of (W, δ) instead of $\{\mathbf{t}\}$. So we write (in what follows, we normalize by L to get the energy per atom)

$$g_\theta^{(L)}(W, \delta) = \frac{\mu}{2} \left[(W-1)^2 + \delta^2 \right] - \frac{1}{L} \text{Tr} \left(h_\theta(2(W^2 + \delta^2)\mathbb{I}_L + (W^2 - \delta^2)\Omega_L) \right).$$

To compute the last trace, we compute the spectrum of Ω_L . We have, for all $1 \leq k \leq L$,

$$\Omega_L \mathbf{e}_k = 2 \cos \left(\frac{4k\pi}{L} \right) \mathbf{e}_k, \quad \text{where } \mathbf{e}_k = (1, e^{2i\pi k/L}, e^{2 \cdot 2i\pi k/L}, \dots, e^{(L-1) \cdot 2i\pi k/L})^T.$$

So

$$\sigma(\Omega_L) := \left\{ 2 \cos \left(\frac{4k\pi}{L} \right), \quad 1 \leq k \leq L \right\}.$$

This shows that

$$\begin{aligned} g_\theta^{(L)}(W, \delta) &= \frac{\mu}{2} \left[(W-1)^2 + \delta^2 \right] - \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L h_\theta \left(2(W^2 + \delta^2) + 2(W^2 - \delta^2) \cos \left(\frac{4k\pi}{L} \right) \right) \\ &= \frac{\mu}{2} \left[(W-1)^2 + \delta^2 \right] - \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L h_\theta \left(4W^2 \cos^2 \left(\frac{2k\pi}{L} \right) + 4\delta^2 \sin^2 \left(\frac{2k\pi}{L} \right) \right), \end{aligned} \quad (2.14)$$

which is the expression given in (2.8). The function g_θ appearing in Lemma 2.3 has a similar expression, but we replace the last Riemann sum by the corresponding integral.

First, we prove that for θ large enough, the minimizer is 1-periodic (corresponding to $\delta = 0$).

Lemma 2.10. *For all $\theta \geq \frac{1}{\mu}$, the minimizer of $\mathcal{G}_\theta^{(L)}$ satisfies $\delta = 0$. The same holds for the function g_θ (thermodynamic limit case).*

Proof. We prove the result in the thermodynamic limit, but the proof works similarly at fixed L . Let $(W_1, 0)$ denote the minimizer of g_θ among 1-periodic configurations (that is with the extra constraint that $\delta = 0$). Writing that $\partial_W g_\theta(W_1, 0) = 0$, we obtain that

$$\mu(W_1 - 1) = \frac{W_1}{\pi\theta} \int_0^{2\pi} h' \left(\frac{W_1^2 \cos^2(s)}{\theta^2} \right) \cos^2(s) ds. \quad (2.15)$$

For any other configurations (W, δ) , we write $W = W_1 + \varepsilon$, and obtain that

$$\begin{aligned} g_\theta(W_1 + \varepsilon, \delta) - g_\theta(W_1, 0) &= \frac{\mu}{2} \left[2(W_1 - 1)\varepsilon + \varepsilon^2 + \delta^2 \right] \\ &\quad - \frac{\theta}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[h \left(\frac{(W_1 + \varepsilon)^2 \cos^2(s) + \delta^2 \sin^2(s)}{\theta^2} \right) - h \left(\frac{W_1^2 \cos^2(s)}{\theta^2} \right) \right] ds. \end{aligned}$$

Using that h is concave, we have $h(a+b) - h(a) \leq h'(a)b$, so, with $a = W_1^2 \cos^2(s)/\theta^2$ and

$b = [\delta^2 \sin^2(s) + (2W_1\varepsilon + \varepsilon^2) \cos^2(s)] / \theta^2$, we get

$$\begin{aligned} & g_\theta(W_1 + \varepsilon, \delta) - g_\theta(W_1, 0) \\ & \geq \mu(W_1 - 1)\varepsilon + \frac{\mu}{2}\varepsilon^2 + \frac{\mu}{2}\delta^2 \\ & \quad - \frac{1}{2\pi\theta} \int_0^{2\pi} h' \left(\frac{W_1^2 \cos^2(s)}{\theta^2} \right) [\delta^2 \sin^2(s) + (2W_1\varepsilon + \varepsilon^2) \cos^2(s)] ds. \end{aligned}$$

Using (2.15), the term linear in ε vanishes. In addition, since $h'' < 0$ on $\mathbb{R}_+$, we have $h'(x) \leq h'(0) = 1$. This gives

$$g_\theta(W_1 + \varepsilon, \delta) - g_\theta(W_1, 0) \geq \left(\frac{\mu}{2} - \frac{1}{2\theta} \right) \varepsilon^2 + \left(\frac{\mu}{2} - \frac{1}{2\theta} \right) \delta^2.$$

The right-hand side is positive whenever $\theta > \frac{1}{\mu}$, which proves the result. $\square$

In what follows, we define the critical temperature $\theta_c = \theta_c(\mu)$ by

$$\theta_c := \inf \{ \theta \in \mathbb{R}_+, \text{ the minimizer of } g_{\theta'} \text{ has } \delta = 0 \text{ for all } \theta' \geq \theta \}.$$

We define similarly $\theta_c^{(L)} = \theta_c^{(L)}(\mu)$ for the case of finite chains.

Study of the critical temperature in the case $L \in 2\mathbb{N}$. We now study $\theta_c^{(L)}$ with $L = 2N$, $N \geq 2$, and prove that it is strictly positive if $L \equiv 0 \pmod{4}$, and that, if $L \equiv 2 \pmod{4}$, there is $\mu_c = \mu_c(L)$ so that $\theta_c^{(L)}(\mu) > 0$ iff $\mu < \mu_c(L)$.

For fixed θ , any minimizing configuration (W, δ) satisfies the Euler-Lagrange equations

$$(\partial_W g_\theta^{(L)}, \partial_\delta g_\theta^{(L)})(W, \delta) = (0, 0).$$

This gives the set of equations

$$\begin{cases} \mu(W - 1) &= \frac{2W}{\theta} \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L h' \left(\frac{W^2}{\theta^2} \cos^2\left(\frac{2k\pi}{L}\right) + \frac{\delta^2}{\theta^2} \sin^2\left(\frac{2k\pi}{L}\right) \right) \cos^2\left(\frac{2k\pi}{L}\right) \\ \mu\delta &= \frac{2\delta}{\theta} \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L h' \left(\frac{W^2}{\theta^2} \cos^2\left(\frac{2k\pi}{L}\right) + \frac{\delta^2}{\theta^2} \sin^2\left(\frac{2k\pi}{L}\right) \right) \sin^2\left(\frac{2k\pi}{L}\right). \end{cases} \quad (2.16)$$

Note that the second equation always admits the trivial solution $\delta = 0$. This corresponds to the critical point among 1-periodic configurations. It is the unique solution if $\theta \geq \theta_c^{(L)}$, but for $\theta \in (0, \theta_c^{(L)})$, there are other critical points, corresponding to the dimerized configurations. Actually, as θ varies, we expect two branches of solutions: the branch of 1-periodic configuration, and the branch of dimerized configurations. These two branches cross only at $\theta = \theta_c$ (see Figure 2.2 (right)).

In order to focus on the branch of dimerized configurations, we factor out the δ factor in the second equation. Now, $\delta = 0$ is no longer a solution, unless we are exactly at the critical temperature $\theta_c^{(L)}$. So, in order to find this critical temperature, we seek the solution, in (W, θ) , of (we multiply the second equation by W for clarity)

$$\begin{cases} \mu(W - 1) &= \frac{2W}{\theta} \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L h' \left(\frac{W^2}{\theta^2} \cos^2\left(\frac{2k\pi}{L}\right) \right) \cos^2\left(\frac{2k\pi}{L}\right) \\ \mu W &= \frac{2W}{\theta} \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L h' \left(\frac{W^2}{\theta^2} \cos^2\left(\frac{2k\pi}{L}\right) \right) \sin^2\left(\frac{2k\pi}{L}\right). \end{cases} \quad (2.17)$$

Lemma 2.11. *For all $\mu > 0$, there is a unique solution (W, θ) of (2.17) in the case $L \equiv 0 \pmod{4}$, whereas if $L \equiv 2 \pmod{4}$, there is some value $\mu_c := \mu_c(L)$ such that for all $\mu > \mu_c$, (2.17) has no solution, and has a unique one if $\mu \leq \mu_c$. Moreover in the last case $\mu_c(L) \sim \frac{2}{\pi} \ln(L)$ at $+\infty$.*

Proof. We write $L = 2N$, and note that the terms k and $k + N$ gives the same contribution. Taking the difference of the second and first equations of (2.17), we obtain

$$\mu = -\frac{2W}{\theta} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N h' \left(\frac{W^2}{\theta^2} \cos^2 \left(\frac{k\pi}{N} \right) \right) \cos \left(\frac{2k\pi}{N} \right).$$

Recall that $h'(t) = \frac{\tanh(\sqrt{t})}{\sqrt{t}}$ for $t \neq 0$ and $h'(0) = 1$. The point $t = 0$ therefore plays a special role. The argument of h' equals 0 for $k = \frac{N}{2}$, which happens only if $N \equiv 0 \pmod{2}$ (that is $L \equiv 0 \pmod{4}$). In this case, the equation becomes, with $x := \frac{W}{\theta}$ (we write $L = 2N = 4n$)

$$\mu = -\frac{1}{n} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^{2n} \frac{\tanh \left(x \cos \left(\frac{k\pi}{2n} \right) \right)}{\cos \left(\frac{k\pi}{2n} \right)} \cos \left(\frac{k\pi}{n} \right) + \frac{x}{n} =: \mathcal{J}_{2n}(x). \quad (2.18)$$

The function $\mathcal{J}_{2n}$ is smooth. The first sum is uniformly bounded for $x \in \mathbb{R}_+$ while the second diverges, so $\mathcal{J}_{2n}(0) = 0$ and $\mathcal{J}_{2n}(+\infty) = +\infty$. We claim that $\mathcal{J}_{2n}$ is increasing. The intermediate value theorem then gives the existence and uniqueness of the solution of $\mathcal{J}_{2n}(x) = \mu$ on $\mathbb{R}_+$. This gives $\frac{W}{\theta} = \mathcal{J}_{2n}^{-1}(\mu)$. We then deduce respectively θ and W from the first and second equations of (2.17). This proves that (2.17) has a unique solution. The corresponding temperature is the critical temperature $\theta_c^{(L)}$.

It remains to prove that $\mathcal{J}_{2n}$ is increasing. Splitting the sum in (2.18) into 2 sums of size $(n-1)$, we get

$$\mathcal{J}_{2n}(x) = \frac{1}{n} (x - \tanh(x)) + \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{\tanh \left(x \sin \left(\frac{k\pi}{2n} \right) \right)}{\sin \left(\frac{k\pi}{2n} \right)} - \frac{\tanh \left(x \cos \left(\frac{k\pi}{2n} \right) \right)}{\cos \left(\frac{k\pi}{2n} \right)} \right) \cos \left(\frac{k\pi}{n} \right).$$

Its derivative is given by

$$\mathcal{J}'_{2n}(x) = \frac{1}{n} \left(1 - \frac{1}{\cosh^2(x)} \right) + \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{1}{\cosh^2 \left(x \sin \left(\frac{k\pi}{2n} \right) \right)} - \frac{1}{\cosh^2 \left(x \cos \left(\frac{k\pi}{2n} \right) \right)} \right) \cos \left(\frac{k\pi}{n} \right).$$

For all $s \in [0, 1]$, the function

$$\left[\cosh^{-2} \left(x \sin \left(\frac{\pi}{2} s \right) \right) - \cosh^{-2} \left(x \cos \left(\frac{\pi}{2} s \right) \right) \right] \cos(\pi s)$$

is positive (both terms are positive if $s \in [0, 1/2]$, and both are negative if $s \in [1/2, 1]$). This shows that $\mathcal{J}_{2n}$ is increasing as wanted.

In the case $N \equiv 1 \pmod{2}$ (that is $L \equiv 2 \pmod{4}$) the argument of h' is never null, and we simply have (we write $L = 2N = 4n + 2$)

$$\mu = -\frac{1}{2n+1} \sum_{k=1}^{2n+1} \frac{\tanh \left(x \cos \left(\frac{k\pi}{2n+1} \right) \right)}{\cos \left(\frac{k\pi}{2n+1} \right)} \cos \left(\frac{2k\pi}{2n+1} \right) =: \mathcal{J}_{2n+1}(x).$$

We claim again that $\mathcal{J}_{2n+1}$ is increasing (see below). However, we now have

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \mathcal{J}_{2n+1}(x) = -\frac{1}{2n+1} \sum_{k=1}^{2n+1} \frac{\cos(\frac{2k\pi}{2n+1})}{\left| \cos(\frac{k\pi}{2n+1}) \right|} =: \mu_c(L). \quad (2.19)$$

If $\mu \in (0, \mu_c(L))$, we can apply again the intermediate value theorem, and deduce that the equation $\mathcal{J}_{2N}(x) = \mu$ has the unique solution $x = \mathcal{J}_{2n+1}^{-1}(\mu)$. We deduce as before that there is unique solution of system (2.17) in this case. If instead $\mu > \mu_c(L)$, then the system (2.17) has no solution.

Let us prove that $\mathcal{J}_{2n+1}$ is increasing (this will eventually prove that $\mu_c(L) > 0$. Its derivative is given by

$$(2n+1)\mathcal{J}'_{2n+1}(x) = -\sum_{k=1}^{2n+1} \frac{\cos\left(\frac{2k\pi}{2n+1}\right)}{\cosh^2\left(x \cos\left(\frac{k\pi}{2n+1}\right)\right)} = -\frac{1}{\cosh^2(x)} - 2\sum_{k=1}^n \frac{\cos\left(\frac{2k\pi}{2n+1}\right)}{\cosh^2\left(x \cos\left(\frac{k\pi}{2n+1}\right)\right)}.$$

In the last equality, we isolated the $k = 2n+1$ term, and use the change of variable $k' = 2n+1-k$ for $n+1 \leq k \leq 2n$. When $1 \leq k \leq n/2$, we have $\cos\left(\frac{2k\pi}{2n+1}\right) \geq 0$, while $\frac{1}{\sqrt{2}} \leq \cos\left(\frac{k\pi}{2n+1}\right) \leq 1$. On the other hand, if $n/2 \leq k \leq n$, we have $\cos\left(\frac{2k\pi}{2n+1}\right) \leq 0$, and $0 \leq \cos\left(\frac{k\pi}{2n+1}\right) \leq \frac{1}{\sqrt{2}}$. In both cases, we deduce that

$$\forall k \in \{1, \dots, n\}, \quad -\frac{\cos\left(\frac{2k\pi}{2n+1}\right)}{\cosh^2\left(x \cos\left(\frac{k\pi}{2n+1}\right)\right)} \geq -\frac{\cos\left(\frac{2k\pi}{2n+1}\right)}{\cosh^2\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)}.$$

Summing over k , and using that

$$2\sum_{k=1}^n \cos\left(\frac{2k\pi}{2n+1}\right) = \sum_{k=1}^{2n} \cos\left(\frac{2k\pi}{2n+1}\right) = \sum_{k=1}^{2n+1} \cos\left(\frac{2k\pi}{2n+1}\right) - 1 = -1,$$

we obtain the lower bound

$$(2n+1)\mathcal{J}'_{2n+1}(x) \geq -\frac{1}{\cosh^2(x)} + \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)} \geq 0,$$

which proves that $\mathcal{J}_{2n+1}$ is increasing.

Finally, we estimate $\mu_c(L)$, defined in (2.19). We rewrite $\mu_c(L)$ as

$$\mu_c(L) = \frac{1}{2n+1} \sum_{k=1}^{2n+1} f\left(\frac{k}{2n+1}\right) + \frac{1}{2n+1} \sum_{k=1}^{2n+1} \frac{1}{\pi \left| \frac{k}{2n+1} - \frac{1}{2} \right|}, \quad \text{with} \quad f(s) := \frac{\cos(2\pi s)}{|\cos(\pi s)|} - \frac{1}{\pi \left| s - \frac{1}{2} \right|}.$$

We recognize a Riemann sum in the first term. Since the function f is integrable on $[0, 1]$ (there is no singularity at $s = \frac{1}{2}$), this term converges to the integral of f . For the second term, we recognize a harmonic sum. More specifically, we have

$$\frac{1}{2n+1} \sum_{k=1}^{2n+1} \frac{1}{\pi \left| \frac{k}{2n+1} - \frac{1}{2} \right|} = \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{2n+1} \frac{1}{\left| k - n - \frac{1}{2} \right|} \sim \frac{2}{\pi} \sum_{k'=1}^n \frac{1}{\left(k' - \frac{1}{2} \right)} \sim \frac{2}{\pi} \ln(n) \sim \frac{2}{\pi} \ln(L).$$

This proves that $\mu_c(L) \sim \frac{2}{\pi} \ln(L)$ at $+\infty$ and completes the proof. $\square$

3 Proofs in the thermodynamic model

We now focus on the thermodynamic model.

3.1 Proof of Lemma 2.3: Justification of the thermodynamic model

First, we show that this model is indeed the limit of the finite chain model as $L \rightarrow \infty$. We denote by $f_\theta^{(2N)}$ the minimum of $g_\theta^{(2N)}$ (so $f_\theta^{(2N)} = \frac{1}{2N} F_\theta^{(2N)}$), and by $\tilde{f}_\theta$ the minimum of g_θ . Our goal is to prove that $\tilde{f}_\theta = f_\theta$, where we recall that $f_\theta := \liminf_N f_\theta^{(2N)}$.

We denote by (W_{2N}, δ_{2N}) the optimizer of $g_\theta^{(2N)}$, and by (W_*, δ_*) the one of g_θ . First, from the pointwise convergence $g_\theta^{(2N)}(W, \delta) \rightarrow g_\theta(W, \delta)$, we obtain

$$\tilde{f}_\theta = g_\theta(W_*, \delta_*) = \lim_{N \rightarrow \infty} g_\theta^{(2N)}(W_*, \delta_*) \geq \lim_{N \rightarrow \infty} f_\theta^{(2N)} = f_\theta$$

For the other inequality, we use that $h_\theta(x) \leq \sqrt{x} + 2\theta \ln(2)$, so

$$g_\theta^{(2N)}(W, \delta) \geq \frac{\mu}{2} \left[(W-1)^2 + \delta^2 \right] - \sqrt{W^2 + \delta^2} - 2\theta \ln(2).$$

In particular, $g_\theta^{(2N)}$ is lower bounded and coercive, uniformly in N . So if (W_{2N}, δ_{2N}) denotes the optimizer of $g_\theta^{(2N)}$, the sequence (W_{2N}, δ_{2N}) is bounded in $\mathbb{R}_+^2$. Up to a not displayed subsequence, we may assume that

$$f_\theta = \lim_{N \rightarrow \infty} f_\theta^{(2N)} = \lim_{N \rightarrow \infty} g_\theta^{(2N)}(W_{2N}, \delta_{2N}), \quad \text{and} \quad \lim_{N \rightarrow \infty} (W_{2N}, \delta_{2N}) =: (W_\infty, \delta_\infty).$$

We then have

$$f_\theta = \lim_{N \rightarrow \infty} g_\theta^{(2N)}(W_{2N}, \delta_{2N}) = \lim_{N \rightarrow \infty} g_\theta(W_{2N}, \delta_{2N}) + \lim_{N \rightarrow \infty} \left[g_\theta^{(2N)} - g_\theta \right] (W_{2N}, \delta_{2N}).$$

The first limit converges to $g_\theta(W_\infty, \delta_\infty)$, by continuity of the g_θ functional. For the second limit, we use that $g_\theta^{(2N)} - g_\theta$ is the difference between an integral and a corresponding Riemann sum. If $\mathcal{I}_N(s)$ denotes the integrand, this difference is controlled by $\frac{c}{2N} \sup_s \|\mathcal{I}'_N(s)\|$. In our case, $\mathcal{I}_N(s) = h_\theta(4W_{2N}^2 \cos^2(\pi s) + 4\delta_{2N}^2 \sin^2(\pi s))$, whose derivative is uniformly bounded in N , since (W_{2N}, δ_{2N}) is bounded. This proves that the last limit goes to zero, hence

$$f_\theta = g_\theta(W_\infty, \delta_\infty) \geq \tilde{f}_\theta.$$

We conclude that $f_\theta = \tilde{f}_\theta$. In particular, by uniqueness of the minimizer of g_θ , we must have $(W_\infty, \delta_\infty) = (W_*, \delta_*)$, and the whole sequence (W_{2N}, δ_{2N}) converges to (W_*, δ_*) .

