Transition de phases dans le modèle d'Heisenberg

Raphael Ducatez

Table des matières

1 Introduction **3**

2 Rappel de physique statistique quantique : le modèle canonique **4**
2.1 Modèle canonique 4
2.2 Moyenne et dérivé de la fonction de partition 4
2.2.1 Proposition : moyenne classique et dérivé 4
2.2.2 Proposition : dérivé d'opérateurs 5
2.2.3 Corolaire : moyenne quantique et dérivé 5

3 Fonction de Duhamel **6**
3.1 Fonction de Duhamel 6
3.1.1 Définition de la fonction Duhamel 6
3.1.2 Proposition : forme intégrale 6
3.2 Fonction de S... 6
3.2.1 Définition de la fonction S... 7
3.2.2 Théorème : représentation sous forme de transformé de Laplace 7
3.2.3 Corolaire : positivité de S.. 7
3.2.4 Corolaire : log convexité 7
3.2.5 Théorème : Produit scalaire 7
3.3 Quelques relations entre (A, A^*) et $< AA^* + A^*A >$ 8
3.3.1 Proposition : expression en fonction de S... 8
3.3.2 Proposition : Inégalité A 8
3.3.3 Lemme : inégalité B dite de Falk Bruch 9

4 Modèle d'Heisenberg quantique **10**
4.1 Rappel sur les opérateurs de Spin 10
4.2 Modèle d'un réseau cristallin 10
4.3 Transition de phase 10
4.3.1 Définition d'une transition de phase 11
4.4 Démonstration de l'existence d'une transition de phase, première partie 11
4.4.1 Définition : transformé de fourrier 11
4.4.2 Proposition : invariance L^2 11
4.4.3 Proposition : une égalité sur la variance 11
4.4.4 Proposition : double commutateur 12

5 Domination Gaussian **12**
5.0.5 Proposition : forme du hamiltonien antisymétrique . . . 12
5.1 Domination Gaussienne . . . 13
5.1.1 Lemme Domination Gaussienne . . . 13
5.1.2 Théorème : Borne infrarouge . . . 13
5.1.3 Théorème Réflexion positif . . . 14
5.1.4 Rappel . . . 14
5.2 Existence d'une transition de phase, fin de la preuve . . . 16

6 ANNEXE opérateur de spin **18**
6.0.1 Définition . . . 18
6.1 Spin simple . . . 18
6.1.1 Théorème valeurs propre . . . 18
6.2 Paire de spin . . . 19
6.2.1 Théorèmes de valeurs propres . . . 19
6.2.2 Rotation de spin . . . 20

7 ANNEXE Calcul **20**
7.1 Double commutateur . . . 20

1 Introduction

La plupart des matériaux présentent des phénomènes magnétiques à basse température. Ces phénomènes sont le résultat d'une orientation ordonnée des spins des atomes. Cet ordre s'explique par des interactions entre les atomes. La température au contraire favorise des états désordonnés. On étudie les systèmes où le nombre d'atomes tend vers l'infini. Dans ces systèmes l'existence d'un magnétisme spontané macroscopique implique un ordre à grande distance. Notre but sera de démontrer l'existence d'une transition de phase (existence d'un ordre à grande distance) dans le modèle d'Heisenberg quantique antiferromagnétique dans un réseau cubique de dimension 3. On rappellera dans un premier temps quelques notion de physique statistique quantique et on introduira la fonction de Duhamel. La démonstration de l'existence d'une transition de phases nécessitera en particulier l'inégalité de Falk Bruch, le théorème "réflexion positivity" et "Gaussian domination".

2 Rappel de physique statistique quantique : le modèle canonique

2.1 Modèle canonique

On étudie le système d'un point de vue thermodynamique. Selon le modèle canonique, les vecteurs propres v_i du hamiltonien H de valeurs propres E_i ont une probabilité de présence de

$$P_i = \frac{\exp(-\beta E_i)}{\sum_j \exp(-\beta E_j)} \tag{1}$$

où β est égale à $\frac{1}{k_b T}$ avec T la température et k_b la constante de Boltzmann.

Remarque : A température nul ($\beta = \infty$) seul l'état de plus basse énergie, appelé "état fondamental du système" a une probabilité de présence non nul. Inversement, à haute température ($\beta = 0$) tous les états sont équiprobables.

La moyenne d'une observable A est donnée par

$$< A >= \frac{1}{\sum_j \exp(-\beta E_j)} \sum_i \exp(-\beta E_i) < v_i | A v_i > \tag{2}$$

qui est réécrite par

$$< A >= \frac{1}{Tr(\exp(-\beta H))} Tr(A \exp(-\beta H)) \tag{3}$$

Remarque : $< A >$ est réelle. démonstration : Soit A, B deux matrices hermitiennes $(\overline{Tr(AB)} = Tr(\bar{A}\bar{B}) = Tr(A^t B^t) = Tr(AB)$

Remarque : L'opérateur $\frac{1}{Tr(\exp(-\beta H)} \exp(-\beta H)$ est appelé le "Gibb's State", c'est un opérateur positif, de trace égale à 1.