3.2 Proof of Theorem 2.4: Estimation of the critical temperature.

We now study the properties of θ_c , the critical temperature in the thermodynamic limit. Reasoning as in the finite L case, the critical temperature θ_c can be found by solving the equations in (W, θ) (compare with (2.17))

$$\begin{cases} \mu(W-1) &= \frac{W}{\pi\theta} \int_0^{2\pi} h' \left(\frac{W^2 \cos^2(s)}{\theta^2} \right) \cos^2(s) ds \\ \mu W &= \frac{W}{\pi\theta} \int_0^{2\pi} h' \left(\frac{W^2 \cos^2(s)}{\theta^2} \right) \sin^2(s) ds. \end{cases}$$

Using again the expression $h'(t) := \frac{\tanh(\sqrt{t})}{\sqrt{t}}$, and splitting the integrals between $(0, 2\pi)$ into four of size $\pi/2$, this is also

$$\begin{cases} \mu(W-1) &= \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} \tanh\left(\frac{W \cos(s)}{\theta}\right) \cos(s) ds \\ \mu W &= \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} \tanh\left(\frac{W \cos(s)}{\theta}\right) \frac{\sin^2(s)}{\cos(s)} ds. \end{cases} \quad (2.20)$$

Let us prove that this system always admits a unique solution. The proof is similar to the previous $L \equiv 0 \pmod{4}$ case. Taking the difference of the two equations gives, with $x := \frac{W}{\theta}$,

$$\mu = -\frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} \tanh(x \cos(s)) \frac{\cos(2s)}{\cos(s)} ds =: \mathcal{J}(x), \quad (2.21)$$

The function $\mathcal{J}$ is derivable on $\mathbb{R}_+$ with derivative given by

$$\mathcal{J}'(x) = \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/4} \left(\frac{1}{\cosh^2(x \sin(s))} - \frac{1}{\cosh^2(x \cos(s))} \right) \cos(2s) ds.$$

The integrand is positive for all $s \in [0, \pi/4]$, so $\mathcal{J}$ is a strictly increasing function on $\mathbb{R}_+$, and since $\mathcal{J}([0, +\infty)) = [0, +\infty)$, we get $x = \frac{W}{\theta} = \mathcal{J}^{-1}(\mu)$. The first equation of (2.20) gives

$$\mu(x\theta - 1) = \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} \tanh(x \cos(s)) \cos(s) ds.$$

This proves that θ_c is well defined and depends only on μ .

We now estimate this critical temperature. We are interested in the large μ limit. First, since $\mathbb{R} \ni u \mapsto \tanh(u)$ is a bounded function, the first equation shows that $\mu(W-1)$ is uniformly bounded in μ , so $W = 1 + O(\mu^{-1})$ as $\mu \rightarrow \infty$. Then, we must have $\theta \rightarrow 0$ as $\mu \rightarrow \infty$ in order to satisfy the second equation. Using the dominated convergence in the first integral gives

$$\frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} \tanh\left(\frac{W}{\theta} \cos(s)\right) \cos(s) ds \xrightarrow{\theta \rightarrow 0} \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} \cos(s) ds = \frac{4}{\pi},$$

so the first equation gives

$$W = 1 + \frac{4}{\pi\mu} + o\left(\frac{1}{\mu}\right).$$

We now evaluate the integral of the right-hand side in the second equation, in the limit $\theta \rightarrow 0$. It is convenient to make the change of variable $s \mapsto \pi/2 - s$, so we compute

$$I(\theta) := \int_0^{\pi/2} \tanh\left(\frac{W}{\theta} \sin(s)\right) \frac{\cos^2(s)}{\sin(s)} ds.$$

In order to evaluate $I(\theta)$ as $\theta \rightarrow 0$, we write $I = I_1 + I_2$ with

$$I_1 := \int_0^{\pi/2} \tanh\left(\frac{W}{\theta} \sin(s)\right) \frac{\cos(s)}{\sin(s)} ds \quad \text{and} \quad I_2 := \int_0^{\pi/2} \tanh\left(\frac{W}{\theta} \sin(s)\right) \frac{\cos(s)(\cos(s)-1)}{\sin(s)} ds.$$

For the first integral, we make the change of variable $u = \frac{W}{\theta} \sin(s)$, and get

$$I_1 = \int_0^{\frac{W}{\theta}} \frac{\tanh(u)}{u} du = \ln\left(\frac{W}{\theta}\right) + c_1 + o(1), \quad \text{with} \quad c_1 := \int_0^1 \frac{\tanh(u)}{u} + \int_1^\infty \frac{(\tanh(u)-1)}{u} du.$$

The value of c_1 is computed numerically to be $c_1 \approx 0.8188$. For the second integral I_2 , we remark

that the integrand is uniformly bounded in θ and s , so $I_2 = O(1)$. Actually, since $\theta \rightarrow 0$, we have, by the dominated convergence theorem that

$$I_2 = \int_0^{\pi/2} \frac{\cos(s)(\cos(s) - 1)}{\sin(s)} ds + o(1) = \ln(2) - 1 + o(1).$$

Altogether, we obtain that

$$I(\theta) = \ln\left(\frac{W}{\theta}\right) + c_2 + o(1), \quad \text{with} \quad c_2 = c_1 + \ln(2) - 1 \approx 0.512.$$

Together with the second equation of (2.20), we obtain

$$\mu = \frac{4}{\pi W} \left(\ln\left(\frac{W}{\theta}\right) + c_2 + o(1) \right)$$

which gives, as wanted, in the limit $\mu \rightarrow \infty$

$$\theta_c(\mu) \sim C \exp\left(-\frac{\pi}{4}\mu\right) \quad \text{with } C \approx 0.61385.$$

3.3 Proof of Theorem 2.5: study of the phase transition

In the previous section, we found the critical temperature. We now study the bifurcation of δ around this temperature. The critical points of g_θ are given by the Euler–Lagrange equations

$$\begin{cases} \mu(W - 1) &= \frac{W}{\pi\theta} \int_0^{2\pi} h' \left(\frac{W^2 \cos^2(s) + \delta^2 \sin^2(s)}{\theta^2} \right) \cos^2(s) ds \\ \mu W &= \frac{W}{\pi\theta} \int_0^{2\pi} h' \left(\frac{W^2 \cos^2(s) + \delta^2 \sin^2(s)}{\theta^2} \right) \sin^2(s) ds. \end{cases}$$

Recall that one can remove the 1-periodic minimizers by factoring out δ in the second equation. This gives a set of equation involving δ through the variable $\Delta := \delta^2$ only. In what follows, we fix μ , and set (we multiply the equations by θ/W in order to have simpler computations afterwards)

$$\mathcal{F}(\theta; (W, \Delta)) := \begin{cases} \mu\theta \left(1 - \frac{1}{W}\right) - \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} h' \left(\frac{W^2 \cos^2(s) + \Delta \sin^2(s)}{\theta^2} \right) \cos^2(s) ds \\ \mu\theta - \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} h' \left(\frac{W^2 \cos^2(s) + \Delta \sin^2(s)}{\theta^2} \right) \sin^2(s) ds. \end{cases}$$

Recall that $\mathcal{F}(\theta_c; (W_*, 0)) = (0, 0)$, where W_* is the optimal W at the critical temperature. If $\mathcal{F}(\theta; (W, \Delta)) = (0, 0)$ with $\Delta > 0$, the configurations $(W, \pm\sqrt{\Delta})$ are minimizers of g_θ . If $\mathcal{F}(\theta; (W, \Delta)) = (0, 0)$ with $\Delta < 0$, it does not correspond to a physical solution.

We want to apply the implicit function theorem for $\mathcal{F}$ at the point $(\theta_c; (W_*, 0))$. In order to do so, we first record all derivatives. We denote by $\mathcal{F} = (\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2)$ the components of $\mathcal{F}$. The derivatives of $\mathcal{F}$, evaluated at $\Delta = 0$, $\theta = \theta_c$ and $W = W_*$ are given by

$$\begin{cases} \partial_W \mathcal{F}_1 &= \frac{\mu\theta_c}{W_*^2} - \frac{2W_*}{\theta_c^2} A \\ \partial_W \mathcal{F}_2 &= -\frac{2W_*}{\theta_c^2} B \end{cases}, \quad \begin{cases} \partial_\Delta \mathcal{F}_1 &= -\frac{1}{\theta_c^2} B \\ \partial_\Delta \mathcal{F}_2 &= -\frac{1}{\theta_c^2} C \end{cases}, \quad \text{and} \quad \begin{cases} \partial_\theta \mathcal{F}_1 &= \mu \left(1 - \frac{1}{W_*}\right) + 2\frac{W_*^2}{\theta^3} A \\ \partial_\theta \mathcal{F}_2 &= \mu + 2\frac{W_*^2}{\theta^3} B \end{cases}.$$

where we set (we split the integral in four parts of size $\pi/2$)

$$\begin{cases} A := \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} h'' \left(\frac{W_*^2 \cos^2(s)}{\theta_c^2} \right) \cos^4(s) ds \\ B := \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} h'' \left(\frac{W_*^2 \cos^2(s)}{\theta_c^2} \right) \sin^2(s) \cos^2(s) ds \\ C := \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} h'' \left(\frac{W_*^2 \cos^2(s)}{\theta_c^2} \right) \sin^4(s) ds. \end{cases}$$

Since h is concave, A, B and C are negative. In addition, by Cauchy-Schwarz, we have

$$B^2 \leq AC. \quad (2.22)$$

The Jacobian $J := (\partial_{(W, \Delta)} \mathcal{F})(\theta_c; (W_*, 0))$ is of the form

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\mu \theta_c}{W_*^2} - \frac{2W_*}{\theta_c^2} A & -\frac{1}{\theta_c^2} B \\ -\frac{2W_*}{\theta_c^2} B & -\frac{1}{\theta_c^2} C \end{pmatrix}, \quad \text{and} \quad \det J = -\frac{\mu}{W_*^2 \theta_c} C + \frac{2W_*}{\theta_c^4} (AC - B^2).$$

Since $C < 0$ and $B^2 - AC < 0$, we have $\det J > 0$, so J is invertible. We can therefore apply the implicit function theorem for $\mathcal{F}$ at $(\theta_c, (W_*, 0))$. There is a function $\theta \mapsto (W(\theta), \Delta(\theta))$ so that, locally around $(\theta_c, (W_*, 0))$, we have

$$\mathcal{F}(\theta, (W, \Delta)) = 0, \quad \text{iff} \quad (W, \Delta) = (W(\theta), \Delta(\theta)).$$

The derivatives $(W'(\theta), \Delta'(\theta))$ are given by

$$\begin{pmatrix} W'(\theta_c) \\ \Delta'(\theta_c) \end{pmatrix} = -J^{-1} \begin{pmatrix} \partial_{\theta} \mathcal{F}_1 \\ \partial_{\theta} \mathcal{F}_2 \end{pmatrix} = \frac{-1}{\det J} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\theta_c^2} C & \frac{1}{\theta_c^2} B \\ \frac{2W_*}{\theta_c^2} B & \frac{\mu \theta_c}{W_*^2} - \frac{2W_*}{\theta_c^2} A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \left(1 - \frac{1}{W_*}\right) + 2\frac{W_*^2}{\theta_c^3} A \\ \mu + 2\frac{W_*^2}{\theta_c^3} B \end{pmatrix}.$$

This gives

$$\Delta'(\theta_c) = \frac{-1}{\det J} \left(\frac{2W_* \mu}{\theta_c^2} \right) \left((B - A) + \frac{\mu \theta_c^3}{2W_*^3} \right). \quad (2.23)$$

We claim that $B \geq A$ (for the proof see below). This shows that $\Delta'(\theta_c) < 0$. So, restoring the variable δ^2 , we have

$$\delta^2(\theta) \sim -\Delta'(\theta_c)(\theta_c - \theta)_+, \quad \text{and finally,} \quad \boxed{\delta(\theta) = \sqrt{-\Delta'(\theta_c)} \cdot \sqrt{(\theta_c - \theta)_+} (1 + o(1)).}$$

It remains to prove that $B \geq A$. This comes from the fact that h'' is increasing negative. First, we notice that $|A|$ and $|C|$ are of the form

$$|A| = \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} f(s)g(s)ds, \quad |C| = \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} f(s)g(\pi/2 - s),$$

with $f(s) := |h''(W_*^2 \cos^2(s)/\theta_c^2)|$ and $g(s) := \cos^4(s)$. The functions f and g are both decreasing on $[0, \frac{\pi}{2}]$. By re-arrangement, we deduce that $|A| > |C|$. Actually, we have

$$|A| - |C| = \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/4} \left(f(s) - f\left(\frac{\pi}{2} - s\right) \right) \left(g(s) - g\left(\frac{\pi}{2} - s\right) \right) ds > 0.$$

Together with Cauchy-Schwarz in (2.22), this gives $|B|^2 \leq |A| \cdot |C| < |A|^2$, since A and B are negative, we get $B > A$, as wanted. This concludes the proof of Theorem 2.5.

Appendix A Gain of energy in the thermodynamic limit

In this section, we prove that the gain of energy due to Peierls dimerization is exponentially small in μ . We focus on the thermodynamic limit case (although the proof is similar in the $L \in 2\mathbb{N}$ case). We also focus only on the null temperature case $\theta = 0$. In this case, the thermodynamic energy reads

$$g_0(W, \delta) = \frac{\mu}{2}((W-1)^2 + \delta^2) - \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sqrt{W^2 \sin^2(s) + \delta^2 \cos^2(s)} ds. \quad (2.24)$$

We introduce

$$f_0 := \min \{g_0(W, \delta), W \geq 0, \delta \geq 0\}, \quad \text{and} \quad f_{0,\text{per}} := \min \{g_0(W, 0), W \geq 0\}.$$

In other words, f_0 is the minimum of g_0 over 2-periodic (and all) configurations, and $f_{0,\text{per}}$ is the minimum over 1-periodic configurations. We prove the following

Theorem 2.12. *There is $C > 0$ such that, for all μ large enough,*

$$0 < f_{0,\text{per}} - f_0 \leq C e^{-\frac{\pi}{2}\mu}.$$

In other words, the energy gained by the Peierls distortion is exponentially small in the μ parameter. The first inequality states that in the thermodynamic limit at null temperature, the minimizers are always dimerized, as first proved by Kennedy and Lieb [KL04].

Proof. Let us first compute W_1 , the optimizer of $g_0(W, 0)$. This is simply the minimum of

$$g_0(W, 0) = \frac{\mu}{2}(W-1)^2 - \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sqrt{W^2 \sin^2(s)} ds = \frac{\mu}{2}\mu(W-1)^2 - \frac{4}{\pi}W.$$

The minimizer satisfies $\mu(W_1 - 1) = \frac{4}{\pi}$, hence $W_1 = 1 + \frac{4}{\pi\mu}$. In particular,

$$f_{0,\text{per}} = -\frac{4}{\pi} - \frac{8}{\pi^2\mu}.$$

We now compute the energy gain from the breaking of periodicity. For (W, δ) a trial pair, we write $W = W_1 + \varepsilon$. We assume that $g_0(W, \delta) < g_0(W_1, 0)$. Then

$$\begin{aligned} g_0(W, \delta) - g_0(W_1, 0) &= \frac{\mu}{2}(\varepsilon^2 + \delta^2) \\ &\quad - \frac{4W_1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \left[\sqrt{\frac{(W_1 + \varepsilon)^2}{W_1^2} + \frac{\delta^2}{W_1^2} \cot^2(s)} - 1 - \frac{\varepsilon}{W_1} \right] \sin(s) ds \\ &\geq \frac{\mu}{2}(\varepsilon^2 + \delta^2) - \frac{4\delta}{\pi}, \quad \text{so } \delta < \frac{8}{\pi\mu} \quad \text{and} \quad |\varepsilon| < \frac{4}{\pi\mu}. \end{aligned}$$

To compute the integral, we make the change of variable $u = \cos(s)$, and get that the integral equals

$$\frac{W_1 + \varepsilon}{W_1} \left(\int_0^1 \sqrt{1 + \frac{au^2}{1-u^2}} du - 1 \right), \quad \text{with } a := \left(\frac{\delta}{W_1 + \varepsilon} \right)^2.$$

Using that

$$\int_0^1 \sqrt{1 + \frac{au^2}{1-u^2}} du = E(1-a) = 1 + \left(\frac{-\ln(a)}{4} - \frac{1}{4} + \ln(2) \right) a + O(a^2),$$

where E is a complete elliptic integral of the second kind, we get

$$\begin{aligned} g_0(W, \delta) - g_0(W_1, 0) &= \frac{\mu}{2}(\varepsilon^2 + \delta^2) - \frac{4\delta^2}{\pi(W_1 + \varepsilon)} \left[-\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\delta}{W_1 + \varepsilon} \right) - \frac{1}{4} + \ln(2) + O(a) \right] \\ &= \frac{1}{2} \mu(\varepsilon^2 + \delta^2) - \frac{2}{\pi W_1} \delta^2 \ln(\delta^{-1}) (1 + o(1)). \end{aligned}$$

We now minimize the right-hand side. For large μ , we have $W_1 = 1 + o(1)$ and the minimization in ε gives $\varepsilon = 0$. So

$$g_0(W, \delta) - g_0(W_1, 0) \geq \delta^2 \left(\frac{\mu}{2} - \frac{2 \ln(\delta^{-1})}{\pi} (1 + o(1)) \right).$$

We optimize the right-hand side by taking $\delta = e^{-(\frac{\pi}{4}\mu + \frac{1}{2})}$, and this completes the proof. $\square$

Dans la section suivante, nous présentons la propriété de convexité de la trace $\text{Tr}(f(A))$ où f est une fonction convexe et A une matrice carrée. Cette propriété a été utilisée dans la section 1.5.2, pour démontrer le résultat de T. Kennedy et E. Lieb.