2.2 Moyenne et dérivé de la fonction de partition

Une propriété très intéressante du modèle canonique (classique ou quantique) est la relation qui existe entre les valeurs moyennes et les dérivés de sa fonction de partition. (ci dessous un tableau résumant les deux modèles)

objet	modèle classique	modèle quantique
description	(x,p) espace des phases	$\|v>$ espace de Hilbert
probabilité	$dxdy \exp(-\beta H(x,y))$	$exp(-\beta E_j)$
fonction de partition Z	$\iint_{x,p} \exp(-\beta H(x,y)) dxdp$	$Tr(exp(-\beta H))$
moyenne $< A >$	$\frac{1}{Z} \int_{x,p} A(x,p) \exp(-\beta H(x,y)) dxdp$	$\frac{1}{Z} Tr(Aexp(-\beta H))$

2.2.1 Proposition : moyenne classique et dérivé

Par dérivation sous le signe de l'intégrale on a la relation suivante en classique

$$< A >_{Cl}= \frac{d}{d\sigma} \frac{1}{Z} \iint_{x,p \in V \times \mathbb{R}^d} \exp(-\beta H(x,p) + \sigma A(x,p)) dxdp|_{\sigma=0} \tag{4}$$

Il se trouve que l'on a quelque chose de formellement identique dans le modèle quantique.

2.2.2 Proposition : dérivé d'opérateurs

Soit f une fonction développable en série entière.

$$\frac{d}{d\sigma}Tr(f(A+\sigma B))|_{\sigma=0} = Tr(Bf'(A)) \tag{5}$$

Démonstration. Par linéarité il suffit de démontrer pour $f = X^n$.

$$\begin{aligned} Tr((A+\sigma B)^n) &= Tr(A^n) + \sigma Tr(\sum_{i=0}^{n-1} A^i B A^{(n-1-i)}) + o(\sigma) \\ &= Tr(A^n) + \sigma \sum_{i=0}^{n-1} Tr(BA^{n-1}) + o(\sigma) \\ &= Tr(A^n) + \sigma n Tr(BA^{n-1}) + o(\sigma) \end{aligned}$$

□

2.2.3 Corolaire : moyenne quantique et dérivé

$$< A >_Q = \frac{d}{d\sigma}(\frac{1}{Z}Tr(\exp(\beta H + \sigma A))) \tag{6}$$

On remarquera ici que le problème de commutation de A et B est contourné par la propriété de la trace, c'est malheureusement insuffisant pour généraliser.

On a en effet sans peine pour le modèle classique

$$< AB > = \frac{d^2}{d\sigma d\tau}(\frac{1}{Z}\iint_{x,p} exp(-\beta H(x,p) + \sigma A(x,p) + \tau B(x,p))dxdp|_{\sigma=0,\tau=0} \tag{7}$$

Malheureusement en général

$$< AB > \neq \frac{d^2}{d\sigma d\tau}(\frac{1}{Z}Tr(exp(-\beta H(x,p) + \sigma A(x,p) + \tau B(x,p)))|_{\sigma=0,\tau=0} \tag{8}$$

On pourra remarquer que le terme de gauche est en général complexe alors que le terme de droite est toujours réel (avec A,B Hermitien) On étudiera en détails le terme de droite dans la partie suivante.

3 Fonction de Duhamel

3.1 Fonction de Duhamel

On étudie ici quelques propriétés de base de la fonction de Duhamel. On s'intéressera plus particulièrement aux relations existant entre $< AA^* >$ et cette fonction. Cela passera en particulier par l'introduction de la fonction de S...

3.1.1 Définition de la fonction Duhamel

Soit H un hamiltonien. On appelle fonction de Duhamel la fonction définie sur $\mathcal{H}^2$ par .

$$(A,B) := \frac{1}{Tr(\exp(-\beta H))} \frac{d^2}{d\sigma d\tau} Tr(exp(-\beta H + \sigma A + \tau B))|_{\sigma=0,\tau=0} \tag{9}$$

3.1.2 Proposition : forme intégrale

$$(A,B) = \frac{1}{Tr(\exp(-\beta H))} \int_0^1 Tr(A\exp(-x\beta H)B\exp(-(1-x)\beta H))dx \tag{10}$$

Démonstration.

$$\begin{aligned}
\frac{d^2}{d\sigma d\tau} Tr(exp(-\beta H + \sigma A + \tau B))|_{\sigma=0,\tau=0} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^2}{d\sigma d\tau} Tr((-\beta H + \sigma A + \tau B)^n)|_{\sigma=0,\tau=0} \\
&= Tr(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{i+j+k=n-2} ((\beta H)^i A (\beta H)^j B (\beta H)^k \\
&\quad +(\beta H)^i B (\beta H)^j A (\beta H)^k) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \sum_{i+k=n-2} Tr(A(\beta H)^i B (\beta H)^k) \\
&= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(i+k+1)!} Tr(A(\beta H)^i B (\beta H)^k) \\
&= \sum_{i}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^1 Tr(A\frac{1}{i!}(x\beta H)^i B \frac{1}{k!}((1-x)\beta H)^k) \\
&= \int_0^1 Tr(A\exp(-x\beta H)B\exp(-(1-x)\beta H))dx
\end{aligned}$$

□

On a utilisé la formule suivante qui se démontre par récurrence en intégrant par partie.

$$\int_0^1 x^i(1-x)^k dx = \frac{i!k!}{(i+k+1)!} \tag{11}$$

3.2 Fonction de S...

Les principales propriété de la fonction de Duhamel dans le cas particulier où $B = A^*$ découlent de l'étude de la fonction de S...