Annexe B Convexité de la trace

Les résultats de cette partie peuvent être consultés dans les détails dans [Car10] et [Bha13]. Nous adoptons les notations de [Car10].

Annexe B.1 Définitions de base et notation

Soit $\mathbf{M}_n$ ($n \in \mathbb{N}^*$) l'ensemble des matrices carrées complexes d'ordre n . Pour $A \in \mathbf{M}_n$, on désigne par $A^\dagger$, son adjoint. Soit $\mathbf{H}_n$ le sous-ensemble de $\mathbf{M}_n$ constitué des matrices A telles que $A = A^\dagger$ (les matrices hermitiennes).

Pour $A \in \mathbf{M}_n$, nous définissons la trace de A , notée $\text{Tr}(A)$ par

$$\text{Tr}(A) = \sum_{j=1}^n A_{j,j}.$$

Pour $A, B \in \mathbf{M}_n$, la trace de leur produit est donnée par

$$\text{Tr}(AB) = \sum_{i,j} A_{i,j} B_{j,i} = \sum_{i,j} B_{j,i} A_{i,j} = \text{Tr}(BA). \quad (2.25)$$

La relation (2.25) traduit la propriété de cyclicité de la trace, et stipule que pour une base orthonormée $\{u_1, \dots, u_n\}$ de $\mathbb{C}^n$,

$$\text{Tr}(A) = \sum_{j=1}^n \langle u_j, Au_j \rangle. \quad (2.26)$$

En effet, si U est la matrice unitaire dont la j ème colonne est u_j , $(U^\dagger AU)_j = \langle u_j, Au_j \rangle$, alors par (2.25), $\text{Tr}(U^\dagger AU) = \text{Tr}(AUU^\dagger) = \text{Tr}(A)$. Ainsi, $\text{Tr}(A)$ est une fonction unitairement invariante de A , et ne dépend que des valeurs propres de A . Pour une base orthonormée $\{u_1, \dots, u_n\}$ de $\mathbb{C}^n$ telle que $Au_j = \lambda_j u_j$, $\text{Tr}(A) = \sum_{j=1}^n \lambda_j$.

Par le théorème spectral, tout $A \in \mathbf{H}_n$, peut s'écrire sous la forme

$$A = \sum_{j=1}^n \lambda_j P_j, \quad (2.27)$$

où les λ_j et les P_j sont, respectivement, les valeurs propres et les projections spectrales sur les espaces propres correspondants de A . Pour toute fonction $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, nous définissons l'opérateur $f(A) \in \mathbf{H}_n$ par

$$f(A) = \sum_{j=1}^n f(\lambda_j) P_j. \quad (2.28)$$

Annexe B.2 Propriété de convexité de la trace

Soit $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Considérons la fonction de $\mathbf{H}_n$ dans $\mathbb{R}$ définie par

$$A \mapsto \text{Tr}(f(A)).$$

Le but de cette partie est de trouver des conditions sur f pour lesquelles cette fonction trace est convexe. Nous allons voir qu'il suffit que f soit convexe. Nous commençons par le résultat suivant.

Théorème 2.13. (*Inégalité de Peierls-Bogoliubov*). Soit $A \in \mathbf{H}_n$, et f une fonction convexe sur $\mathbb{R}$. Soit $\{u_1, \dots, u_n\}$ une base orthonormée de $\mathbb{C}^n$. Alors [Car10]

$$\boxed{f(\langle u_j, Au_j \rangle) \leq \langle u_j, f(A)u_j \rangle}. \quad (2.29)$$

En particulier

$$\sum_{j=1}^n f(\langle u_j, Au_j \rangle) \leq \text{Tr}(f(A)),$$

avec égalité si tous les u_j sont des vecteurs propres de A .

Proof. Par la relation (2.28), on a

$$\langle u_j, f(A)u_j \rangle = \langle u_j, \sum_{k=1}^n f(\lambda_k) P_k u_j \rangle = \sum_{k=1}^n f(\lambda_k) \langle u_j, P_k u_j \rangle = \sum_{k=1}^n f(\lambda_k) \|P_k u_j\|^2.$$

En utilisant la définition des P_k , on obtient $\sum_{k=1}^n \|P_k u_j\|^2 = \|u_j\|^2 = 1$. Ainsi par convexité de f on a,

$$\langle u_j, f(A)u_j \rangle \geq f\left(\sum_{k=1}^n \lambda_k \|P_k u_j\|^2\right) = f\left(\sum_{k=1}^n \langle u_j, \lambda_k P_k u_j \rangle\right) = f\left(\left\langle u_j, A \sum_{k=1}^n P_k u_j \right\rangle\right).$$

Puisque $\sum_{k=1}^n P_k u_j = u_j$, on déduit que

$$f(\langle u_j, Au_j \rangle) \leq \langle u_j, f(A)u_j \rangle. \quad (2.30)$$

Pour finir, on somme sur les $j = 1, \dots, n$, et on obtient

$$\sum_{j=1}^n f(\langle u_j, Au_j \rangle) \leq \text{Tr}(f(A)).$$

Si les u_j sont des valeurs propres de A , alors on a $\langle u_j, f(A)u_j \rangle = f(\langle u_j, Au_j \rangle)$, donc l'égalité. $\square$

Le résultat suivant est une conséquence de l'inégalité de Peierls-Bogoliubov et peut être énoncé comme suit [Car10]:

Théorème 2.14. Soit $f : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ une fonction convexe, alors $\mathbf{H}_n \ni A \mapsto \text{Tr}(f(A))$ est aussi convexe.

Proof. Soit $A, B \in \mathbf{H}_n$, et $C = tA + (1-t)B$, avec $t \in (0, 1)$. soit $\{u_1, \dots, u_n\}$ une base orthonormée de vecteurs propres de C . Alors, pour chaque u_j , on a

$$\langle u_j, f(C)u_j \rangle = f(\langle u_j, Cu_j \rangle) = f(t\langle u_j, Au_j \rangle + (1-t)\langle u_j, Bu_j \rangle).$$

Par la convexité de f , puis (2.30), on obtient:

$$\langle u_j, f(C)u_j \rangle \leq tf(\langle u_j, Au_j \rangle) + (1-t)f(\langle u_j, Bu_j \rangle) \leq t\langle u_j, f(A)u_j \rangle + (1-t)\langle u_j, f(B)u_j \rangle.$$

En sommant sur j , on obtient comme souhaité

$$\text{Tr}(f(tA + (1-t)B)) \leq \sum_{j=1}^n \langle u_j, (tf(A) + (1-t)f(B))u_j \rangle = t\text{Tr}(f(A)) + (1-t)\text{Tr}(f(B)).$$

□

Nous donnons maintenant un analogue du Théorème 2.14 dans le cas où les poids ne sont plus des réels $t \in (0, 1)$, mais des matrices ayant une propriété particulière [Bha13].

Théorème 2.15. (Hansen-Pederson) Soit $f : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$, une fonction convexe et $(A_k)_{k=1}^L \in \mathbf{H}_n$. Considérons une famille de matrices carrées d'ordre n $(X_k)_{k=1}^L$ telles que $\sum_{k=1}^L X_k X_k^\dagger = \mathbb{1}_n$. Alors

$$\text{Tr} \left(f \left(\sum_{k=1}^L X_k A_k X_k^\dagger \right) \right) \leq \sum_{k=1}^L \text{Tr} (X_k f(A_k) X_k^\dagger).$$

Proof. Considérons $\{u_1, \dots, u_n\}$, une base orthonormée de vecteurs propres de $C = \sum_{k=1}^L X_k A_k X_k^\dagger$.

$$\langle u_j, f(C)u_j \rangle = f(\langle u_j, Cu_j \rangle) = f \left(\sum_{k=1}^L \langle X_k^\dagger u_j, A_k X_k^\dagger u_j \rangle \right) = f(\langle V_j, \mathbf{A} V_j \rangle),$$

où $V_j = (X_1^\dagger u_j, \dots, X_L^\dagger u_j)$, avec $\|V_j\| = 1$, car $\|u_j\| = 1$, et la matrice $\mathbf{A}$ est diagonale par bloc avec sur sa diagonale les matrices A_k , $k = 1, \dots, L$.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & A_L \end{pmatrix}.$$

Puisque pour tout $j = 1, \dots, n$, $\|V_j\| = 1$, on a par l'inégalité de Peierls-Bogoliubov

$$\langle u_j, f(C)u_j \rangle \leq \langle V_j, f(\mathbf{A})V_j \rangle = \sum_{k=1}^L \langle X_k^\dagger u_j, f(A_k) X_k^\dagger u_j \rangle = \left\langle u_j, \sum_{k=1}^L X_k f(A_k) X_k^\dagger u_j \right\rangle.$$

En sommant sur $j = 1, \dots, n$, on a le résultat voulu.

□

Exponential decay of the critical points in a discrete model of polyacetylene

The aim of this chapter is to present a result on the exponential decay of the critical energy points of the Peierls-SSH model, and is a collaborative work with D. Gontier and E. Séré, and has been submitted to a peer-reviewed journal.

Abstract

We consider stationary states of the Peierls model for infinite polyacetylene chains that are homoclinic or heteroclinic connections between two-periodic dimerized states. We prove that such states converge exponentially fast to the corresponding asymptotic periodic states.

Contents

1 Introduction	47
2 Critical points for the infinite Peierls-SSH model, and main result	48
2.1 The Peierls-SSH model	48
2.2 The Peierls-SSH energy difference	48
2.3 Critical points for the infinite Peierls-SSH model, and main result . . .	50
2.4 Strategy of the proof	51
3 Smoothness and Taylor expansion of the map $\mathcal{F}_t$	54
3.1 The spectrum of homoclinic and heteroclinic configurations	54
3.2 Taylor expansion of the map $\mathcal{F}_t$	57
4 Proofs of the Lemmas	59
4.1 Proof of Lemma 3.5	59
4.2 Proof of Lemma 3.6	60
4.3 Proof of Lemma 3.7	61
4.4 Coercivity of the Hessian at the dimerized configuration	61

1 Introduction

The goal of this article is to prove an exponential decay property for critical points in the Peierls-SSH model. This model was introduced by Su, Schrieffer and Heeger to describe polyacetylene, which is a long one-dimensional chain of carbon (and hydrogen) atoms. In this model, the chain can lower its total energy by dimerizing. This physical phenomenon was first predicted by Peierls [Pei55, p.108] (see also [Frö54]) and is now known as the Peierls distortion or dimerization.

Actually, Kennedy and Lieb [KL04], and Lieb and Nachtergaele [LN95] proved that the minimizers of the Peierls-SSH energy associated to closed polyacetylene with an even number L of carbon atoms are always 2-periodic. When $L = 2 \bmod 4$ or when $L = 0 \bmod 4$ is large enough, these minimizers are dimerized, in the sense that they are 2-periodic, but not 1 periodic. In this situation, there are exactly two minimizing configurations of this energy, that we call $\mathbf{t}^-$ and $\mathbf{t}^+$. They are of the form

$$t_n^- := W - (-1)^n \delta, \quad \text{and} \quad t_n^+ := W + (-1)^n \delta. \quad (3.1)$$

Here, t_n denotes the hopping amplitude between the n -th atom and the $(n+1)$ -th atom. It is related to their distance d_n by an affine relation of the form $t_n = a - b d_n$. The quantity $W > 0$ is the average hopping amplitude between the atoms, and $\delta > 0$ is the distortion. This distortion phenomenon remains in the thermodynamic limit, that is when the number of atom goes to infinity. We proved in [GKS23] that this distortion disappears at a sufficiently high temperature. More precisely there is a critical temperature below which the polyacetylene chain is dimerized ($\delta > 0$) and behaves as an insulator, and above which it is 1-periodic ($\delta = 0$) and behaves as a metal.

In this paper, we study a family of critical points, namely homoclinic and heteroclinic critical points, for the infinite Peierls-SSH model at zero temperature. Using the terminology of dynamical systems, a configuration $\mathbf{t} = (t_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ is said to be **homoclinic** if

$$\lim_{n \rightarrow -\infty} |t_n - t_n^+| = \lim_{n \rightarrow +\infty} |t_n - t_n^+| = 0, \quad (3.2)$$

and it is said to be **heteroclinic** if

$$\lim_{n \rightarrow -\infty} |t_n - t_n^-| = \lim_{n \rightarrow +\infty} |t_n - t_n^+| = 0. \quad (3.3)$$

In other words, a configuration is homoclinic if it converges to the same dimerized state $\mathbf{t}^+$ at infinity, and it is heteroclinic if it switches from the dimerized state $\mathbf{t}^-$ at $-\infty$ to the dimerized state $\mathbf{t}^+$ at $+\infty$. Of course, one can also consider homoclinic and heteroclinic configurations which converge to $\mathbf{t}^-$ at $+\infty$. But they can be obtained from the other ones by the shift $n \mapsto n+1$.

As can be expected, the state $\mathbf{t}^+$ is a homoclinic critical point. The fact that heteroclinic critical points exist was suggested in [KH82; SSH80; VAS96]. A rigorous proof was given by M. Garcia Arroyo and E. Séré (see [Gar11; GS12]). Such configurations are sometimes called *kinks*. Another point of view on these soliton-like solution was initiated by Takayama, Lin-Liu and Maki [TLM80]. In this approach, the Peierls-SSH model is replaced by a continuum approximation involving the Dirac operator.

Our main goal is to prove that homoclinic and heteroclinic critical points converge exponentially fast to the corresponding dimerized states. In order to state our theorem, we first need to define the notion of critical points for our infinite model.

2 Critical points for the infinite Peierls-SSH model, and main result

2.1 The Peierls-SSH model

In order to define critical points for the infinite Peierls-SSH model, we start with the Peierls-SSH model for a periodic linear chain with L atoms with classical nuclei, together with quantum non-interacting electrons. We will take the limit $L \rightarrow \infty$ at the end.

We denote by t_n the hopping amplitude between the n -th and $(n+1)$ -th atoms (modulo L), and set $\mathbf{t} = \{t\} := \{t_1, \dots, t_L\}$. In what follows, we only consider the case where all hopping amplitudes are strictly positive, and we sometime write $\mathbf{t} \geq \tau > 0$ as a shortcut for $t_n \geq \tau$ for all n . For instance, for the dimerized configurations, we have $\delta < W$, so $t_n \geq W - \delta > 0$ (the quantity $z^2 := W^2 - \delta^2$ is positive, see [KL04; GKS23]). The Peierls-SSH energy of the corresponding chain is (see [KL04; LSM61; MN96; Pei55; SSH79; GKS23])

$$\mathcal{E}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) := \frac{\mu}{2} \sum_{n=1}^L (t_n - 1)^2 - 2\text{Tr}(T_-), \quad (3.4)$$

where $T = T(\{\mathbf{t}\})$ is the $L \times L$ hermitian matrix

$$T = T(\{\mathbf{t}\}) := \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 & \cdots & t_L \\ t_1 & 0 & t_2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & t_{L-2} & 0 & t_{L-1} \\ t_L & 0 & \cdots & 0 & t_{L-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

and where we set $T_- = -T\mathbb{1}(T < 0)$. The first term in (3.4) is the distortion energy of the atoms: this energy depends quadratically on the distances d_n between successive atoms, but these distances are themselves affine functions on the amplitudes t_n . The parameter $\mu > 0$ is the rigidity of the chain, and our units are such that the jump amplitude between two atoms is 1 when their distortion energy is minimal. The second term in (3.4) models the electronic energy of the valence electrons under the Hamiltonian T . It results from the identity

$$\min_{0 \leq \gamma = \gamma^* \leq 1} 2\text{Tr}(T\gamma) = 2\text{Tr}(T\mathbb{1}(T < 0)) = -2\text{Tr}(T_-).$$

The minimization on the left-hand side was performed for all one-body density matrices γ representing non-interacting electrons. The condition $0 \leq \gamma \leq 1$ is the Pauli principle, and the 2 factor stands for the spin.

2.2 The Peierls-SSH energy difference

Let us fix a configuration $\mathbf{t}$, and consider the energy difference functional $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}^{(L)}$, defined by

$$\mathcal{F}_{\mathbf{t}}^{(L)}(\{\mathbf{h}\}) := \mathcal{E}^{(L)}(\{\mathbf{t} + \mathbf{h}\}) - \mathcal{E}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) = \frac{\mu}{2} \sum_{n=1}^L (h_n + 2t_n - 2)h_n - 2\text{Tr}((T + H)_- - T_-), \quad (3.6)$$

where $T = T(\{\mathbf{t}\})$ and $H = T(\{\mathbf{h}\})$ are the hermitian matrices constructed from $\{\mathbf{t}\}$ and $\{\mathbf{h}\}$ respectively. Clearly, $\{\mathbf{t}\}$ is a critical point of $\mathcal{E}^{(L)}$ iff $\{\mathbf{0}\}$ is a critical point of $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}^{(L)}$. We have subtracted the quantity $\mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t})$ in order to have a finite energy difference at the limit $L \rightarrow \infty$. Actually, Eqn. (3.6) admits a clear analog as $L \rightarrow \infty$, namely, for two bounded sequences $\mathbf{t} : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{R}^+$ and $\mathbf{h} : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{R}$, assuming that $h \in \ell^1(\mathbb{Z}, \mathbb{R})$ and that $(T + H)_- - T_-$ is trace-class

as an operator acting on $\ell^2(\mathbb{Z}, \mathbb{C})$, we set

$$\mathcal{F}_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}) := \frac{\mu}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} (h_n + 2t_n - 2)h_n - 2\text{Tr}((T + H)_- - T_-) . \quad (3.7)$$

Now, the operator $T := T(\{\mathbf{t}\})$ (and similarly for $T + H$) is acting on the infinite dimensional Hilbert space $\ell^2(\mathbb{Z}, \mathbb{C})$, whose coefficients in the canonical basis are

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad T_{n,n+1} = T_{n+1,n} = t_n, \quad T_{i,j} = 0 \quad \text{if } |i - j| \neq 1.$$

In what follows, we denote by bold letters $\mathbf{a}, \mathbf{t}, \mathbf{h}, \mathbf{u}, \dots$ sequences from $\mathbb{Z}$ to $\mathbb{R}$, and by capital letters $A, T, H, U, \dots$ the corresponding operators acting on $\ell^2(\mathbb{Z})$.

The fact that the map $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}$ is well defined when $\mathbf{t}$ is a homoclinic or heteroclinic configuration is given in the next two lemmas (see Section 3.1 for the proof).

Lemma 3.1. *Let $\{\mathbf{t}\}$ be a homoclinic or heteroclinic configuration such that $\mathbf{t} \geq \tau$ for some $\tau > 0$. Then there is a positively oriented contour $\mathcal{C}$ in the complex plane, a constant $C \geq 0$ and a constant $\eta > 0$ so that, for all $\{\mathbf{h}\}$ with $\|\mathbf{h}\|_{\ell^\infty} \leq \eta$ and for all $z \in \mathcal{C}$, the operator $(z - (T + H))$ is invertible with $\|(z - (T + H))^{-1}\|_{\text{op}} \leq C$. In addition,*

$$-(T + H)_- = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{z}{z - (T + H)} dz.$$

The contour $\mathcal{C}$ is independent of $\mathbf{h}$, but depends on $\mathbf{t}$. This Lemma might be surprising, as the energy 0 can be in the spectrum of $T + H$. Actually, we will prove the following:

- If $\{\mathbf{t}\}$ is a homoclinic configuration with $\mathbf{t} \geq \tau > 0$, then 0 is never in the spectrum of $T + H$, for $\mathbf{h}$ small enough.
- If $\{\mathbf{t}\}$ is a heteroclinic configuration with $\mathbf{t} \geq \tau > 0$, then 0 is always an isolated eigenvalue of $T + H$ of multiplicity 1, for all $\mathbf{h}$ small enough.

In both cases, one can choose a contour $\mathcal{C}$ of the form (see Figure 3.1)

$$\mathcal{C} := (\Sigma + i) \rightarrow (\Sigma - i) \rightarrow (-g/2 - i) \rightarrow (-g/2 + i) \rightarrow (\Sigma + i), \quad (3.8)$$

where Σ is a negative enough number, and where $g = \text{dist}(0, \sigma(T) \setminus \{0\})$ is the distance between 0 and the (rest of the) spectrum.

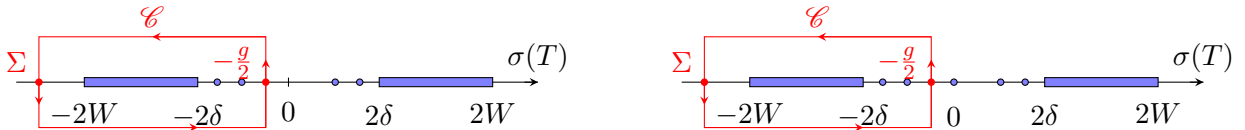


Figure 3.1 – Contours used for the Cauchy integral, for a homoclinic configuration (Left), and a heteroclinic configuration (Right). The main difference is that 0 is in the spectrum in the heteroclinic case. We prove below that $\sigma_{\text{ess}}(T) = [-2W, -2\delta] \cup [2\delta, 2W]$, and that the spectrum of T is symmetric with respect to 0.

In the heteroclinic situation, 0 is a stable (or topologically protected) eigenvalue: it is unperturbed by the addition of H . Actually, any T matrix coming from a heteroclinic configuration can be seen as a junction between two polyacetylene chains with different indices [SSH79; GMP22; Kit09].

This Lemma allows to prove that $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}$ is well-defined and smooth around $\{0\}$. We refer to Section 3.2 for the proof of the following result.

Lemma 3.2. *Let $\{\mathbf{t}\}$ be a homoclinic or heteroclinic configuration with $\mathbf{t} \geq \tau$ for some $\tau > 0$, and let $\eta > 0$ and $\mathcal{C}$ be a contour as in Lemma 3.1. The map $\mathbf{h} \mapsto \mathcal{F}_{\mathbf{t}}(\mathbf{h})$ is C^∞ on $\{\mathbf{h}, \|\mathbf{h}\|_{\ell^1} \leq \eta\}$. In addition, there is $C \geq 0$ so that, for all $\{\mathbf{h}\}$ with $\|\mathbf{h}\|_{\ell^1} < \eta$, we have*

$$\left| \mathcal{F}_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}) - L_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}) - \frac{1}{2} H_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}, \mathbf{h}) \right| \leq C \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^3,$$

where $L_{\mathbf{t}}$ (differential of $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}$) is the continuous linear form on $\ell^1(\mathbb{Z})$ defined by (we set $\Gamma_{\mathbf{t}} := \mathbb{1}(T < 0)$ the spectral projector of T on $\mathbb{R}^-$)

$$L_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}) := \mu \sum_{n \in \mathbb{Z}} (t_n - 1) h_n + 2 \text{Tr}(\Gamma_{\mathbf{t}} H),$$

and $H_{\mathbf{t}}$ (hessian of $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}$) is the bilinear form on $\ell^1(\mathbb{Z})$ defined by

$$H_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}, \mathbf{k}) := \mu \sum_{n \in \mathbb{Z}} h_n k_n + 2 \text{Tr} \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} H \frac{1}{z - T} K \frac{1}{z - T} dz \right). \quad (3.9)$$

In addition, the bilinear map $H_{\mathbf{t}}$ can be extended continuously as a bilinear map on $\ell^2(\mathbb{Z})$.

2.3 Critical points for the infinite Peierls-SSH model, and main result

We can now define the notion of critical points for the infinite Peierls-SSH model.

Definition 3.3. Let $\{\mathbf{t}\}$ be a homoclinic or heteroclinic configuration such that $\mathbf{t} \geq \tau$ for some $\tau > 0$. We say that $\{\mathbf{t}\}$ is a critical point if $L_{\mathbf{t}}$ is the null map. Equivalently, using that

$$\text{Tr}(\Gamma_{\mathbf{t}} H) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} h_n [(\Gamma_{\mathbf{t}})_{n+1, n} + (\Gamma_{\mathbf{t}})_{n, n+1}] = 2 \sum_{n \in \mathbb{Z}} h_n (\Gamma_{\mathbf{t}})_{n, n+1},$$

the configuration $\mathbf{t}$ is a critical point if

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad \boxed{t_n = 1 - \frac{4}{\mu} (\Gamma_{\mathbf{t}})_{n, n+1}}. \quad (3.10)$$

We implicitly used that Γ is symmetric and real-valued. With this definition, the dimerized configuration $\mathbf{t}^+$ is a homoclinic critical point. The kink state constructed in [GS12] is a heteroclinic critical point. Now we can provide our main result, which states that all homoclinic or heteroclinic critical points of $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}$ converge exponentially fast to $\mathbf{t}^+$ at $+\infty$.

Theorem 3.4. *Let $\{\mathbf{t}\}$ be a homoclinic or heteroclinic critical point, and let $\{\mathbf{u}\}$ be the sequence $u_n := t_n - t_n^+$. If $\mathbf{u}$ is square integrable at $+\infty$ ($\mathbf{u} \in \ell^2(\mathbb{Z}^+)$), then $\mathbf{u}$ is exponentially localized at $+\infty$: there is $C \geq 0$ and $\alpha > 0$ so that*

$$|u_n| \leq C e^{-\alpha n}.$$

Of course, the same applies in the $-\infty$ direction, and we have exponential convergence to $\mathbf{t}^+$ or $\mathbf{t}^-$ at $-\infty$ depending whether the critical configuration is homoclinic or heteroclinic.

We note that there exist critical points (that is configurations satisfying (3.10)), which do not converge to $\mathbf{t}^\pm$ at infinity. For instance, in [Gar11; GS12], the authors show the existence of kink-like solutions for a closed chain with an odd number of atoms. This solution satisfies the critical point equation (3.10), but, seeing the closed chain as a periodic configuration, it does not converge to $\mathbf{t}^\pm$ at infinity. Note that this exponential localization was already known for the exactly soluble continuum model of Takayama, Lin-Liu and Maki [TLM80].

2.4 Strategy of the proof

Let us briefly explain the strategy to prove Theorem 3.4. We break the proof in several Lemmas, that we prove later in Section 4.

Let $\{\mathbf{t}\}$ be a homoclinic or heteroclinic critical point, and let $\{\mathbf{u}\}$ be the sequence $u_n := t_n - t_n^+$, so that $T = T^+ + U$. The configurations $\{\mathbf{t}\}$ and $\{\mathbf{t}^+\}$ are critical points, hence satisfy the Euler-Lagrange equations

$$t_n = 1 - \frac{4}{\mu} \Gamma_{n,n+1}, \quad t_n^+ = 1 - \frac{4}{\mu} \Gamma_{n,n+1}^+,$$

with $\Gamma := \Gamma_{\mathbf{t}} = \mathbf{1}(T^+ + U < 0)$, and $\Gamma^+ := \mathbf{1}(T^+ < 0)$. According to Lemma 3.1, the expression of Γ and Γ^+ can be written using the Cauchy's residual formula using the *same* contour $\mathcal{C}$, that is

$$\Gamma = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{dz}{z - (T^+ + U)}, \quad \text{and} \quad \Gamma^+ = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{dz}{z - T^+},$$

and where the operators in the integrand are uniformly bounded in $z \in \mathcal{C}$. Since $u_n = t_n - t_n^+$, we obtain (we use the resolvent formula in the last line)

$$\begin{aligned} u_n &= \frac{4}{\mu} (\Gamma^+ - \Gamma)_{n,n+1} = \frac{4}{\mu} \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \left[\frac{1}{z - T^+} - \frac{1}{z - (T^+ + U)} \right] dz \right)_{n,n+1} \\ &= \frac{-4}{\mu} \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \left(\frac{1}{z - T^+} U \frac{1}{z - T^+} \right) dz \right)_{n,n+1} + \frac{1}{\mu} (\mathbf{Q}_U(U, U))_n, \end{aligned}$$

with the remainder term

$$(\mathbf{Q}_U(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2))_n = -4 \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{z - T^+} U_1 \frac{1}{z - (T^+ + U)} U_2 \frac{1}{z - T^+} dz \right)_{n,n+1}.$$

Multiplying by μ and reordering the terms, this can be also written as

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad (\mathcal{L}\mathbf{u})_n = (\mathbf{Q}_U(\mathbf{u}, \mathbf{u}))_n, \quad (3.11)$$

with the linear map

$$(\mathcal{L}\mathbf{u})_n = \mu u_n + 4 \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \left(\frac{1}{z - T^+} U \frac{1}{z - T^+} \right) dz \right)_{n,n+1}. \quad (3.12)$$

Formally, if $\mathbf{v}$ is another real sequence, with corresponding operator V , we have

$$\langle \mathbf{v}, (\mathcal{L}\mathbf{u}) \rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n (\mathcal{L}\mathbf{u})_n = \mu \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n u_n + 2 \text{Tr} \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{z - T^+} U \frac{1}{z - T^+} V \right) dz \quad (3.13)$$

and we recognize the expression of the Hessian $H_{\mathbf{t}^+}(\mathbf{v}, \mathbf{u})$ in (3.9). Unfortunately, the previous computations is formal, since $\mathbf{u}$ is not necessary in $\ell^2(\mathbb{Z})$. We only know that it is square integrable at $+\infty$. Actually, for a heteroclinic configuration, we have $\mathbf{u} \notin \ell^2(\mathbb{Z})$, since $\mathbf{u}$ does not decay to 0 at $-\infty$. In order to bypass this difficulty, we regularize $\mathbf{u}$ using appropriate cut-off functions.

For $\alpha > 0$ and $s \in \mathbb{Z}$ that we choose later (α will be small, and s will be large), we introduce the function $\theta_{\alpha,s} : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{R}^+$ defined by

$$\theta_{\alpha,s}(n) = \min\{e^{\alpha n}, e^{\alpha s}\} = \begin{cases} e^{\alpha n}, & \text{if } n < s \\ e^{\alpha s}, & \text{if } n \geq s \end{cases}, \quad (3.14)$$

and denote by $\Theta_{\alpha,s}$ the multiplication operator by $\theta_{\alpha,s}$, defined by $(\Theta_{\alpha,s})_{n,m} = \theta_{\alpha,s}(n) \delta_{n,m}$.

In what follows, we will consider the sequence $\tilde{\mathbf{u}}_{\alpha,s}$, defined by

$$(\tilde{u}_{\alpha,s})_n := \theta_{\alpha,s}(n)\theta_{\alpha,s}(n+1)u_n, \quad \text{with corresponding operator } \tilde{U}_{\alpha,s} = \Theta_{\alpha,s}U\Theta_{\alpha,s}.$$

Since $\mathbf{u}$ is bounded and square integrable at $+\infty$ the vector $\tilde{\mathbf{u}}_{\alpha,s}$ is in $\ell^2(\mathbb{Z})$ for all $\alpha > 0$ and all $s \in \mathbb{Z}$. We also introduce the operator $\tilde{T}_{\alpha,s}^+$ acting on $\ell^2(\mathbb{Z})$, and defined in the canonical basis by

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad \left(\tilde{T}_{\alpha,s}^+\right)_{n,n+1} := \frac{\theta_{\alpha,s}(n)}{\theta_{\alpha,s}(n+1)}t_n^+, \quad \left(\tilde{T}_{\alpha,s}^+\right)_{n+1,n} := \frac{\theta_{\alpha,s}(n+1)}{\theta_{\alpha,s}(n)}t_n^+,$$

and $\left(\tilde{T}_{\alpha,s}^+\right)_{i,j} = 0$ if $|i-j| \neq 1$. Note that $\tilde{T}_{\alpha,s}^+$ is not symmetric. Using that

$$\frac{\theta_{\alpha,s}(n)}{\theta_{\alpha,s}(n+1)} = \begin{cases} e^{-\alpha} & \text{if } n < s \\ 1 & \text{if } n \geq s, \end{cases}$$

we see that $\tilde{T}_{\alpha,s}^+$ has the matrix form

$$\tilde{T}_{\alpha,s}^+ = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & 0 & t_{s-2}^+e^{-\alpha} & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \ddots & t_{s-2}^+e^{\alpha} & 0 & t_{s-1}^+e^{-\alpha} & 0 & 0 & \dots \\ \ddots & 0 & t_{s-1}^+e^{\alpha} & 0 & t_s^+ & 0 & \ddots \\ \ddots & 0 & 0 & t_s^+ & 0 & t_{s+1}^+ & \ddots \\ \ddots & 0 & 0 & 0 & t_{s+1}^+ & 0 & \ddots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

This operator is constructed to satisfy the following commutation relations (see Section 4.1 for the proof).

Lemma 3.5. *The operator $\tilde{T}_{\alpha,s}^+$ satisfies*

$$\Theta_{\alpha,s}T^+ = \tilde{T}_{\alpha,s}^+\Theta_{\alpha,s} \quad \text{and} \quad T^+\Theta_{\alpha,s} = \Theta_{\alpha,s}\left(\tilde{T}_{\alpha,s}^+\right)^*. \quad (3.16)$$

There is $\alpha^* > 0$ and $C \geq 0$ so that, for all $0 \leq \alpha < \alpha^*$, all $s \in \mathbb{Z}$, and all $z \in \mathcal{C}$, the operators $z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+$ and $z - (\tilde{T}_{\alpha,s}^+)^*$ are invertible, with $\|(z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+)^{-1}\|_{\text{op}} \leq C$ and $\|(z - (\tilde{T}_{\alpha,s}^+)^*)^{-1}\|_{\text{op}} \leq C$. In addition, we have

$$\Theta_{\alpha,s}\frac{1}{z - T^+} = \frac{1}{z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+}\Theta_{\alpha,s}, \quad \text{and} \quad \frac{1}{z - T^+}\Theta_{\alpha,s} = \Theta_{\alpha,s}\frac{1}{z - (\tilde{T}_{\alpha,s}^+)^*}.$$

We multiply (3.11) on the left by $\theta_s(n)$, and on the right by $\theta_s(n+1)$. Using that, for any operator A on $\ell^2(\mathbb{Z})$, we have $\theta_{\alpha,s}(n)A_{n,n+1}\theta_{\alpha,s}(n+1) = (\Theta_{\alpha,s}A\Theta_{\alpha,s})_{n,n+1}$, and the fact that

$$\Theta_{\alpha,s}\frac{1}{z - T^+}U\frac{1}{z - T^+}\Theta_{\alpha,s} = \frac{1}{z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+}\underbrace{\Theta_{\alpha,s}U\Theta_{\alpha,s}}_{=\tilde{U}_{\alpha,s}}\frac{1}{z - (\tilde{T}_{\alpha,s}^+)^*},$$

we obtain an equation of the form

$$\left(\tilde{\mathcal{L}}_{\alpha,s}\tilde{\mathbf{u}}_{\alpha,s}\right)_n = \left(\tilde{\mathbf{Q}}_{\alpha,s,U}(\mathbf{u}, \mathbf{u})\right)_n, \quad (3.17)$$

where $\widetilde{\mathcal{L}}_{\alpha,s}$ is the operator defined on $\ell^2(\mathbb{Z})$ by

$$\forall \tilde{\mathbf{v}} \in \ell^2(\mathbb{Z}), \quad \left(\widetilde{\mathcal{L}}_{\alpha,s} \tilde{\mathbf{v}} \right)_n := \mu(\tilde{v}_{\alpha,s})_n + 4 \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \left(\frac{1}{z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+} \tilde{V} \frac{1}{z - (\tilde{T}_{\alpha,s}^+)^*} \right) dz \right)_{n,n+1}, \quad (3.18)$$

and with the right-hand side given by

$$(\tilde{\mathbf{Q}}_{\alpha,s,U}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2))_n = -4 \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+} (\Theta_{\alpha,s} U_1) \frac{1}{z - (T^+ + U)} (U_2 \Theta_{\alpha,s}) \frac{1}{z - (\tilde{T}_{\alpha,s}^+)^*} dz \right)_{n,n+1}. \quad (3.19)$$

The exponential decay is a consequence of the following Lemmas.

Lemma 3.6. *The operator $\mathcal{L}$ defined in (3.12), seen as an operator from $\ell^2(\mathbb{Z})$ to itself, is bounded symmetric with bounded inverse.*

There is $\alpha_ > 0$ and $C \geq 0$ so that, for all $0 \leq \alpha < \alpha_*$ and all $s \in \mathbb{Z}$, the operator $\widetilde{\mathcal{L}}_{\alpha,s}$ defined in (3.18), seen as an operator from $\ell^2(\mathbb{Z})$ to itself, is bounded with bounded inverse.*

Note that the operator $\widetilde{\mathcal{L}}_{\alpha,s}$ is not symmetric for $\alpha > 0$. We refer to Section 4.2 for the proof. A key property that we use in the proof is the fact that the Hessian $H_{\mathbf{t}^+}$ is coercive (see Proposition 3.13 below). Due to the equality $\langle \mathbf{v}, \mathcal{L} \mathbf{v} \rangle_{\ell^2} = H_{\mathbf{t}^+}(\mathbf{v}, \mathbf{v})$ for $\mathbf{v} \in \ell^2(\mathbb{Z})$ (see (3.13)), this implies that $\mathcal{L}$ is invertible.

In order to control the right-hand side of (3.17), we use the following result (see Section 4.3 for the proof).