3.2.1 Définition de la fonction S...

Soit H un hamiltonien, soit A un opérateur quelconque. On appelle fonction de S... la fonction h_A définie par

$$h_A(x) := \frac{1}{Z} Tr(A \exp(-x\beta H) A^* \exp(-(1-x)\beta H)) \tag{12}$$

3.2.2 Théorème : représentation sous forme de transformé de Laplace

Il existe une mesure positive $\mu(t)$ définie sur $\mathbb{R}$ tel que

$$h_A(x) = \int_{\mathbb{R}} \exp(\beta t)\mu(t) \tag{13}$$

Démonstration. H étant un opérateur auto-adjoint, il est diagonalisable en un base orthonormé $|v_i>$ de valeur propre E_i.

On a alors que

$$\begin{aligned}
h_A(x) &= Tr(A \exp(-x\beta H) A^* \exp(-(1-x)\beta H)) \\
&= \sum_i < v_i | A \exp(-x\beta H) A^* \exp(-(1-x)\beta_i) | v_i > \\
&= \sum_{i,j} < v_i | A | v_j > \exp(-x\beta E_j) \bar{a_{j,i}} \exp(-(1-x)\beta E_i) \\
&= \sum_{i,j} |a_{j,i}|^2 \exp(-x\beta(E_j - E_j)) \exp(-(\beta E_i)
\end{aligned}$$

on peut alors poser

$$\mu(t) =_{def} \sum_{i,j} |a_{j,i}|^2 \exp(-\beta E_i) \delta_{(E_j - E_i)}(t) \tag{14}$$

□

Remarque : A commute avec H si et seulement si tous les termes non diagonaux sont nuls (car diagonalisable dans une même base) si et seulement si $\mu(t)$ est un dirac en zero si et seulement si h_A est constante.

3.2.3 Corolaire : positivité de S..

h_A est strictement positive et est nul si et seulement si $A = 0$

3.2.4 Corolaire : log convexité

h_A est log convexe.

3.2.5 Théorème : Produit scalaire

La fonction de Duhamel (A, B^*) définit un un produit scalaire sur l'espaces des matrices.

Démonstration. D'après Schwartz (A, B^*) est symétrique. D'après la proposition 10 (A, B^*) est bilinéaire. Parce que h_A est définit positive (A, A^*) est définit positive.

□

Remarque Lorsque $H = 0$ c'est le produit scalaire usuel.

3.3 Quelques relations entre (A, A^*) et $< AA^* + A^*A >$

Soit H un hamiltonien et A un opérateur. Alors que dans le modèle classique (A, A^*) et $< AA^* + A^*A >$ sont un seul et même objet, nous avons vu que dans le modèle quantique ils étaient en généralement différent. On obtient ici deux inégalités entre (A, A^*) et $< AA^* + A^*A >$.

3.3.1 Proposition : expression en fonction de S...

$$(A, A^*) = \int_0^1 h_A(x)dx \tag{15}$$

$$< AA^* + A^*A >= h_A(0) + h_A(1) \tag{16}$$

$$< [A, [H, A^*]] >= h'_A(1) - h'_A(0) \tag{17}$$

Démonstration. : Seule la dernière équation n'est pas immédiate :

$$h'_A(x) = \frac{1}{Z} Tr(A \exp(-x\beta H)[-HA^* + A^*H] \exp(-(1-x)\beta H) \tag{18}$$

$$\begin{aligned} h'_A(1) - h'_A(0) &= \frac{1}{Z} Tr(A \exp(-\beta H)[-HA^* + A^*H]) - \frac{1}{Z} Tr(A[-HA^* + A^*H] \exp(-\beta H)) \\ &= \frac{1}{Z} Tr(([-HA^* + A^*H]A - A[-HA^* + A^*H]) \exp(-\beta H)) \end{aligned}$$

□

Remarque parce que h_A est convexe $< [A, [H, A^*]] >\geq 0$.

3.3.2 Proposition : Inégalité A

$$(A, A^*) \leqslant \frac{1}{2} < AA^* + A^*A > \tag{19}$$

et il y a égalité si et seulement si A commute avec H

Démonstration. parce que h_A est convexe

$$\begin{aligned} (A, A^*) &= \int_0^1 h_A(x)dx \\ &\leqslant \int_0^1 xh_A(0) + (1-x)h_A(1)dx \\ &\leqslant \frac{1}{2} < AA^* + A^*A > \end{aligned}$$

□

3.3.3 Lemme : inégalité B dite de Falk Bruch

$$< AA^* + A^*A > \leqslant \sqrt{\frac{(A,A^*) < [A,[H,A^*]] >}{4}} coth(\sqrt{\frac{< [A,[H,A^*]] >}{4(A,A^*)}}) \tag{20}$$

Démonstration. Pour simplifier les notations on notera $g = \frac{1}{2} < AA^* + A^*A >$, $b = (A, A^*)$, $c =< [A,[H,A^*]] >$.

$$g =_{def} \frac{1}{2} < AA* + A*A >= \frac{1}{2}(h_A(0) + h_A(1)) = \int_{\Re} (\exp(\beta t) + 1)\mu(t) \tag{21}$$

$$b =_{def} (A, A*) = \int_0^1 h(x)dx = \int_{\Re} \frac{1}{t\beta}(\exp(t\beta) - 1)\mu(t) \tag{22}$$

$$c =_{def} < [A*, [\beta H, A]] >= h'(1) - h'(0) = \int_{\Re} t\beta(exp(\beta t) - 1)\mu(t) \tag{23}$$