Lemma 3.7. *There is $\alpha_* > 0$ and $C \geq 0$ so that, for all $0 \leq \alpha < \alpha_*$ and all $s \in \mathbb{Z}$, we have*

$$\forall \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \in \ell^\infty(\mathbb{Z}) \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+), \quad \left\| \tilde{\mathbf{Q}}_{\alpha,s,U}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) \right\|_{\ell^2(\mathbb{Z})} \leq C \|\theta_{\alpha,s} \mathbf{u}_1\|_{\ell^4} \|\theta_{\alpha,s} \mathbf{u}_2\|_{\ell^4}.$$

We can now prove the exponential decay of $\mathbf{u}$. From (3.17) and the two Lemmas, we get that there is $C \geq 0$ and $\alpha^* > 0$ so that, for all $0 < \alpha \leq \alpha^*$ and all $s \in \mathbb{Z}$, we have

$$\|\tilde{\mathbf{u}}_{\alpha,s}\|_{\ell^2}^2 \leq C \|\theta_{\alpha,s} \mathbf{u}\|_{\ell^4}^4. \quad (3.20)$$

Concerning the left-hand side, we note that $\theta_{\alpha,s}$ is increasing so that $\theta_{\alpha,s}(n)\theta_{\alpha,s}(n+1) \geq \theta_{\alpha,s}^2(n)$. Hence

$$\|\theta_{\alpha,s}^2 \mathbf{u}\|_{\ell^2}^2 \leq \|\tilde{\mathbf{u}}_{\alpha,s}\|_{\ell^2}^2.$$

Let us now bound the right-hand side. We fix $\varepsilon := \frac{1}{2\sqrt{C}}$, where C is the constant appearing in (3.20). Since $\mathbf{u}$ goes to 0 at $+\infty$, there is M large enough so that $|u_n| < \varepsilon$ for all $n \geq M$. This gives

$$\begin{aligned} \|\theta_{\alpha,s} \mathbf{u}\|_{\ell^4}^4 &= \sum_{n \leq M} \theta_{\alpha,s}^4(n) |u_n|^4 + \sum_{n > M} \theta_{\alpha,s}^4(n) |u_n|^4 \leq \|\mathbf{u}\|_{\ell^\infty}^4 \sum_{n \leq M} \theta_{\alpha,s}^4(n) + \varepsilon^2 \sum_{n > M} \theta_{\alpha,s}^4(n) |u_n|^2 \\ &= \|\mathbf{u}\|_{\ell^\infty}^4 \sum_{n \leq M} e^{4\alpha n} + \varepsilon^2 \|\theta_{\alpha,s}^2 \mathbf{u}\|_{\ell^2}^2 = \|\mathbf{u}\|_{\ell^\infty}^4 \frac{e^{4\alpha M}}{1 - e^{-4\alpha}} + \varepsilon^2 \|\theta_{\alpha,s}^2 \mathbf{u}\|_{\ell^2}^2. \end{aligned}$$

Plugging these inequalities in (3.20) gives

$$(1 - C\varepsilon^2) \|\theta_{\alpha,s}^2 \mathbf{u}\|_{\ell^2}^2 \leq \|\mathbf{u}\|_{\ell^\infty}^4 \frac{e^{4\alpha M}}{1 - e^{-4\alpha}}.$$

With our choice of ε , the quantity $1 - C\varepsilon^2 = \frac{1}{2}$ is positive. The right-hand side is a bound independent of $s \in \mathbb{Z}$. We can take the limit $s \rightarrow \infty$, and conclude that

$$(e^{2\alpha n} u_n)_{n \in \mathbb{Z}} \in \ell^2(\mathbb{Z}), \quad \text{with} \quad \left\| (e^{2\alpha n} u_n)_{n \in \mathbb{Z}} \right\|_{\ell^2(\mathbb{Z})} \leq 2 \|\mathbf{u}\|_{\ell^\infty}^4 \frac{e^{4\alpha M}}{1 - e^{-4\alpha}}.$$

This proves as wanted that the sequence $\mathbf{u}$ is exponentially decaying at $+\infty$.

3 Smoothness and Taylor expansion of the map $\mathcal{F}_t$

In this section, we prove Lemma 3.1, which states that $\mathbf{h} \mapsto (T + H)_-$ is smooth locally around $\mathbf{0}$, whenever T is a homoclinic or heteroclinic configurations.

We first record a useful Lemma that we will use many times throughout the article. In what follows, we denote by $\mathcal{B} := \mathcal{B}(\ell^2(\mathbb{Z}))$ the set of bounded operators acting in $\ell^2(\mathbb{Z})$, and by $\mathfrak{S}_p := \mathfrak{S}_p(\ell^2(\mathbb{Z}))$ the p -Schatten class: $A \in \mathfrak{S}_p$ iff A is a compact operator with $\|A\|_{\mathfrak{S}_p} := \text{Tr}(|A|^p)^{1/p} < +\infty$. The set $\mathfrak{S}_\infty$ is simply the set of compact operators, with $\|A\|_{\mathfrak{S}_\infty} = \|A\|_{\text{op}}$.

Lemma 3.8. *Let $\mathbf{a}$ be a sequence from $\mathbb{Z}$ to $\mathbb{R}$, and let A be the corresponding operator.*

- *If $\mathbf{a} \in \ell^\infty$, then A is a bounded operator ($A \in \mathcal{B}$), and $\|A\|_{\text{op}} \leq 2\|\mathbf{a}\|_{\ell^\infty}$;*
- *If $\mathbf{a}$ goes to 0 at $\pm\infty$, then A is compact ($A \in \mathfrak{S}_\infty$) ;*
- *If $\mathbf{a} \in \ell^p(\mathbb{Z})$ for some $1 \leq p < \infty$, then A is in the Schatten class $\mathfrak{S}_p$, and*

$$\|A\|_{\mathfrak{S}_p} \leq 2\|\mathbf{a}\|_{\ell^p}.$$

Proof. For the first part, we note that, for all $\psi \in \ell^2(\mathbb{Z})$, we have

$$|\langle \psi, A\psi \rangle_{\ell^2}| = \left| \sum_{n \in \mathbb{Z}} a_n (\overline{\psi_n} \psi_{n+1} + \overline{\psi_{n+1}} \psi_n) \right| \leq \|\mathbf{a}\|_{\ell^\infty} \sum_{n \in \mathbb{Z}} (|\psi_n|^2 + |\psi_{n+1}|^2) = 2\|\mathbf{a}\|_{\ell^\infty} \|\psi\|_{\ell^2}^2,$$

where we used that $\overline{a}b + a\overline{b} \leq |a|^2 + |b|^2$ in the middle inequality.

For the second part, we note that the operator A is the limit, for the operator norm, of the finite-rank operators A^N associated with the truncated configurations $a^N := (\mathbf{1}_{-N \leq n \leq N} a_n)_{n \in \mathbb{Z}}$. Hence A is compact.

For the last part, we first prove the result for $p = 1$. We have, by duality,

$$\begin{aligned} \|A\|_{\mathfrak{S}_1} &= \sup_{\substack{K \in \mathcal{B} \\ \|K\|_{\text{op}}=1}} |\text{Tr}(AK)| = \sup_{\substack{K \in \mathcal{B} \\ \|K\|_{\text{op}}=1}} \left| \sum_{n \in \mathbb{Z}} a_n (K_{n+1,n} + K_{n,n+1}) \right| \\ &\leq \|\mathbf{a}\|_{\ell^1} \sup_{\substack{K \in \mathcal{B} \\ \|K\|_{\text{op}}=1}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} (|K_{n+1,n}| + |K_{n,n+1}|) \leq 2\|\mathbf{a}\|_{\ell^1}. \end{aligned}$$

We used in the last line that $|K_{n,n+1}| = |\langle e_n, K e_{n+1} \rangle| \leq \|K\|_{\text{op}}$. Finally, to conclude the proof, we proceed by interpolation using Riesz-Thorin interpolation theorem for Schatten spaces (see [Sim05, Remark 1 p.23] and [RS77, p.115] for the version with $\mathcal{B}$ instead of $\mathfrak{S}_\infty$). $\square$

3.1 The spectrum of homoclinic and heteroclinic configurations

In order to prove that $\mathcal{F}_t$ is smooth, we first study the spectrum of the operator T when $\mathbf{t}$ is such a configuration. We treat the two cases separately.

Homoclinic configurations

Let $\{\mathbf{t}\}$ be a homoclinic configuration with $\mathbf{t} \geq \tau$ for some $\tau > 0$. Then, we can write $\mathbf{t} = \mathbf{t}^+ + \mathbf{u}$, where we recall that $\mathbf{t}^+$ is the dimerized configuration $t_n^+ = W + (-1)^n \delta$ with $\delta > 0$, and where the sequence $\mathbf{u}$ goes to 0 at $\pm\infty$.

We have $T = T^+ + U$. The operator T^+ has purely essential spectrum, of the form (see for instance [GKS23] and references therein)

$$\sigma(T^+) = \sigma_{\text{ess}}(T^+) = [-2W, -2\delta] \cup [2\delta, 2W].$$

Indeed, for a finite $L = 2N$, we have $(T_{2N}^+)^2 = \langle (T_{2N}^+)^2 \rangle = 2(W^2 + \delta^2)\mathbb{1}_{2N} + (W^2 - \delta^2)\Omega$, with $\Omega_{i,i+2} = \Omega_{i+2,i} = 1$, and $\Omega_{i,j} = 0$ if $|i - j| \neq 2$. The spectrum of Ω is given by

$$\sigma(\Omega) = \left\{ 2 \cos \left(2 \frac{k\pi}{N} \right), \quad k \in \llbracket 1, N \rrbracket \right\}.$$

This yields

$$\sigma(T_{2N}^+) = \left\{ \pm 2 \sqrt{W^2 \cos^2 \left(\frac{k\pi}{N} \right) + \delta^2 \sin^2 \left(\frac{k\pi}{N} \right)}, \quad k \in \llbracket 1, N \rrbracket \right\},$$

from which we deduce $\sigma(T^+)$.

In particular, T^+ has a spectral gap of size 4δ around 0. On the other hand, since $\mathbf{u}$ goes to 0 at $\pm\infty$, U is compact, see Lemma 3.8. We thus deduce from Weyl's theorem that

$$\sigma_{\text{ess}}(T) = \sigma_{\text{ess}}(T^+) = [-2W, -2\delta] \cup [2\delta, 2W]. \quad (3.21)$$

In particular, $0 \notin \sigma_{\text{ess}}(T)$. In addition, we claim that 0 is not an eigenvalue of T . More specifically, we have the following.

Lemma 3.9. *Let $\{\mathbf{t}\}$ be any configuration with $\mathbf{t} \geq \tau$ for some $\tau > 0$ (in particular, all coefficients t_n are non null). Assume there is $N_0 \in \mathbb{N}$ and $0 < \kappa < 1$ so that*

$$(\textbf{Homoclinic case}) \quad \forall |n| \geq N_0, \quad \left| \frac{t_{2n+1}}{t_{2n}} \right| \leq \kappa.$$

Then 0 is not an eigenvalue of T . Conversely, if

$$(\textbf{Heteroclinic case}) \quad \forall n \geq N_0, \quad \left| \frac{t_{2n+1}}{t_{2n}} \right| \leq \kappa \quad \text{and} \quad \left| \frac{t_{-2n}}{t_{-2n-1}} \right| \leq \kappa,$$

then 0 is an eigenvalue of T of multiplicity 1.

For a homoclinic (resp. heteroclinic) configurations, the first (resp. second) condition is satisfied with $\kappa = \frac{W-\delta}{W+\delta} < 1$.

Proof. The eigenvalue equation $T\psi = 0$ reads

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad t_n \psi_n + t_{n+1} \psi_{n+2} = 0.$$

We obtain directly

$$\psi_{2n} = (-1)^n \prod_{m=1}^n \left(\frac{t_{2m-2}}{t_{2m-1}} \right) \psi_0, \quad \psi_{2n+1} = (-1)^n \prod_{m=1}^n \left(\frac{t_{2m-1}}{t_{2m}} \right) \psi_1.$$

The vector space $\{\psi, T\psi = 0\}$ is therefore 2 dimensional, since $\psi \in \{T\psi = 0\}$ can be recovered from its values ψ_0 and ψ_1 , and we have $\text{Ker}(T) = \{T\psi = 0\} \cap \ell^2(\mathbb{Z})$.

Let us first consider the homoclinic case, and let $\psi \in \{T\psi = 0\}$. Since $|t_{2n}/t_{2n+1}| \geq \kappa^{-1} > 1$ for $n \geq N_0$, we have $|\psi_{2N_0+2k}| \geq |\psi_{2N_0}| \kappa^{-k}$ as $k \rightarrow \infty$, so ψ cannot be square integrable at $+\infty$, unless $\psi_{2N_0} = 0$, which is equivalent to $\psi_0 = 0$. Similarly, we have $|\psi_{-2N_0-2k+1}| \geq |\psi_{-2N_0+1}| \kappa^{-k}$ as $k \rightarrow \infty$, so ψ cannot be square integrable at $-\infty$, unless $\psi_{-2N_0+1} = 0$, which gives $\psi_1 = 0$ as well. So $\text{Ker}(T) = \{0\}$.

In the heteroclinic case, the same reasoning shows that we must have $\psi_0 = 0$. However, given $\psi_1 \in \mathbb{R}$, the function ψ with $\psi_{2n+1} = (-1)^n \prod_{m=1}^n \left(\frac{t_{2m-1}}{t_{2m}} \right) \psi_1$ and $\psi_{2n} = 0$ is a square integrable non null eigenvector. In this case, $\dim \text{Ker}(T) = 1$. $\square$

Remark 3.10. *In the heteroclinic case, the corresponding normalized eigenvector ψ is sometimes called an edge state, or interface state or zero mode. As shown in the proof, it is exponentially decaying at $\pm\infty$: there is $C \geq 0$ and $\beta := -\log(\kappa) > 0$ so that $|\psi_n| \leq Ce^{-\beta|n|}$. It is always exponentially decaying, even though the sequence $\mathbf{t}$ may converge to $\mathbf{t}^\pm$ very slowly at $\pm\infty$. Actually, we do not require $\mathbf{t}$ to be a critical point here.*

Note that it is only supported on the odd integers: $\psi_{2n} = 0$ for all $n \in \mathbb{Z}$. In particular, the corresponding projector $Z := |\psi\rangle\langle\psi|$ satisfies

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad Z_{n,n+1} = Z_{n+1,n} = 0.$$

Let us return to the homoclinic case. We proved that $0 \notin \sigma(T)$. Let $g := \text{dist}(0, \sigma(T))$ be the distance between 0 and the spectrum of T , and set $\eta := g/8$. Let $\mathbf{h}$ be any perturbation with $\|\mathbf{h}\|_\infty \leq \eta$. Then $\|H\|_{\text{op}} \leq 2\eta$ by Lemma 3.8. In particular, the spectrum of $T + H$ is 2η -close to the one of T , hence $\sigma(T + H) \cap [-g/2, g/2] = \emptyset$.

Let us consider the positively oriented contour $\mathcal{C}$ in (3.8). We deduce first that $(z - (T + H))$ is invertible for all $z \in \mathcal{C}$, and with $\|(z - (T + H))^{-1}\|_{\text{op}} \leq C$ for a constant C independent of $z \in \mathcal{C}$. Also, from the Cauchy residual formula, we have

$$\mathbf{1}(T + H < 0) = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{dz}{z - (T + H)},$$

and

$$(T + H)_- = -(T + H)\mathbf{1}(T + H < 0) = \frac{-1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{z}{z - (T + H)} dz.$$

Heteroclinic configurations

Now, let $\{\mathbf{t}\}$ be a heteroclinic configuration with $\mathbf{t} \geq \tau$ for some $\tau > 0$. First, we claim that $0 \notin \sigma_{\text{ess}}(T)$.

Lemma 3.11. *Let $\mathbf{t}$ be a heteroclinic configuration. Then*

$$\sigma_{\text{ess}}(T) = [-2W, -2\delta] \cup [2\delta, 2W].$$

In particular, $0 \notin \sigma_{\text{ess}}(T)$.

Proof. Introduce the sequence $\tilde{\mathbf{t}}$ with $\tilde{t}_n = t_n$ if $n \neq 0$, and $\tilde{t}_0 = 0$. We denote by $\tilde{T}$ the corresponding operator, and set $K := T - \tilde{T}$. In a matrix format, the decomposition $T = \tilde{T} + K$ reads

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & 0 & t_{-1} & t_0 & 0 & 0 \\ 0 & t_{-1} & 0 & 0 & t_1 & 0 \\ \hline & 0 & t_0 & 0 & 0 & 0 \\ & & 0 & t_1 & 0 & \ddots \\ & & & 0 & \ddots & \ddots \end{array} \right) = \left(\begin{array}{ccc|ccc} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & 0 & t_{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_{-1} & 0 & 0 & t_1 & 0 \\ \hline & 0 & 0 & 0 & t_1 & 0 \\ & & 0 & t_1 & 0 & \ddots \\ & & & 0 & \ddots & \ddots \end{array} \right) + \left(\begin{array}{ccc|ccc} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & 0 & 0 & t_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_0 & 0 & 0 \\ \hline & 0 & t_0 & 0 & 0 & 0 \\ & & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ & & & 0 & \ddots & \ddots \end{array} \right)$$

The operator K is of rank 2, hence is compact, so $\sigma_{\text{ess}}(T) = \sigma_{\text{ess}}(\tilde{T})$ by Weyl's theorem. In addition, the operator $\tilde{T}$ is of the form $\tilde{T} = \tilde{T}_L \oplus \tilde{T}_R$ acting on $\ell^2(\mathbb{Z}) \sim \ell^2(\mathbb{Z}^-) \oplus \ell^2(\mathbb{Z}^+)$, hence

$$\sigma_{\text{ess}}(\tilde{T}) = \sigma_{\text{ess}}(\tilde{T}_L) \cup \sigma_{\text{ess}}(\tilde{T}_R).$$

Let us first focus on the right operator $\tilde{T}_R$. The hopping amplitudes $\tilde{t}_n$ for $n \geq 1$ are of the form $\tilde{t}_n = t_n^+ + u_n$ with $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = 0$. So, with obvious notation, $\tilde{T}_R = \tilde{T}_R^+ + U_R$. The sequence

(u_n) goes to zero, so U_R is a compact operator (the proof is similar than for Lemma (3.8)), and $\sigma_{\text{ess}}(T_R) = \sigma_{\text{ess}}(\tilde{T}_R^+)$. Finally, reasoning as before and introducing the cut compact operator $K^+ := T^+ - \tilde{T}^+$, we have

$$\sigma(T^+) = \sigma_{\text{ess}}(T^+) = \sigma_{\text{ess}}(\tilde{T}_L^+) \cup \sigma_{\text{ess}}(\tilde{T}_R^+).$$

In addition, since $t_{-n}^+ = t_n^+$ for the dimerized configuration $\mathbf{t}^+$, $\tilde{T}_L^+$ is unitary equivalent to $\tilde{T}_R^+$, and in particular

$$\sigma_{\text{ess}}(\tilde{T}_R^+) = \sigma_{\text{ess}}(\tilde{T}_L^+) = [-2W, -2\delta] \cup [2\delta, 2W].$$

Altogether, we proved that $\sigma_{\text{ess}}(\tilde{T}_R) = [-2W, -2\delta] \cup [2\delta, 2W]$. The proof for the left part is similar, upon replacing T^+ by T^- . $\square$

In addition, using Lemma 3.9, we know that 0 is an eigenvalue of T of multiplicity 1. So 0 is an isolated eigenvalue, and we set

$$g := \text{dist}(0, \sigma(T) \setminus \{0\}) > 0, \quad \text{and} \quad \eta := \min \left\{ \frac{g}{8}, \frac{\tau}{2}, \frac{\delta}{2} \right\} > 0.$$

By standard perturbation theory, for all $\mathbf{h}$ with $\|\mathbf{h}\|_{\ell^\infty} \leq \eta$ (hence $\|H\|_{\text{op}} \leq 2\eta$ by Lemma 3.8), the spectrum of $T + H$ is composed of an isolated eigenvalue $\lambda_0(T + H)$ of multiplicity 1, with $|\lambda_0(T + H)| \leq 2\eta \leq g/4$ corresponding to the perturbation of the 0 eigenvalue of T , and the rest of the spectrum, at distance at least $g - 2\eta > 3g/4$ from 0.