Il apparait une mesure de probabilité

$$\nu(t) = \frac{1}{2g}(\exp(t\beta) + 1))\mu(t) \tag{24}$$

$$\begin{aligned} \frac{b}{g} &= \int_{\Re} \frac{1}{t\beta} \frac{\exp(t\beta) - 1}{(\exp(t\beta) + 1)} \nu(t) \\ &= \int_{\Re} \frac{2}{t\beta} th(\frac{t\beta}{2})\nu(t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{c}{g} &= 4\int_{\Re} \frac{t}{2} \frac{\exp(t\beta) - 1}{(\exp(t\beta) + 1)} \nu(t) \\ &= 4\int_{\Re} \frac{t\beta}{2} th(\frac{t\beta}{2})\nu(t) \end{aligned}$$

Soit f la fonction définie implicitement par $f(xth(x)) = \frac{th(x)}{x}$. On admettra que f est décroissante et convexe. D'après l'inégalité de Jensen.

$$\begin{aligned} \frac{b}{g} &= \int_{\Re} f(\frac{t\beta}{2} th(\frac{t\beta}{2}))\nu(t) \\ &\geqslant f(\int_{\Re} \frac{t\beta}{2} th(\frac{t\beta}{2}\nu(t))) \\ &= f(\frac{c}{4g}) \end{aligned}$$

On remarque maintenant que si $g = \sqrt{\frac{bc}{4}} coth(\sqrt{\frac{c}{4b}})$ alors on l'égalité. La fonction $gf(\frac{c}{4g})$ étant croissante en g, On peut conclure $g \leqslant \sqrt{\frac{bc}{4}} coth(\sqrt{\frac{c}{4b}})$

□

4 Modèle d'Heisenberg quantique

4.1 Rappel sur les opérateurs de Spin

Le spin d'un atome est décrit par trois observables suivant les directions x,y,z. S^x S^y et S^z. Dont les relations de commutations suivantes :

$$[S^i ; S^j] = i\epsilon^{i,j,k} S^k \tag{25}$$

où ϵ est l'opérateur d'antisymétrique.
et

$$(S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 = S(S+1)Id \tag{26}$$

où S est un demi entier.
Par exemple pour S=1/2 on peut choisir les matrices de Pauli

4.2 Modèle d'un réseau cristallin

Chaque atome est décrit par un espace de Hilbert H_a. Un système à plusieurs atomes est alors décrit par le produit des espaces de Hilbert $H_a \otimes H_b \otimes H_c$... et on étend les observables A de chacun de ces espaces H_a à l'espace produit par $A_a =_{def} Id * ... * Id * A * Id * ...Id$ ou A est placé à l'endroit a.

Le Hamiltonien décrivant le système suivant le modèle d'Heisenberg est le suivant :

$$H = -J \sum_{<a,b>\in E} (S_a^x S_b^x + S_a^y S_b^y + S_a^z S_b^z) \qquad ferromagnetisme J > 0 \tag{27}$$

$$H = -J \sum_{<a,b>\in E} (S_a^x S_b^x + S_a^y S_b^y + S_a^z S_b^z) \quad antiferromagnetisme J < 0 \tag{28}$$

où <a,b> sont les arêtes d'un graphe E dont les sommets sont les atomes et les arêtes représentant les interactions entre les atomes.

Le graphe pertinent d'un point de vu physique pour décrire un cristal est un réseau de dimension d : a appartient à $[0, ..L-1]^d$ et où les atomes n'interagissent seulement avec leur plus proches voisins (<a,b> appartient à E si seulement si $|a-b| = 1$

On ajoute en plus dans le modèle des conditions de limites périodiques en admettant que lorsque le système est grand les effets au bords ne contribuent presque pas. ($< a, b >$ appartient à E si $|a-b| = 1 mod[L]$)

4.3 Transition de phase

L'aimantation moyenne d'un cristal selon la direction z est donné par

$$m_{ferro} =< \frac{1}{\Lambda} \sum_a S_a^z > \tag{29}$$

où $\Lambda = L^d$ le nombre d'atome dans le cristal. il n'y a pas d'aimantation macroscopique pour les cristaux antiferromagnétiques, mais on s'attend malgré tout à un ordre de Neel.

$$m_{anti} =< \frac{1}{\Lambda} \sum_a (-1)^{|a|} S_a^z > \tag{30}$$

Parce que système est symétrique entre z et -z (voir annexe opérateur de spin), il est malheureusement illusoire d'espérer obtenir une moyenne non nulle avec ce modèle. Pour palier ce problème nous étudierons plutôt

$$m_{ferro}^2 =< (\frac{1}{\Lambda}\sum_a S_a^z)^2 > \tag{31}$$

$$m_{anti}^2 =< (\frac{1}{\Lambda}\sum_a (-1)^{|a|} S_a^z)^2 > \tag{32}$$

La bonne question est lorsque la taille du système tend vers l'infinie (limite thermodynamique, Λ est de l'ordre du nombre d'Avogadro ($N_a = 6.10^{23}$)) cette valeur converge-t-elle vers zero ? Il se trouve que la réponse dépend de la température.

4.3.1 Définition d'une transition de phase

On dit que le système admet une transition de phase si il existe $\epsilon > 0$ $\beta_0 > 0$ tel que pour tout $\beta > \beta_0$

$$lim_{\Lambda\to\infty} m_{ferro/anti}^2(\Lambda) > \epsilon \tag{33}$$

4.4 Démonstration de l'existence d'une transition de phase, première partie

Grâce au choix des conditions de limites périodiques, l'hamiltonien H est invariant par translation. Cela nous amène à travailler avec des transformés de Fourrier.

4.4.1 Définition : transformé de fourrier

On définit la transformé de Fourrier de S_a

$$\hat{S}_k^z = \frac{1}{\sqrt{\Lambda}}\sum_a \exp(-ik.a) S_a^z \tag{34}$$

où k est un vecteur du réseau réciproque (ie $\Lambda k \in 2\pi\mathbb{Z}^d$)

4.4.2 Proposition : invariance L^2

Formellement $|S^z|^2 = \sum_a S_a^z S_a^z$ définit un produit scalaire sur $\mathbb{R}^\Lambda$. Il est bien connu que la transformé de Fourrier y est un L^2 isomorphisme. Il y a une propriété d'analogue ici (qui peut être vérifier par calcul facilement).

$$\sum_a S_a^z S_a^z = \sum_k \hat{S}_k^z \hat{S}_{-k}^z \tag{35}$$

4.4.3 Proposition : une égalité sur la variance

$$m^2 = \frac{S(S+1)}{3} - \frac{1}{\Lambda}\sum_{(k\neq 0)} < S_k^z S_{-k}^z > \tag{36}$$

Démonstration. Par symétrie entre x,y,z et la relation $(S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 = S(S+1)Id$

$$\begin{aligned}
< \frac{1}{\Lambda}\sum_a (S_a^z)^2 > &= < \frac{1}{3}\frac{1}{\Lambda}\sum_a (S_a^x)^2 + (S_a^y)^2 + (S_a^z)^2 > \\
< \frac{1}{\Lambda}\sum_k \hat{S}_k^z \hat{S}_{-k}^z > &= \frac{S(S+1)}{3} \\
< \frac{1}{\Lambda}\hat{S}_0^z \hat{S}_0^z > &= \frac{S(S+1)}{3} - \frac{1}{\Lambda} < \sum_{k\neq 0} \hat{S}_k^z \hat{S}_{-k}^z > \\
< \frac{1}{\Lambda^2}\sum_{a,b} S_a^z S_b^z > &= \frac{S(S+1)}{3} - \frac{1}{\Lambda}\sum_{k\neq 0} < \hat{S}_k^z \hat{S}_{-k}^z >
\end{aligned}$$

□

Il "suffirait" maintenant de prouver que $< S_k^z S_{-k}^z >$ est suffisamment petit pour démontrer que m^2 est strictement positif.

4.4.4 Proposition : double commutateur

On note $\epsilon(k) = \sum_\nu 1 - cos(k_\nu)$ où k_ν est la ν-ième composante du vecteur k.

$$< [S_k^z, [\beta H, S_{-k}^z]] > \leqslant \epsilon(k) 2 J S^2 \beta \tag{37}$$

Démonstration. voir ANNEXE "calcul" □

Le plan est maintenant le suivant : On cherche à majorer (S_k, S_{-k}) puis utiliser l'inégalité de Falk Bruch, pour majorer $< S_k, S_{-k} >$. La méthode qui sera présentée est applicable dans le cas antiferromagnétique, il n'est malheureusement pas possible de l'étendre au cas ferromagnétique.

5 Domination Gaussian

On cherchera ici à majorer le terme (S_k, S_{-k}) dans le cas antiferromagnétique.

5.0.5 Proposition : forme du hamiltonien antisymétrique

Il est possible d'écrire l'hamiltonien antiferromagnétique sous la forme

$$H = -J \sum_{<a,b>\in E} (S_a^x S_b^x + i S_a^y i S_b^y + S_a^z S_b^z) \quad J > 0 \tag{38}$$

Démonstration. Soit Λ' le sous réseau $[(x_1, x_2..., x_d) : \sum x_i$ est paire$]$ Les opérateurs $-S^x$, S^y, $-S^z$ décrive un spin S. On choisit alors cette représentation pour les spin appartenant à Λ'

□

L'avantage de cette représentation est qu'elle fait apparaitre que des opérateurs réels. Écrit sous forme la définition de m^2 est donné par 31.

Quitte à retirer une constante l'hamiltonien antiferromagnétique peut s'écrire également sous la forme

$$H = J \sum_{<a,b>} (S_a^x - S_b^x)^2 + (i S_a^y - i S_b^y)^2 + (S_a^z - S_b^z)^2 \tag{39}$$

5.1 Domination Gaussienne

On étudie un ensemble d'hamiltonien légèrement différent. Soit ϕ un champs scalaire sur le réseau.

$$H[\phi] =_{def} J \sum_{<a,b>} (S_a^x - S_b^x)^2 + (S_a^y - S_b^y)^2 + ((S_a^z + \phi_a) - (S_b^z + \phi_b))^2 \tag{40}$$

$$Z[0] = Tr(\exp(-\beta H)) \tag{41}$$

$$Z[\phi] =_{def} Tr(\exp(-\beta H[\phi])) \tag{42}$$

5.1.1 Lemme Domination Gaussienne

$$Z[\phi] \leqslant Z[0] \tag{43}$$

La preuve sera présenté plus tard, elle nécessite notamment le théorème de réflexion positif.