Since $\|\mathbf{h}\|_{\ell^\infty} < \tau/2$ and $\|\mathbf{h}\|_{\ell^\infty} < \delta/2$, the vector $\mathbf{t} + \mathbf{h}$ satisfies $\mathbf{t} + \mathbf{h} \geq \tau/2 > 0$ and $(t_n + h_n) \in (t_n - \delta/2, t_n + \delta/2)$. In particular, it satisfies the assumption of Lemma 3.9 (heteroclinic case) with $\kappa = \frac{W - \delta/2}{W + \delta/2} < 1$. So $\lambda_0(T + H) = 0$: the eigenvalue 0 is unperturbed by the addition of H .

We consider the positively oriented contour $\mathcal{C}$ defined in (3.8). We deduce from the previous discussion that, for all $\mathbf{h}$ with $\|\mathbf{h}\|_{\ell^\infty} \leq \eta$, we have

$$(T + H)_- = -(T + H)\mathbf{1}(T + H < 0) = \frac{-1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{z}{z - (T + H)} dz,$$

where all operators appearing are uniformly bounded by some constant $C \geq 0$ independent of $z \in \mathcal{C}$. We also remark that we have

$$\mathbf{1}(T + H < 0) = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{dz}{z - (T + H)}, \quad \text{and} \quad \mathbf{1}(T + H \leq 0) = \mathbf{1}(T + H < 0) + Z,$$

where $Z = |\psi\rangle\langle\psi|$ is the rank-1 projector onto the normalized zero-mode $\psi \in \text{Ker}(T + H)$, see Remark 3.10.

3.2 Taylor expansion of the map $\mathcal{F}_t$

In this section, we study the energy $\mathcal{F}_t$ in (3.7), and prove Lemma 3.2. Recall that $\mathcal{F}_t$ is defined by

$$\mathcal{F}_t(\mathbf{h}) := \frac{\mu}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} (h_n + 2t_n - 2)h_n - 2\text{Tr}((T + H)_- - T_-).$$

In what follows, $\mathbf{t}$ is a homoclinic or heteroclinic configuration with $\mathbf{t} \geq \tau$ for some $\tau > 0$. We introduce the constant $\eta > 0$ and the contour $\mathcal{C}$ as in the previous section.

First, we claim that for all $\mathbf{h}$ with $\|\mathbf{h}\|_{\ell^1} \leq \eta$ (we now use the ℓ^1 norm), the map $\mathcal{F}_t(\mathbf{h})$ is well-defined and finite. Since $\|\mathbf{h}\|_{\ell^\infty} \leq \|\mathbf{h}\|_{\ell^1} \leq \eta$, $\mathbf{h}$ satisfies the conditions of the previous

section. For the first part of the energy, we write that

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} h_n^2 = \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^2 \leq \|\mathbf{h}\|_{\ell^1}^2, \quad \text{and} \quad \left| \sum_{n \in \mathbb{Z}} (2t_n - 2)h_n \right| \leq (2\|\mathbf{t}\|_{\ell^\infty} + 2) \|\mathbf{h}\|_{\ell^1},$$

so the first part is continuous from ℓ^1 to $\mathbb{R}$. For the second part, we use the Cauchy residual formula, and get that

$$(T + H)_- - T_- = \frac{-1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \left(\frac{z}{z - (T + H)} - \frac{z}{z - T} \right) dz = \frac{-1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \left(\frac{1}{z - (T + H)} H \frac{1}{z - T} \right) z dz,$$

where we used the resolvent formula in the last equality. In particular, for all $\mathbf{h} \in \ell^1$ with $\|\mathbf{h}\|_{\ell^1} \leq \eta$ and all $z \in \mathcal{C}$, we have, using Lemma 3.8,

$$\left\| \frac{1}{z - (T + H)} H \frac{1}{z - T} \right\|_{\mathfrak{S}_1} \leq \left\| \frac{1}{z - (T + H)} \right\|_{\text{op}} \|H\|_{\mathfrak{S}_1} \left\| \frac{1}{z - T} \right\|_{\text{op}} \leq 2C^2 \|\mathbf{h}\|_{\ell^1}. \quad (3.22)$$

Integrating z in the compact $\mathcal{C}$ eventually shows that $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}(\mathbf{h})$ is well-defined and continuous around $\mathbf{0}$ for the ℓ^1 norm.

We can push the resolvent formula, and write that

$$\frac{1}{z - (T + H)} - \frac{1}{z - T} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{z - T} \left(H \frac{1}{z - T} \right)^n,$$

where the sum on the right is absolutely convergent in $\mathcal{B}$ whenever

$$\sup_{z \in \mathcal{C}} \left\| \frac{1}{z - T} H \right\|_{\text{op}} < 1,$$

which happens whenever $\|\mathbf{h}\|_{\ell^\infty}$ is small enough, according to Lemma 3.8. Actually, it is also absolutely convergent in $\mathfrak{S}_1$ whenever $\|\mathbf{h}\|_{\ell^1}$ is small enough. We deduce directly that $\mathbf{h} \mapsto \mathcal{F}_{\mathbf{t}}(\mathbf{h})$ is analytic on a ℓ^1 neighborhood of $\mathbf{0}$.

Let us compute the differential and hessian of this map. We write

$$\mathcal{F}_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}) = L_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}) + \frac{1}{2} H_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}, \mathbf{h}) + R_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}),$$

with the linear form (differential) $L_{\mathbf{t}}$ on $\ell^1(\mathbb{Z})$, defined by

$$L_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}) := \mu \sum_{n \in \mathbb{Z}} (t_n - 2)h_n + 2\text{Tr} \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{z - T} H \frac{1}{z - T} z dz \right),$$

the bilinear form (hessian) $H_{\mathbf{t}}$ on $\ell^1(\mathbb{Z}) \times \ell^1(\mathbb{Z})$, defined by

$$H_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}, \mathbf{k}) := \mu \sum_{n \in \mathbb{Z}} h_n k_n + 4\text{Tr} \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{z - T} H \frac{1}{z - T} K \frac{1}{z - T} z dz \right),$$

and the rest

$$R_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}) := 2\text{Tr} \left(-\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \left[\frac{1}{z - T} H \right]^3 \frac{1}{z - (T + H)} z dz \right).$$

Reasoning as in (3.22), we see that $|R_{\mathbf{t}}(\mathbf{h})| \leq C \|\mathbf{h}\|_{\ell^3}^3 \leq C \|\mathbf{h}\|_{\ell^1}^3$. Similarly, we have

$$|H_{\mathbf{t}}(\mathbf{h}, \mathbf{k})| \leq C \|H\|_{\mathfrak{S}_2} \|K\|_{\mathfrak{S}_2} \leq C' \|\mathbf{h}\|_{\ell^2} \|\mathbf{k}\|_{\ell^2},$$

so the $H_{\mathbf{t}}$ bilinear form can be extended continuously on $\ell^2(\mathbb{Z})$.

To end the proof of Lemma 3.2, it remains to simplify the expressions of L_t and H_t . We use the following result.

Lemma 3.12. *We have*

$$\mathrm{Tr} \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{z-T} H \frac{1}{z-T} z dz \right) = \mathrm{Tr} \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{z-T} H dz \right) = \mathrm{Tr}(\Gamma_t H) \quad (3.23)$$

and

$$4\mathrm{Tr} \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{z-T} H \frac{1}{z-T} K \frac{1}{z-T} z dz \right) = 2\mathrm{Tr} \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{z-T} H \frac{1}{z-T} K dz \right). \quad (3.24)$$

Proof. First, writing that $z = (z - T) + T$, we get

$$\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{z dz}{(z-T)^2} = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{dz}{z-T} + \frac{T}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{dz}{(z-T)^2},$$

and the second term vanishes by the Cauchy residual formula. We recognize the spectral projector

$$\Gamma_t := \mathbf{1}(T < 0) = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{dz}{z-T},$$

in the first term. This and the cyclicity of the trace gives (3.23). We now differentiate this equality with respect to T , in the direction K . We get

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \mathrm{Tr} \left(\frac{1}{z-T} K \frac{1}{z-T} H \frac{1}{z-T} + \frac{1}{z-T} H \frac{1}{z-T} K \frac{1}{z-T} \right) z dz \\ &= \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \mathrm{Tr} \left(\frac{1}{z-T} K \frac{1}{z-T} H \right) dz. \end{aligned}$$

Using again the cyclicity of the trace gives (3.24). $\square$

4 Proofs of the Lemmas

In this section, we provide the proofs of the Lemmas appearing in Section 2.4.

4.1 Proof of Lemma 3.5

We first prove Lemma 3.5, which compares T and $\tilde{T}_{\alpha,s}^+$. The fact that $\Theta_{\alpha,s} T^+ = \tilde{T}_{\alpha,s}^+ \Theta_{\alpha,s}$ is a simple computation. Taking the adjoint gives the second equality of (3.16).

Let us now prove that $(z - \tilde{T}_{\alpha,s})$ is invertible for α small enough. The operator $T - T_{\alpha,s}^+$ satisfies

$$(T - T_{\alpha,s}^+)_{n,n+1} = \begin{cases} t_n^+(1 - e^{-\alpha}) & \text{if } n < s \\ 0 & \text{if } n \geq s \end{cases}, \quad (T - T_{\alpha,s}^+)_{n+1,n} = \begin{cases} t_n^+(1 - e^{\alpha}) & \text{if } n < s \\ 0 & \text{if } n \geq s \end{cases},$$

and $(T - T_{\alpha,s}^+)_{i,j} = 0$ if $|i - j| \neq 1$. Reasoning as in Lemma 3.8, we deduce that

$$\|T - T_{\alpha,s}^+\|_{\mathrm{op}} \leq 2 \max_{n \in \mathbb{Z}} |t_n^+| \cdot \max\{|1 - e^{-\alpha}|, |1 - e^{\alpha}|\} = 2(W + \delta)(e^{\alpha} - 1). \quad (3.25)$$

This bound is independent of $s \in \mathbb{Z}$, and goes to 0 as $\alpha \rightarrow 0$. Since $(z - T^+)$ is invertible for all $z \in \mathcal{C}$, we deduce that for α small enough, $(z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+)$ is invertible with bounded inverse, and satisfies $\|(z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+)^{-1}\| \leq C$ for a constant C independent of $z \in \mathcal{C}$.

Finally, from the equality $\Theta_{\alpha,s}T^+ = \tilde{T}_{\alpha,s}^+\Theta_{\alpha,s}$, we get $\Theta_{\alpha,s}(z - T^+) = (z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+)\Theta_{\alpha,s}$, which gives, as wanted

$$\Theta_{\alpha,s}\frac{1}{z - T^+} = \frac{1}{z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+}\Theta_{\alpha,s}, \quad \text{and} \quad \frac{1}{z - T^+}\Theta_{\alpha,s} = \Theta_{\alpha,s}\frac{1}{z - (\tilde{T}_{\alpha,s}^+)^*}.$$

4.2 Proof of Lemma 3.6

We now prove Lemma 3.6. The first and most important step is to prove the following Proposition, whose proof is postponed to Section 4.4

Proposition 3.13. *For the dimerized configuration $\mathbf{t}^+$, the hessian $H_{\mathbf{t}^+}$ is bounded on $\ell^2(\mathbb{Z}) \times \ell^2(\mathbb{Z})$ and coercive.*

Using this result, we can prove that $\mathcal{L}$ is a symmetric bounded invertible operator. Recall that $\mathcal{L}$ is defined in (3.12) by

$$(\mathcal{L}\mathbf{u})_n = \mu u_n + 4 \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \left(\frac{1}{z - T^+} U \frac{1}{z - T^+} \right) dz \right)_{n,n+1}.$$

As we already noticed in (3.13), we have

$$\langle \mathbf{v}, \mathcal{L}\mathbf{w} \rangle_{\ell^2} = \langle \mathcal{L}\mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle_{\ell^2} = H_{\mathbf{t}^+}(\mathbf{v}, \mathbf{w}).$$

This equality is first valid for $\mathbf{v}, \mathbf{w}$ compactly supported, but can be extended for $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \ell^2(\mathbb{Z})$ by continuity of $H_{\mathbf{t}^+}$. This already proves that $\mathcal{L}$ is a symmetric bounded operator on $\ell^2(\mathbb{Z})$. In addition, the coercivity of $H_{\mathbf{t}^+}$ shows that $\mathcal{L}$ is invertible with bounded inverse (Lax-Milgram theorem).

We now focus on the map $\tilde{\mathcal{L}}_{\alpha,s}$ defined in (3.18). We claim that $\|\tilde{\mathcal{L}}_{\alpha,s} - \mathcal{L}\|_{\text{op}}$ goes to 0 as $\alpha \rightarrow 0$. This will eventually prove that $\tilde{\mathcal{L}}_{\alpha,s}$ is also invertible with bounded inverse.

We have, for $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \ell^2(\mathbb{Z})$,

$$\langle \mathbf{v}, (\mathcal{L} - \tilde{\mathcal{L}}_{\alpha,s})\mathbf{u} \rangle_{\ell^2} = 2\text{Tr} \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \left[\frac{1}{z - T^+} U \frac{1}{z - T^+} V - \frac{1}{z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+} U \frac{1}{z - (\tilde{T}_{\alpha,s}^+)^*} V \right] dz \right).$$

We have

$$\begin{aligned} & \frac{1}{z - T^+} U \frac{1}{z - T^+} - \frac{1}{z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+} U \frac{1}{z - (\tilde{T}_{\alpha,s}^+)^*} = \\ &= \left(\frac{1}{z - T^+} - \frac{1}{z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+} \right) U \frac{1}{z - T^+} + \frac{1}{z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+} U \left(\frac{1}{z - T^+} - \frac{1}{z - (\tilde{T}_{\alpha,s}^+)^*} \right) \\ &= \frac{1}{z - T^+} (\tilde{T}_{\alpha,s}^+ - T^+) \frac{1}{z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+} U \frac{1}{z - T^+} + \frac{1}{z - \tilde{T}_{\alpha,s}^+} U \frac{1}{z - T^+} ((\tilde{T}_{\alpha,s}^+)^* - T^+) \frac{1}{z - (\tilde{T}_{\alpha,s}^+)^*}. \end{aligned}$$

We then use estimates of the form (R stands for resolvent)

$$\text{Tr}(R_1(T - \tilde{T})R_2UR_3V) \leq \|R_1(T - \tilde{T})R_2UR_3V\|_{\mathfrak{S}^1} \leq \|R_1\|_{\text{op}}\|R_2\|_{\text{op}}\|R_3\|_{\text{op}}\|T - \tilde{T}\|_{\text{op}}\|U\|_{\mathfrak{S}^2}\|V\|_{\mathfrak{S}^2}.$$

We deduce that there is $C \geq 0$ so that, for α small enough,

$$\left| \langle \mathbf{v}, (\mathcal{L} - \tilde{\mathcal{L}}_{\alpha,s})\mathbf{u} \rangle_{\ell^2} \right| \leq C \|\tilde{T}_{\alpha,s}^+ - T^+\|_{\text{op}} \|U\|_{\mathfrak{S}^2} \|V\|_{\mathfrak{S}^2} \leq 2C \|\tilde{T}_{\alpha,s}^+ - T^+\|_{\text{op}} \|\mathbf{u}\|_{\ell^2} \|\mathbf{v}\|_{\ell^2},$$

where we used Lemma 3.8 in the last inequality. We proved in Lemma 3.25 that $\|\tilde{T}_{\alpha,s}^+ - T^+\|_{\text{op}} \rightarrow 0$ as $\alpha \rightarrow 0$. Together with the fact that $\mathcal{L}$ is invertible, we deduce that for there is $\alpha^* > 0$

and $C \geq 0$ so that, for all $0 \leq \alpha < \alpha^*$ and all $s \in \mathbb{Z}$, the operator $\widetilde{\mathcal{L}}_{\alpha,s}$ is invertible with $\|(\widetilde{\mathcal{L}}_{\alpha,s})^{-1}\|_{\text{op}} \leq C$. This concludes the proof of Lemma 3.6

4.3 Proof of Lemma 3.7

Finally, we focus on the map $\widetilde{Q}_{\alpha,s,U}$ defined in (3.19). First, using that $\sum_n (A)_{n,n+1}^2 \leq \|A\|_{\mathfrak{S}^2}^2$ and estimates of the form

$$\|R_1(\Theta V)R_2(W\Theta)R_3\|_{\mathfrak{S}^2} \leq \|R_1\|_{\text{op}}\|R_2\|_{\text{op}}\|R_3\|_{\text{op}}\|\Theta V\|_{\mathfrak{S}^4}\|W\Theta\|_{\mathfrak{S}^4},$$

we get

$$\left\|\widetilde{Q}_{\alpha,s,U}(\mathbf{v}, \mathbf{w})\right\|_{\ell^2(\mathbb{Z})}^2 \leq C\|\Theta_{\alpha,s}V\|_{\mathfrak{S}^4}\|W\Theta_{\alpha,s}\|_{\mathfrak{S}^4}.$$

It remains to bound $\|\Theta_{\alpha,s}U\|_{\mathfrak{S}^4}$ by $\|\theta_{\alpha,s}\mathbf{u}\|_{\ell^4}$. To do so, we follow the steps of Lemma 3.8, and prove that for all $1 \leq p < \infty$ and all $\mathbf{u} \in \ell^p(\mathbb{Z})$, we have $\Theta_{\alpha,s}U$ in $\mathfrak{S}_p$ (in $\mathcal{B}$ if $p = \infty$), and

$$\|\Theta_{\alpha,s}U\|_{\mathfrak{S}_p} \leq C_p\|\theta_{\alpha,s}\mathbf{u}\|_{\ell^p} \quad (3.26)$$

for a constant C_p independent of $\mathbf{u}$ (and $\|\Theta_{\alpha,s}U\|_{\text{op}} \leq C_\infty\|\theta_{\alpha,s}\mathbf{u}\|_{\ell^\infty}$ for $p = \infty$). We use below the fact that

$$\theta_{\alpha,s}(n) \leq \theta_{\alpha,s}(n+1) \leq e^\alpha \theta_{\alpha,s}(n). \quad (3.27)$$

First, for $p = \infty$, we have, for $\psi \in \ell^2(\mathbb{Z})$,

$$\begin{aligned} \|\Theta_{\alpha,s}U\psi\|_{\ell^2}^2 &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \theta_{\alpha,s}^2(n) |u_{n-1}\psi_{n-1} + u_n\psi_{n+1}|^2 \leq 2 \sum_{n \in \mathbb{Z}} \theta_{\alpha,s}^2(n) |u_{n-1}|^2 |\psi_{n-1}|^2 + \theta_{\alpha,s}^2(n) |u_n|^2 |\psi_{n+1}|^2 \\ &\leq 2e^{2\alpha} \|\theta_{\alpha,s}\mathbf{u}\|_{\ell^\infty}^2 \|\psi\|_{\ell^2}^2 + 2\|\theta_{\alpha,s}\mathbf{u}\|_{\ell^\infty}^2 \|\psi\|_{\ell^2}^2. \end{aligned}$$

We used that $|a+b|^2 \leq 2|a|^2 + 2|b|^2$ for the first inequality, and (3.27) for the second. This proves the bound

$$\|\Theta_{\alpha,s}U\|_{\text{op}}^2 \leq (2e^\alpha + 2) \|\theta_{\alpha,s}\mathbf{u}\|_{\ell^\infty}^2.$$

In the case $p = 1$, we have by duality

$$\begin{aligned} \|\Theta_{\alpha,s}U\|_{\mathfrak{S}_1} &= \sup_{\substack{K \in \mathcal{B} \\ \|K\|_{\text{op}}=1}} |\text{Tr}(\Theta_{\alpha,s}UK)| = \sup_{\substack{K \in \mathcal{B} \\ \|K\|_{\text{op}}=1}} \left| \sum_{n \in \mathbb{Z}} u_n \theta_{\alpha,s}(n) K_{n+1,n} + u_n \theta_{\alpha,s}(n+1) K_{n,n+1} \right| \\ &\leq \sum_{n \in \mathbb{Z}} |u_n \theta_{\alpha,s}(n)| + \sum_{n \in \mathbb{Z}} |u_n \theta_{\alpha,s}(n+1)| \leq \|\theta_{\alpha,s}\mathbf{u}\|_{\ell^1} + e^\alpha \|\theta_{\alpha,s}\mathbf{u}\|_{\ell^1}. \end{aligned}$$

Here, we used that both $|K_{n,n+1}|$ and $|K_{n+1,n}|$ are smaller than 1, and (3.27) for the last inequality.