5.1.2 Théorème : Borne infrarouge

$$(S_k^z, S_{-k}^z) \leqslant \frac{1}{2J\beta\epsilon(k)} \tag{44}$$

Démonstration. Si on admet ce lemme Domination Gaussienne. 0 est un maximum local (donc la dérivée seconde est négative). En développant au deuxième ordre en λ, il apparait la fonction Duhamel ainsi qu'un autre terme dont la somme doit être négative.

$$\begin{aligned}
Z[\lambda\phi] &= Tr(\exp(\beta J \sum_{<a,b>} (S_a^x - S_b^x)^2 + (S_a^y - S_b^y)^2 + (S_a^z - S_b^z)^2 + 2\lambda(\phi_a - \phi_b)(S_a^z - S_b^z) + \\
&\quad ((\lambda(\phi_a - \phi_b))^2) \\
&= Tr(\exp(\beta J \sum_{<a,b>} (S_a^x - S_b^x)^2 + (S_a^y - S_b^y)^2 + ((S_a^z - S_b^z)^2 + \lambda(\phi_a - \phi_b)(S_a^z - S_b^z) \\
&\quad -(\lambda(\phi_a - \phi_b))^2) \\
&= Z[0](1 + \lambda^2(\frac{(J\beta)^2}{2}\Big(\sum_{<a,b>} (S_a^z - S_b^z)(\phi_a - \phi_b), \sum_{<a,b>} (S_a^z - S_b^z)(\phi_a - \phi_b)\Big)_{Duhamel} \\
&\quad -\beta J \sum_{<a,b>} (\phi_a - \phi_b)^2))
\end{aligned}$$

Conclusion, si on admet le lemme "gaussian domination" alors pour tous ϕ réel

$$(J\beta)^2\Big(\sum_{<a,b>} (S_a^z - S_b^z)(\phi_a - \phi_b), \sum_{<a,b>} (S_a^z - S_b^z)(\phi_a - \phi_b)\Big)_{Duhamel} \leqslant \beta J \sum_{<a,b>} (\phi_a - \phi_b)^2) \tag{45}$$

En posant $\phi = \Re(\phi) + i\Im(\phi)$ et en remarquant que parce que (A,B) est symétrique on a

$$(A, B^*) = (\Re(A), \Re(B)) + (\Im(A), \Im(B)) \tag{46}$$

On peut généraliser aux ϕ complexe.

$$\frac{(J\beta)^2}{2}(\sum_{<a,b>}(S_a^z - S_b^z)(\phi_a - \phi_b), (\sum_{<a,b>}(S_a^z - S_b^z)(\phi_a - \phi_b))^*) \leqslant \beta J \sum_{<a,b>}|(\phi_a - \phi_b)|^2 \tag{47}$$

On applique maintenant cette formule au cas $\phi_a = exp(-ik.a)$ ou k est un vecteur du réseau dual.

$$|(\phi_a - \phi_b)|^2 = (sin(\frac{k.(b-a)}{2}))^2 = \frac{1}{2}(1 - cos(k.(b-a))) \tag{48}$$

$$\begin{aligned}\sum_{<a,b>}(S_a^z - S_b^z)(\phi_a - \phi_b) &= 2\sum_{<a,b>} S_a^z(\exp(-ika)(1 - \exp(-k(b-a))) \\ &= 2\sum_a (S_a^z)(\exp(-ika)) \sum_{b:|b-a|=1}(1 - exp(-k(b-a))\end{aligned}$$

Donc

$$(\sum_{<a,b>}(S_a^z - S_b^z)(\phi_a - \phi_b), (\sum_{<a,b>}(S_a^z - S_b^z)(\phi_a - \phi_b))^*) = (S_k^z, S_{-k}^z)4\epsilon(k)^2 \tag{49}$$

Conclusion, si on admet le lemme "Domination Gaussienne"

$$(S_k^z, S_{-k}^z) \leqslant \frac{1}{2J\beta\epsilon(k)} \tag{50}$$

□

La démonstration du lemme "Domination Gaussienne" nécessite le théorème suivant.

5.1.3 Théorème Réflexion positif

On travaille sur un produit d'espace de Hilbert. Soit $(H)_1$ et $\mathcal{H}_2$ deux espace de Hilbert de même dimension (donc isomorphe). Soit A,B, C_i et D_i sont opérateurs réelles définis sur $(H)_1$. Pour simplifier les notations on écrira $A = A \otimes Id$, et $\tilde{A} = Id \otimes A$ définis sur $(H)_1 \otimes (H)_2$. théorème :

$$\begin{aligned}(Tr(exp(A + \tilde{B} - \sum_i^L (C_i - \tilde{D}_i)^2))^2 \quad &\leqslant \quad (Tr(exp(A + \tilde{A} - \sum_i^L (C_i - \tilde{C}_i)^2)) \\ &\quad\quad (Tr(exp(B + \tilde{B} - \sum_i^L (D_i - \tilde{D}_i)^2))\end{aligned} \tag{51}$$

5.1.4 Rappel

$$Tr(A \otimes B) = Tr(A)Tr(B) \tag{52}$$

$$\exp(A + B) = lim_{n\to\infty}(1 + \frac{A}{n} + \frac{B}{n})^n = lim_{n\to\infty}(\exp(\frac{A}{n})\exp(\frac{B}{n}))^n \tag{53}$$

$$\exp(-D^2) = \int_{-\infty}^{\infty}\exp(-ikD)\exp(-\frac{k^2}{4})dk \tag{54}$$

Démonstration.

$$\begin{aligned}
(1) &= Tr(exp(A+\tilde{B}-\sum_i (C_i-\tilde{D}_i)^2)) \\
&= lim_{n\to\infty} Tr(\exp(\frac{A}{n})\exp(\frac{\tilde{B}}{n})\exp(\frac{(C_i-\tilde{D}_i)^2}{n})...) \\
&= lim_{n\to\infty} \int_{\mathbb{R}^{nL}} dk^{Ln}\exp(-\frac{k^2}{4}) Tr(\exp(\frac{A}{n})\exp(\frac{\tilde{B}}{n})\exp(\frac{-ik(C_i-\tilde{D}_i)}{\sqrt{n}})... \\
&= lim_{n\to\infty} \int_{\mathbb{R}^{nL}} dk^{Ln}\exp(-\frac{\sum k^2}{4}) Tr(\exp(\frac{A}{n})\exp(\frac{-ikC_i}{\sqrt{n}})...)Tr(\exp(\frac{\tilde{B}}{n}\exp(\frac{ik\tilde{D}_i)}{\sqrt{n}})...) \\
&\leqslant lim_{n\to\infty}\sqrt{\int_{\mathbb{R}^{nL}} dk^{Ln}\exp(-\frac{\sum k^2}{4}) Tr(\exp(\frac{A}{n})\exp(\frac{-ikC_i}{\sqrt{n}})...)Tr(\exp(\frac{A}{n})\exp(\frac{ikC_i}{\sqrt{n}})...)} \\
&\quad \sqrt{\int_{\mathbb{R}^{nL}} dk^{Ln}\exp(-\frac{\sum k^2}{4}) Tr(\exp(\frac{B}{n})\exp(\frac{-ikD_i}{\sqrt{n}})...)Tr(\exp(\frac{B}{n})\exp(\frac{ikD_i}{\sqrt{n}})...)} \\
&\leqslant \sqrt{(Tr(exp(A+\tilde{A}-\sum_i^L (C_i-\tilde{C}_i)^2))(Tr(exp(B+\tilde{B}-\sum_i^L (D_i-\tilde{D}_i)^2))}
\end{aligned}$$

□

On a utilisé Cauchy Schwartz pour l'inégalité. Il est important de remarquer que $\overline{Tr(\exp(\frac{A}{n})\exp(\frac{-ikC_i}{\sqrt{n}})...)} = Tr(\exp(\frac{A}{n})\exp(\frac{ikC_i}{\sqrt{n}})...)$ parce que les matrices sont RÉELLES.

Malheureusement on ne sais toujours pas étendre ce théorème à l'ensemble des matrices hermitiennes. On est donc incapable de l'utiliser pour le cas ferromagnétique En effet la propriété $[S^x, S^y] = iS^z$ démontre qu'il n'existe pas de base convenable tel que S^x, S^y, S^z soient tous les trois réelles.

Démonstration Domination Gaussienne. On peut maintenant démontrer le lemme. On remarquera que $Z[\phi]$ converge vers zero lorsque ϕ diverge par un argument de compacité le maximum est atteint.

On divise le réseau Λ en deux sous réseau Λ_1 et Λ_2. Ces deux sous réseau engendrent deux espace de Hilbert identique. $\mathcal{H}_1$=$[(x_1, x_2, ..., x_d) : x_1 \in [a, a+\frac{L}{2}]\ ]$, $\mathcal{H}_2$= $[(x_1, x_2, ..., x_d) : x_1 \in [a+\frac{L}{2}+1, a+L]$ et on applique le théorème à ces deux sous espaces : Soit ϕ un champs scalaire sur Λ qui maximise $Z[\phi]$, on note $[\phi_{1(2)}]$ la restriction de ϕ à $\Lambda_{1(2)}$ et $\mathcal{R}\phi_1$ le symétrique de ϕ_1 dans Λ par rapport à l'hyperplan $x_1 = a + \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned}
H[\phi] &= J\sum_{<a,b>,a,b\in\Lambda_1} (S_a^x-S_b^x)^2+(S_a^y-S_b^y)^2+((S_a^z+\phi_a)-(S_b^z+\phi_b))^2)) \\
&\quad +J\sum_{<a,b>,a,b\in\Lambda_2} (S_a^x-S_b^x)^2+(S_a^y-S_b^y)^2+((S_a^z+\phi_a)-(S_b^z+\phi_b))^2)) \\
&\quad +J\sum_{<a,b>,a\in\Lambda_1 b\in\Lambda_2} (S_a^x-S_b^x)^2+(S_a^y-S_b^y)^2+((S_a^z+\phi_a)-(S_b^z+\phi_b))^2)) \\
&= A\otimes Id + Id\otimes B + J\sum_{<a,b>,a\in\Lambda_1,b\in\Lambda_2} (S_a^x-S_b^x)^2+(S_a^y-S_b^y)^2 \\
&\quad +((S_a^z+\phi_a)-(S_b^z+\phi_b))^2))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z[\phi_1,\phi_2]^2 &\leqslant Tr(\exp(\beta J(A\otimes Id + Id\otimes A \\ &+ \sum_{<a,b>a\in\Lambda_1,b\in\Lambda_2} (S_a^x - S_b^x)^2 + (S_a^y - S_a^y)^2 + ((S_a^z+\phi_a) - (S_b^z+\phi_a))^2)) \\ &Tr(\exp(\beta(B\otimes Id + Id\otimes B \\ &+J \sum_{<a,b>a\in\Lambda_1,b\in\Lambda_2} (S_a^x - S_b^x)^2 + (S_a^y - S_a^y)^2 + ((S_a^z+\phi_a) - (S_b^z+\phi_a))^2)) \\ &\leqslant Z[\phi_1,\mathcal{R}\phi_1]Z[\mathcal{R}\phi_2,\phi_2] \end{aligned}$$