We conclude that (3.26) holds for all $1 \leq p \leq \infty$ using Riesz-Thorin interpolation.

4.4 Coercivity of the Hessian at the dimerized configuration

In this section, we prove Proposition 3.13. Recall that

$$H_{\mathbf{t}^+}(\mathbf{h}, \mathbf{h}) = \mu \|\mathbf{h}\|^2 + 2\text{Tr} \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{z - T^+} H \frac{1}{z - T^+} H dz \right)$$

We already proved that $H_{\mathbf{t}^+}$ is a bounded quadratic form on $\ell^2(\mathbb{Z})$. We now prove that, for the dimerized configuration $\mathbf{t}^+$, the Hessian $H_{\mathbf{t}^+}$ is a coercive bilinear map on $\ell^2(\mathbb{Z})$, namely that there is $C > 0$ so that, for all $\mathbf{h} \in \ell^2(\mathbb{Z})$, we have

$$H_{\mathbf{t}^+}(\mathbf{h}, \mathbf{h}) \geq C \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^2.$$

By density, it is enough to prove the result for all compactly supported sequences $\mathbf{h}$. Assume that $\mathbf{h}$ is such a sequence, so that $h_n = 0$ for all $|n| \geq S$. First, we claim that there is $C > 0$ so that, for all L large enough, we have

$$H_{\mathbf{t}_L^+}^{(L)}(\mathbf{h}, \mathbf{h}) \geq C \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^2, \quad (3.28)$$

where $H_{\mathbf{t}_L^+}^{(L)}(\mathbf{h}, \mathbf{h})$ is the hessian of the SSH model for the closed $L = 2N$ chain, defined by

$$H_{\mathbf{t}_L^+}^{(L)}(\mathbf{h}, \mathbf{h}) = \mu \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^2 + 2 \text{Tr}_L \left(\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{z - T_L^+} H \frac{1}{z - T_L^+} H dz \right).$$

Here, Tr_L is the trace for $L \times L$ hermitian matrices, $\mathbf{t}_L^+$ is the dimerized ground state of the closed L -chain (L even), of the dimerized form (see [KL04])

$$\mathbf{t}_L^+ = W_L + (-1)^n \delta_L, \quad (3.29)$$

and T_L^+ is the associated $L \times L$ hermitian matrix. It was proved in [GS12; GKS23] that $W_L \rightarrow W$ and $\delta_L \rightarrow \delta$ as $L \rightarrow \infty$. Actually, the bound (3.28) was more or less proved in [GS12], with a constant C independent of L for L large enough. We provide here another proof.

To prove (3.28), as in [KL04], we use the convexity of the function $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ defined by

$$[0, 1] \ni x \mapsto -\sqrt{x} - \frac{1}{8}x^2.$$

As a consequence, the map $A \mapsto \text{Tr} f(A)$ is convex on the set of hermitian matrices with spectrum in $[0, 1]$. This implies that, with $A = \frac{1}{\|T\|_{\text{op}}} T^2$,

$$-\text{Tr}(\sqrt{T^2}) \geq -\text{Tr}(\sqrt{\langle T^2 \rangle}) + \frac{1}{8} \frac{1}{\|T\|_{\text{op}}^3} \text{Tr}[T^4 - \langle T^2 \rangle^2],$$

where $\langle A \rangle$ is the average of A over all translations, namely

$$\langle A \rangle = \frac{1}{L} \sum_{k=0}^{L-1} \Theta_1^k A \Theta_1^{-k}, \quad \Theta_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

We deduce that

$$\mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t}) \geq \frac{\mu}{2} \sum_{n=1}^L (t_n - 1)^2 - \text{Tr}_L(\sqrt{\langle T^2 \rangle}) + \frac{1}{8} \frac{1}{\|T\|^3} \text{Tr}_L[T^4 - \langle T^2 \rangle^2]. \quad (3.30)$$

Since the operator $T_L^\pm$ always corresponds to a 2-periodic configuration, it holds

$$\Theta_1 (T_L^\pm)^2 \Theta_1^* = (T_L^\pm)^2 \quad \text{and, in particular} \quad (T_L^\pm)^2 = \left\langle (T_L^\pm)^2 \right\rangle.$$

We deduce that there is equality in (3.30) for $\mathbf{t}_L^+$. We also deduce from (3.30) that, for all $\mathbf{t}$, we have

$$\mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t}) - \mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t}_L^+) \geq \frac{1}{8} \frac{1}{\|T\|_{\text{op}}^3} \text{Tr}[T^4 - \langle T^2 \rangle^2].$$

We apply this inequality for $\mathbf{t} = \mathbf{t}_L^+ + s\mathbf{h}$ and get that

$$\mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t}_L^+ + s\mathbf{h}) - \mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t}_L^+) \geq \frac{1}{8} \frac{1}{\|\mathbf{t}_L^+ + s\mathbf{h}\|_{\text{op}}^3} \text{Tr} \left[(T_L^+ + sH)^4 - \langle (T_L^+ + sH)^2 \rangle^2 \right]$$

For the denominator, we use the fact that, for s small enough, we have $\|\mathbf{t}_L^+ + s\mathbf{h}\|_{\text{op}} \leq 2\|\mathbf{t}_L^+\|_{\text{op}}$. For the numerator, expanding the expression and using that $(T_L^+)^2 = \langle (T_L^+)^2 \rangle$, so that $\text{Tr}_L((T_L^+)^3 H) = \text{Tr}_L(\langle (T_L^+)^2 \rangle \langle T_L^+ H \rangle)$ and $\text{Tr}_L(\langle (T_L^+)^2 \rangle \langle H^2 \rangle) = \text{Tr}_L((T_L^+)^2 H^2)$ (so that the orders $O(1)$ and $O(s)$ vanish), we obtain that

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t}_L^+ + s\mathbf{h}) - \mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t}_L^+) &\geq \frac{s^2}{16} \frac{1}{\|\mathbf{t}_L^+\|_{\text{op}}^3} \text{Tr}_L \left[(T_L^+ H + H T_L^+)^2 - \langle T_L^+ H + H T_L^+ \rangle^2 \right] + o(s^2) \\ &= \frac{s^2}{16} \frac{1}{\|\mathbf{t}_L^+\|_{\text{op}}^3} \left(\|T_L^+ H + H T_L^+\|_{\mathfrak{S}_2}^2 - \|\langle T_L^+ H + H T_L^+ \rangle\|_{\mathfrak{S}_2}^2 \right) + o(s^2) \end{aligned}$$

The previous computation is valid for all $\mathbf{h}$. We now use the fact that $\mathbf{h}$ is compactly supported in $[-S, S]$, and that $L \gg S$. This allows to prove that the last term is small. More specifically, we have the following.

Lemma 3.14. *For all $S \in \mathbb{N}$ all $L \gg S$, all $\mathbf{t} \in \mathbb{C}^L$ and all $\mathbf{h} \in \mathbb{C}^L$ compactly supported in $[-S, S]$, we have*

$$\|\langle TH \rangle\|_{\mathfrak{S}_2}^2 \leq \frac{6S}{L} \|\mathbf{t}\|_{\ell^\infty}^2 \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^2.$$

Proof. Set $A = TH$, so that

$$A_{n,n} = t_n h_n + h_{n-1} t_{n-1}, \quad A_{n,n+2} = t_{n+1} h_n, \quad A_{n,n-2} = t_{n-2} h_{n-1}.$$

The matrix $\langle A \rangle$ is of the form

$$\langle A \rangle_{n,n} = 2a_0, \quad \langle A \rangle_{n,n+2} = a_1, \quad \langle A \rangle_{n,n-2} = a_{-1}, \quad \text{with} \quad a_m := \frac{1}{L} \sum_{k=0}^{L-1} t_{k+m} h_k.$$

Using that h is compactly supported and Cauchy-Schwarz we get

$$|a_m|^2 = \frac{1}{L^2} \left(\sum_{k=-S}^S t_{k+m} h_k \right)^2 \leq \frac{1}{L^2} \|\mathbf{t}\|_{\ell^\infty}^2 \left(\sum_{k=-S}^S h_k \right)^2 \leq \frac{1}{L^2} \|\mathbf{t}\|_{\ell^\infty}^2 \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^2 S.$$

We obtain

$$\|A\|_{\mathfrak{S}^2}^2 = \sum_{n,m} \langle A \rangle_{n,m}^2 = L(2a_0)^2 + La_1^2 + La_{-1}^2 \leq 6L \frac{1}{L^2} \|\mathbf{t}\|_{\ell^\infty}^2 \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^2 S.$$

□

This proves that

$$\mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t}_L^+ + s\mathbf{h}) - \mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t}_L^+) = \frac{s^2}{16} \frac{1}{\|\mathbf{t}_L^+\|_{\text{op}}^3} \left(\|T_L^+ H + H T_L^+\|_{\mathfrak{S}_2}^2 - \frac{12S}{L} \|\mathbf{t}_L^+\|_{\ell^\infty}^2 \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^2 \right) + o(s^2).$$

Finally, we bound from below the remaining $\|T_L^+ H + H T_L^+\|_{\mathfrak{S}_2}^2$. A computation shows that the matrix $A := TH + HT$ satisfies

$$A_{n,n} = 2(t_n h_n + t_{n-1} h_{n-1}), \quad A_{n,n+2} = t_n h_{n+1} + h_n t_{n+1}, \quad A_{n,n-2} = t_{n-1} h_{n-2} + h_{n-1} t_{n-2},$$

and $A_{i,j} = 0$ otherwise. Squaring all terms and summing gives

$$\left\| T_L^+ H + H T_L^+ \right\|_{\mathfrak{S}_2}^2 = \sum_n 4(t_n h_n + t_{n-1} h_{n-1})^2 + (t_n h_{n+1} + h_n t_{n+1})^2 + (t_{n-1} h_{n-2} + h_{n-1} t_{n-2})^2.$$

Expanding, relabelling all sums, and using that $\mathbf{t}_L^+$ is dimerized, of the form (3.29), we obtain

$$\left\| T_L^+ H + H T_L^+ \right\|_{\mathfrak{S}_2}^2 = 2 \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left\langle \begin{pmatrix} h_n \\ h_{n+1} \end{pmatrix}, Q_n \begin{pmatrix} h_n \\ h_{n+1} \end{pmatrix} \right\rangle, \quad \text{with} \quad Q_n = \begin{pmatrix} 2t_n^2 + t_{n+1}^2 & 3t_n t_{n+1} \\ 3t_n t_{n+1} & t_n^2 + 2t_{n+1}^2 \end{pmatrix}.$$

We have

$$\text{Tr}(Q_n) = 3(t_n^2 + t_{n+1}^2) = 6(W_L^2 + \delta_L^2)$$

and

$$\det Q_n = (2t_n^2 + t_{n+1}^2)(t_n^2 + 2t_{n+1}^2) - 9t_n^2 t_{n+1}^2 = 2t_n^4 + 2t_{n+1}^4 - 4t_n^2 t_{n+1}^2 = 2(t_n^2 - t_{n+1}^2)^2 = 32 W_L^2 \delta_L^2.$$

Since $\delta_L \rightarrow \delta > 0$ and $W_L \rightarrow W$ for L large enough, there is a constant $C \geq 0$ such that $Q_n \geq C > 0$ for a constant C independent of n and L large enough. So

$$\left\| T_L^+ H + H T_L^+ \right\|_{\mathfrak{S}_2}^2 \geq 2C \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^2.$$

Altogether, we proved that for L large enough, we have

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t}_L^+ + s\mathbf{h}) - \mathcal{E}^{(L)}(\mathbf{t}_L^+) &\geq \frac{s^2}{16 \|T_L^+\|_{\text{op}}^3} \left(2C - \frac{12S}{L} \|\mathbf{t}_L^+\|_{\ell^\infty}^2 \right) \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^2 + o(s^2) \\ &\geq \tilde{C} s^2 \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^2 + o(s^2), \end{aligned}$$

where $\tilde{C}$ is independent of L , for L large enough ($L \geq L_0$, where L_0 depends on the support S of $\mathbf{h}$). This proves the lower bound (3.28) for $H_{\mathbf{t}_L^+}^{(L)}$. However, following [GS12], it can be proved that this hessian is indeed uniformly coercive (that is with a bound independent of L for L large enough).

To conclude the proof, we note that

$$\left| \text{Tr}_L \left(\frac{1}{z - T^+} H \frac{1}{z - T^+} H \right) - \text{Tr}_L \left(\frac{1}{z - T_L^+} H \frac{1}{z - T_L^+} H \right) \right| \leq C \|H\|_{\mathfrak{S}_2}^2 \|T^+ - T_L^+\|_{\text{op},L}.$$

Since $W_L \rightarrow W$ and $\delta_L \rightarrow \delta$, we have $\|T^+ - T_L^+\|_{\text{op},L} \rightarrow 0$ as $L = 2N$ (even) goes to infinity. So for L large enough, we have

$$\left| H_{\mathbf{t}^+}(\mathbf{h}, \mathbf{h}) - H_{\mathbf{t}_L^+}^{(L)}(\mathbf{h}, \mathbf{h}) \right| \leq \frac{C}{2} \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^2,$$

where C is the bound in (3.28). This proves $H_{\mathbf{t}^+}(\mathbf{h}, \mathbf{h}) \geq \frac{C}{2} \|\mathbf{h}\|_{\ell^2}^2$, where the constant C is independent of $\mathbf{h}$. We proved the bound for $\mathbf{h}$ compactly supported, but by density, it can be extended for all $\mathbf{h} \in \ell^2(\mathbb{Z})$, hence the coercivity of $H_{\mathbf{t}^+}$.

Appendix A

Le cas des chaînes ouvertes

Dans cette partie, nous donnons quelques résultats sur le cas des chaînes ouvertes de poly-acétylène. C'est-à-dire des chaînes finies dont les conditions aux bords sont ouvertes, au lieu des conditions périodiques pour des chaînes fermées. Nous étudions dans le cas $L = 3$ et $L = 4$, la symétrie des minimiseurs de l'énergie de Peierls-SSH pour des chaînes ouvertes. Cette propriété de symétrie des minimiseurs se traduit par $t_i = t_{L-i}$ pour une configuration minimisante $\{\mathbf{t}\} = \{t_1, \dots, t_{L-1}\}$.

1 Exemples des cas $L = 3$, et $L = 4$

Dans les chapitres précédents, nos études ont été faites dans le cas des chaînes fermées. Nous avons obtenu des résultats sur les comportements des minimiseurs de l'énergie de Peierls en présence d'une température strictement positive θ dans le cas d'une chaîne avec un nombre pair d'atomes de carbone $L = 2N$, et d'une chaîne infinie [GKS23]. Il faut également noter que les cas (pair et impair) des chaînes fermées à température nulle ont été étudiés dans [KL04; GS12]. Dans cette partie, nous présentons quelques résultats obtenus dans des cas particuliers ($L = 3, L = 4$) des chaînes ouvertes. Dans ces chaînes la configuration $\mathbf{t}$ formée par les amplitudes de saut entre les sites n et $n + 1$ est donnée par $\{\mathbf{t}\} = \{t_1, \dots, t_{L-1}\}$, où L correspond au nombre d'atomes dans la chaîne. L'énergie est donnée par

$$\mathcal{E}^{(L)}(\{\mathbf{t}\}) := \frac{\mu}{2} \sum_{n=1}^{L-1} (t_n - 1)^2 - \text{Tr}(|T|), \quad (\text{A.1})$$

where $T = T(\{\mathbf{t}\})$ is the $L \times L$ hermitian matrix

$$T = T(\{\mathbf{t}\}) := \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ t_1 & 0 & t_2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & t_{L-2} & 0 & t_{L-1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & t_{L-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

1.1 Le cas $L = 4$

Pour une chaîne ouverte avec $L = 4$ atomes de carbone, on a $\{\mathbf{t}\} = \{t_1, t_2, t_3\}$ et l'énergie est donnée par

$$\mathcal{E}^{(4)}(\{t_1, t_2, t_3\}) = \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^3 (t_i - 1)^2 - \text{Tr}(|T_{123}|), \quad (\text{A.3})$$

avec T_{123} définie par

$$T_{123} := \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 \\ t_1 & 0 & t_2 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_3 \\ 0 & 0 & t_3 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

Nous allons utiliser dans cette partie une technique appelée "Reflection positivity" [LN95], qui est un concept de la physique statistique et consiste à montrer que

$$\sum_i \lambda_i^-(T_{123}) \geq \frac{1}{2} \left(\sum_i \lambda_i^-(T_{121}) + \sum_i \lambda_i^-(T_{323}) \right), \quad (\text{A.5})$$

où, $\lambda_i^-(T_{123})$, $\lambda_i^-(T_{121})$ et $\lambda_i^-(T_{323})$ sont les valeurs propres négatives de T_{123} , T_{121} et T_{323} respectivement et

$$T_{123} := \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 \\ t_1 & 0 & t_2 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_3 \\ 0 & 0 & t_3 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_{121} := \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 \\ t_1 & 0 & t_2 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_1 \\ 0 & 0 & t_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_{323} := \begin{pmatrix} 0 & t_3 & 0 & 0 \\ t_3 & 0 & t_2 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_3 \\ 0 & 0 & t_3 & 0 \end{pmatrix}.$$

En considérant la matrice unitaire $\mathcal{U}$ définie par

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

on a $\mathcal{U}^* T_{123} \mathcal{U} = -T_{123}$, $\mathcal{U}^* T_{121} \mathcal{U} = -T_{121}$, $\mathcal{U}^* T_{323} \mathcal{U} = -T_{323}$. Par conséquent, les spectres de $T_{123}, T_{121}, T_{323}$ sont symétriques par rapport à 0. On a le polynôme caractéristique de T_{123} donné par

$$P_\lambda(T_{123}) = (\lambda^2 - \lambda_1^2)(\lambda^2 - \lambda_2^2) = \lambda^4 - (\lambda_1^2 + \lambda_2^2)\lambda^2 + \lambda_1^2\lambda_2^2, \quad (\text{A.6})$$

avec $\lambda_1^\pm(T_{123}) := \pm\lambda_1$, et $\lambda_2^\pm(T_{123}) := \pm\lambda_2$ sont les valeurs propres de T_{123} . D'autre part en calculant le déterminant de $T_{123} - \lambda \mathbf{1}_4$, on a

$$P_\lambda(T_{123}) = \lambda^4 - (t_1^2 + t_2^2 + t_3^2)\lambda^2 + (t_1 t_3)^2. \quad (\text{A.7})$$

En utilisant (A.6) et (A.7), on par identification

$$\lambda_1^2 + \lambda_2^2 = t_1^2 + t_2^2 + t_3^2, \quad \text{et} \quad \lambda_1^2 \lambda_2^2 = t_1^2 t_2^2,$$

ce qui permet d'écrire $(\lambda_1 + \lambda_2)^2 = t_1^2 + t_2^2 + t_3^2 + 2|t_1 t_3|$. On en déduit que

$$\lambda_1^-(T_{123}) + \lambda_2^-(T_{123}) := \lambda_1^- + \lambda_2^- = -\sqrt{t_1^2 + t_2^2 + t_3^2 + 2|t_1 t_3|}.$$

De même on a,

$$\lambda_1^-(T_{121}) + \lambda_2^-(T_{121}) = -\sqrt{4t_1^2 + t_2^2}, \quad \text{et} \quad \lambda_1^-(T_{323}) + \lambda_2^-(T_{323}) = -\sqrt{4t_3^2 + t_2^2}.$$

Posons $A = \lambda_1^-(T_{123}) + \lambda_2^-(T_{123})$, $B = \lambda_1^-(T_{121}) + \lambda_2^-(T_{121})$, $C = \lambda_1^-(T_{323}) + \lambda_2^-(T_{323})$. L'objectif est de montrer que

$$A \geq \frac{1}{2}(B + C).$$

En posant $E := A^2 - \frac{1}{4}(B^2 + C^2) = 2|t_1 t_3| + \frac{1}{2}t_2^2$ et $D := \frac{1}{2}BC = \frac{1}{2}\sqrt{(4t_1^2 + t_2^2)(4t_3^2 + t_2^2)}$, on a $E^2 - D^2 = -(|t_1| + |t_3|)^2 t_2^2 \leq 0$. Ainsi, $A^2 \leq \frac{1}{2}(B + C)^2$, et comme A, B et C sont tous

négatifs, on en déduit que $A \geq \frac{1}{2}(B + C)$, ce qui démontre l'inégalité (A.5). Puis qu'on a $-\frac{1}{2}\text{Tr}(|T|) = \sum_i \lambda_i^-(T)$, où $\lambda_i^-(T)$ sont les valeurs propres négatives de T . On obtient

$$\mathcal{E}^{(4)}(\{t_1, t_2, t_3\}) \geq \frac{1}{2} \left(\mathcal{E}^{(4)}(\{t_1, t_2, t_1\}) + \mathcal{E}^{(4)}(\{t_3, t_2, t_3\}) \right), \quad (\text{A.8})$$

et le minimum de $\mathcal{E}^{(4)}$ est atteint pour les configurations $\{\mathbf{t}\} = \{t_1, t_2, t_3\}$, telles que $t_1 = t_3$.

À notre connaissance aucun résultat n'a été obtenu pour l'instant dans le cas général des chaînes ouvertes avec un nombre pair d'atomes.

1.2 Le cas $L = 3$

Pour une chaîne ouverte avec $L = 3$ atomes de carbone, on a $\{\mathbf{t}\} = \{t_1, t_2\}$ et l'énergie est donnée par

$$\mathcal{E}^{(3)}(\{t_1, t_2\}) = \frac{\mu}{2} \left((t_1 - 1)^2 + (t_2 - 1)^2 \right) - \sqrt{t_1^2 + t_2^2}, \quad (\text{A.9})$$

qui peut être réécrit sous la forme

$$\mathcal{E}^{(3)}(s, r) = \frac{\mu}{2} (s^2 - 2r + 2) - s \quad (\text{A.10})$$

où s , et r sont définis par $s := \sqrt{t_1^2 + t_2^2}$ et $r := t_1 + t_2$. De plus s et r satisfont les relations suivantes $s \geq 0$ et $r^2 \leq 2s^2$. Pour s fixé, $\mathcal{E}^{(3)}$ est décroissante en r , par conséquent $\mathcal{E}^{(3)}$ est minimale pour $r^2 = 2s^2$, qui implique $t_1 = t_2$.

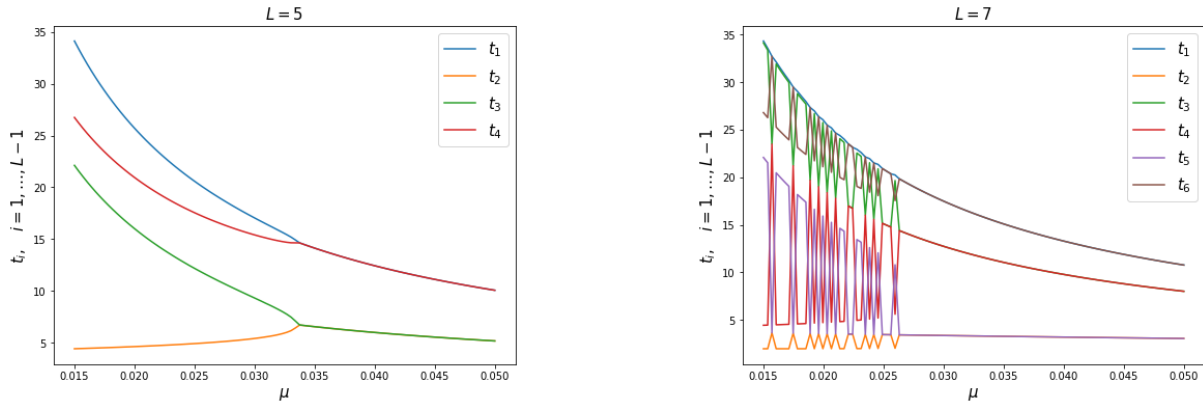


Figure A.1 – Pour $L = 5$, comme pour $L = 7$, on remarque d'après les résultats numériques qu'il semble exister une valeur critique de μ à partir de laquelle $t_i = t_{L-i}$ pour $i = 1, \dots, L-1$, dans la configuration $\{\mathbf{t}\} = \{t_1, \dots, t_{L-1}\}$.

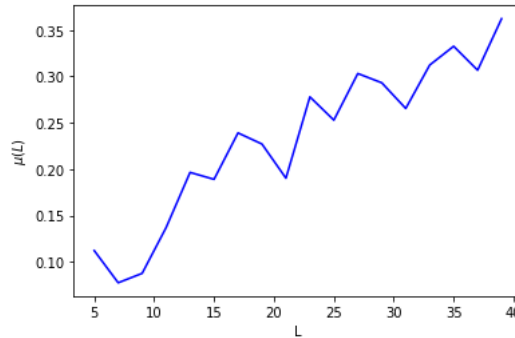


Figure A.2 – Les valeurs critiques de μ en fonction du nombre d'atomes dans le chaîne L .

Dans le cas général des chaînes ouvertes avec un nombre impair $L = 2N + 1$ d'atomes de carbones, aucun résultat rigoureux (mathématique) n'a été obtenu pour l'instant, mais au vu des résultats numériques on peut émettre une conjecture selon laquelle il existerait une valeur critique de μ dépendant de L au dessus de laquelle $t_i = t_{L-i}$ pour $i = 1, \dots, L - 1$. On peut même obtenir numériquement, la variation des valeurs critiques de μ en fonction du nombre d'atomes L dans la chaîne comme le montre la Figure [A.2](#).

Bibliographie

- [BF04] H. Bruus and K. Flensberg. *Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction*. OUP Oxford, 2004.
- [Bha13] R. Bhatia. *Matrix analysis*. Vol. 169. Springer Science & Business Media, 2013.
- [BLS94] V. Bach, E. H. Lieb, and J. P. Solovej. “Generalized Hartree-Fock theory and the Hubbard model”. In: *Journal of Statistical Physics* 76.1 (1994), pp. 3–89.
- [CA07] J. M. G. Cowie and V. Arrighi. *Polymers: chemistry and physics of modern materials*. CRC press, 2007.
- [Car10] E. Carlen. “Trace inequalities and quantum entropy: an introductory course”. In: *Entropy and the quantum* 529 (2010), pp. 73–140.
- [Cha13] M. Chanda. *Introduction to polymer science and chemistry: a problem-solving approach*. CRC press, 2013.
- [Chi12] J. C. Chien. *Polyacetylene: chemistry, physics, and material science*. Elsevier, 2012.
- [Frö54] H. Fröhlich. “On the theory of superconductivity: The one-dimensional case”. In: *Proc. R. Soc. London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 223.1154 (1954), pp. 296–305.
- [Gar11] M. Garcia Arroyo. “Étude variationnelle des états électroniques de la molécule de polyacétylène : modèles continu et discret”. PhD thesis. Paris 9, 2011.
- [GKS23] D. Gontier, A. E. Kouande, and E. Séré. “Phase transition in the Peierls model for polyacetylene”. In: *Annales Henri Poincaré*. Springer. 2023, pp. 1–22.
- [GMP22] D. Gontier, D. Monaco, and S. Perrin-Roussel. “Symmetric Fermi projections and Kitaev’s table: Topological phases of matter in low dimensions”. In: *Journal of Mathematical Physics* 63.4 (2022), p. 041902.
- [GS12] M. Garcia Arroyo and E. Séré. “Existence of kink solutions in a discrete model of the polyacetylene molecule”. Preprint hal-00769075. 2012.
- [HJO13] T. Helgaker, P. Jorgensen, and J. Olsen. *Molecular electronic-structure theory*. John Wiley & Sons, 2013.
- [Jon34] H. Jones. “Applications of the Bloch theory to the study of alloys and of the properties of bismuth”. In: *Proc. R. Soc. London. Series A-Mathematical and Physical Sciences* 147.861 (1934), pp. 396–417.
- [KH82] S. Kivelson and D. Heim. “Hubbard versus Peierls and the Su-Schrieffer-Heeger model of polyacetylene”. In: *Phys. Rev. B* 26.8 (1982), p. 4278.
- [Kit09] A. Kitaev. “Periodic table for topological insulators and superconductors”. In: *AIP conference proceedings*. Vol. 1134. 1. American Institute of Physics. 2009, pp. 22–30.
- [KL04] T. Kennedy and E. H. Lieb. “Proof of the Peierls instability in one dimension”. In: *Condensed Matter Physics and Exactly Soluble Models*. Springer, 2004, pp. 85–88.
- [Lew22] M. Lewin. *Théorie spectrale et mécanique quantique*. Vol. 87. Springer, 2022.

- [LN95] E. H. Lieb and B. Nachtergaele. “Stability of the Peierls instability for ring-shaped molecules”. In: *Phys. Rev. B* 51.8 (1995), p. 4777.
- [LSM61] E. H. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis. “Two soluble models of an antiferromagnetic chain”. In: *Anna. of Phys* 16.3 (1961), pp. 407–466.
- [MN96] N. Macris and B. Nachtergaele. “On the flux phase conjecture at half-filling: an improved proof”. In: *Journal of statistical physics* 85.5-6 (1996), pp. 745–761.
- [Pei55] R. E. Peierls. *Quantum theory of solids*. Oxford University Press, 1955.
- [Pou+83] J. Pouget, S. Kagoshima, C. Schlenker, and J. Marcus. “Evidence for a Peierls transition in the blue bronzes K_{0.30}MoO₃ and Rb_{0.30}MoO₃”. In: *J. de Phys. Lettres* 44.3 (1983), pp. 113–120.
- [RS77] M. Reed and B. Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics Vol. IV: Analysis of Operators*. Academic Press, 1977.
- [Shi+77] H. Shirakawa, E. J. Louis, A. G. MacDiarmid, C. K. Chiang, and A. J. Heeger. “Synthesis of electrically conducting organic polymers: halogen derivatives of polyacetylene, (CH)_x”. In: *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications* 16 (1977), pp. 578–580.
- [Sim05] B. Simon. *Trace Ideals and Their Applications*. Mathematical Surveys and Monographs. American Mathematical Society, 2005.
- [SO12] A. Szabo and N. S. Ostlund. *Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory*. Courier Corporation, 2012.
- [SSH79] W. Su, J. Schrieffer, and A. J. Heeger. “Solitons in polyacetylene”. In: *Physical review letters* 42.25 (1979), p. 1698.
- [SSH80] W.-P. Su, J. Schrieffer, and A. Heeger. “Soliton excitations in polyacetylene”. In: *Physical Review B* 22.4 (1980), p. 2099.
- [Su80] W. P. .Su. “Existence of neutral kinks in polyacetylene”. In: *Solid State Communications* 35.11 (1980), pp. 899–901.
- [TLM80] H. Takayama, Y. R. Lin-Liu, and K. Maki. “Continuum model for solitons in polyacetylene”. In: *Phys. Rev. B* 21 (6 Mar. 1980), pp. 2388–2393.
- [VAS96] L. F. Vos, D. P. Aalberts, and W. van Saarloos. “Su-Schrieffer-Heeger model applied to chains of finite length”. In: *Phys. Rev. B* 53.22 (1996), p. 14922.

Étude mathématique de l'instabilité de Peierls dans le modèle discret du polyacétylène

Résumé

Cette thèse présente une étude mathématique et numérique de l'instabilité de Peierls dans le modèle discret du polyacétylène. Nous commençons par présenter le cadre général de notre travail. Par la suite, nous étudions la transition de phase dans le modèle de Peierls-SSH pour le polyacétylène. Nous considérons le modèle discret des chaînes fermées du polyacétylène avec un nombre pair d'atomes de carbone, ainsi que des chaînes infinies en présence de température, et prouvons l'existence d'une température critique en dessous de laquelle la chaîne est dimérisée, et au-dessus de laquelle cette chaîne est 1-périodique. La chaîne se comporte comme un isolant en dessous de la température critique et comme un métal au-dessus. Nous caractérisons la température critique dans le modèle limite thermodynamique et prouvons qu'elle est exponentiellement petite en fonction de la rigidité de la chaîne. Nous étudions ensuite la transition de phase autour de cette température critique. Pour finir, nous montrons dans la dernière partie la décroissance exponentielle des points critiques de l'énergie associée au modèle discret du polyacétylène à température nulle. Plus précisément, nous considérons les états stationnaires du modèle discret pour des chaînes infinies de polyacétylène qui sont des connexions homoclines ou hétéroclines entre deux états dimérisés périodiques. Nous prouvons que ces états convergent exponentiellement vite vers les états périodiques asymptotiques correspondants.

Mots clés : analyse non linéaire, théorie des opérateurs, théorie de bifurcation, physique mathématique, instabilité de Peierls, dimérisation, polyacétylène, limite thermodynamique, transition de phase, configurations homoclines, configurations hétéroclines.

Mathematical study of Peierls instability in the discrete polyacetylene model

Abstract

This thesis presents a mathematical and numerical study of the Peierls instability in the discrete polyacetylene model. We begin by presenting the general framework of our work. We then study the phase transition in the Peierls-SSH model for polyacetylene. We consider the discrete model of closed polyacetylene chains with an even number of carbon atoms, as well as infinite chains in the presence of temperature, and prove the existence of a critical temperature below which the chain is dimerized, and above which this chain is 1-periodic. The chain behaves like an insulator below the critical temperature and like a metal above it. We characterize the critical temperature in the thermodynamic limit model and prove that it is exponentially small as a function of chain rigidity. We then study the phase transition around this critical temperature. Finally, in the last section, we prove the exponential decay of the critical energy points associated with the discrete polyacetylene model at zero temperature. More precisely, we consider stationary states of the discrete model for infinite polyacetylene chains that are homoclinic or heteroclinic connections between two periodic dimerized states. We prove that these states converge exponentially fast to the corresponding asymptotic periodic states.

Keywords: nonlinear analysis, operators theory, bifurcation theory, mathematical physics, Peierls instability, dimerization, polyacetylene, thermodynamic limit, phase transition, homoclinic configurations, heteroclinic configurations.

RÉSUMÉ

Cette thèse présente une étude mathématique et numérique de l'instabilité de Peierls dans le modèle discret du polyacétylène. Nous commençons par présenter le cadre général de notre travail. Par la suite, nous étudions la transition de phase dans le modèle de Peierls-SSH pour le polyacétylène. Nous considérons le modèle discret des chaînes fermées du polyacétylène avec un nombre pair d'atomes de carbone, ainsi que des chaînes infinies en présence de température, et prouvons l'existence d'une température critique en dessous de laquelle la chaîne est dimérisée, et au-dessus de laquelle elle est 1-périodique. La chaîne se comporte comme un isolant en dessous de la température critique et comme un métal au-dessus. Nous caractérisons la température critique dans le modèle limite thermodynamique et prouvons qu'elle est exponentiellement petite en fonction de la rigidité de la chaîne. Nous étudions ensuite la transition de phase autour de cette température critique. Pour finir, nous montrons dans la dernière partie la décroissance exponentielle des points critiques de l'énergie associée au modèle discret du polyacétylène à température nulle. Plus précisément, nous considérons les états stationnaires du modèle discret pour des chaînes infinies de polyacétylène qui sont des connexions homoclines ou hétéroclines entre deux états dimérisés périodiques. Nous prouvons que ces états convergent exponentiellement vite vers les états périodiques asymptotiques correspondants.

MOTS CLÉS

Analyse non linéaire, théorie des opérateurs, théorie de bifurcation, physique mathématique, instabilité de Peierls, dimérisation, polyacétylène, limite thermodynamique, transition de phase, configurations homoclines, configurations hétéroclines.

ABSTRACT

This thesis presents a mathematical and numerical study of the Peierls instability in the discrete polyacetylene model. We begin by presenting the general framework of our work. We then study the phase transition in the Peierls-SSH model for polyacetylene. We consider the discrete model of closed polyacetylene chains with an even number of carbon atoms, as well as infinite chains in the presence of temperature, and prove the existence of a critical temperature below which the chain is dimerized, and above which this chain is 1-periodic. The chain behaves like an insulator below the critical temperature and like a metal above it. We characterize the critical temperature in the thermodynamic limit model and prove that it is exponentially small as a function of chain rigidity. We then study the phase transition around this critical temperature. Finally, in the last section, we prove the exponential decay of the critical energy points associated with the discrete polyacetylene model at zero temperature. More precisely, we consider stationary states of the discrete model for infinite polyacetylene chains that are homoclinic or heteroclinic connections between two periodic dimerized states. We prove that these states converge exponentially fast to the corresponding asymptotic periodic states.

KEYWORDS

Nonlinear analysis, operators theory, bifurcation theory, mathematical physics, Peierls instability, dimerization, polyacetylene, thermodynamic limit, phase transition, homoclinic configurations, heteroclinic configurations.