En conclusion $Z[\phi_1,\phi_2]$ est un maximum alors $Z[\phi_1,\mathcal{R}\phi_1]$ et $Z[\mathcal{R}\phi_2,\phi_2]$ sont également des maximums. Si on suppose ϕ non nul, on peut choisir correctement a de tel sorte que $\phi_1,\mathcal{R}\phi_1$ ou $\phi_2,\mathcal{R}\phi_2$ ait strictement plus de point x du réseau où $(\phi)_x = 0$ que $Z[\phi]$. En considérant le maximum ayant le plus grand nombre cela nous permet de conclure.$Z[0,0]$ est un maximum.

□

5.2 Existence d'une transition de phase, fin de la preuve

On termine la preuve de l'existence d'une transition de phase dans le cas Antiferromagnétique. On a choisit la représentation du Hamiltonien 38, (qui on le rappel a pour conséquence de changer $S^{z(x)}$ en $-S^{z(x)}$ un spin sur deux). On rappel les principaux résultats obtenus selon cette définition.

$$m_{anti}^2 = <(\frac{1}{\Lambda}\sum_a S_a^z)^2> \quad (55)$$

$$= \frac{S(S+1)}{3} - \frac{1}{\Lambda}\sum_{(k\neq 0)} <S_k^z S_{-k}^z> \quad (56)$$

$$<[S_k^z,[\beta H, S_{-k}^z]]> \leqslant \epsilon(k+\pi)2JS^2\beta \quad (57)$$

$$(S_k^z, S_{-k}^z) \leqslant \frac{1}{2J\beta\epsilon(k)} \quad (58)$$

On injecte maintenant dans l'inégalité de Falk Bruch les résultats précédents.

$$\sum_{k\neq 0} <S_k^z S_{-k}^z> \leqslant \sum_{k\neq 0}\sqrt{\frac{S^2\epsilon(k+\pi)}{4\epsilon(k)}}coth(\sqrt{\frac{2JS^2\beta\epsilon(k+\pi)2JS^2\beta\epsilon(k)}{4}}) \quad (59)$$

Lorsque Λ tend vers l'infini on obtient une somme de Riemann.
Rappel, pour k petit $\epsilon(k) = \sum_\nu 1 - cos(k_\nu) \approx |k|^2$.

$$\sum_{k\neq 0} <S_k^z S_{-k}^z> \leqslant \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{[-\pi,\pi]^d}\sqrt{\frac{S^2\epsilon(k+\pi)}{4\epsilon(k)}}coth(\sqrt{\frac{2JS^2\beta\epsilon(k+\pi)2JS^2\beta\epsilon(k)}{4}}) \quad (60)$$

Si la dimension est supérieur ou égale à trois l'intégrale est différente de ∞. Par convergence dominée

$$\int_{[-\pi,\pi]^d}\sqrt{\frac{S^2\epsilon(k+\pi)}{4\epsilon(k)}}coth(\sqrt{\frac{2JS^2\beta\epsilon(k+\pi)2JS^2\beta\epsilon(k)}{4}} \rightarrow_{\beta\rightarrow\infty} \int_{[-\pi,\pi]^d}\sqrt{\frac{S^2\epsilon(k+\pi)}{4\epsilon(k)}} \quad (61)$$

Une évaluation de l'intégrale permet de conclure (au moins lorsque S est suffisamment grand).

$$
\begin{aligned}
lim_{\beta\to\infty} lim_{\Lambda\to\infty} m_{anti}^2(\Lambda) &> \frac{S(S+1)}{3} - \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{[-\pi,\pi]^d}\sqrt{\frac{S^2\epsilon(k+\pi)}{4\epsilon(k)}} \\
&> 0
\end{aligned}
\tag{62}
$$

Remarque Il est possible d'améliorer ce résultat pour tout S en considérant $< S_0 S_{e_1} >$ à la place S^2 qui est un peu grossier comme majoration.

Cela termine la preuve de l'existence d'une transition de phase dans le modèle d'Heisenberg antiférromagnétique.

Remerciement Je remercie très chaleureusement Daniel Ueltschi pour m'avoir encadré durant ce stage.

6 ANNEXE opérateur de spin

6.0.1 Définition

$$[S^i; S^j] = i\epsilon^{i,j,k} S^k \quad (63)$$

où ϵ est l'opérateur d'antisymétrique.

$$(S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 = S(S+1)Id \quad (64)$$

où S est un demi entier.

6.1 Spin simple

6.1.1 Théorème valeurs propre

Les valeurs propres de S^z sont les entiers ou les demi entiers $[-S; S+1; ...; S-1; S]$

Démonstration. On introduit les opérateurs de création $S^+ = (S^x + iS^y)$ et d'annihilation $S^+ = (S^x - iS^y)$

$$[S^+; S^z] = ([S^x; S^z] + i[S^y; S^z] = -iS^y - S^x = -S^+ \quad (65)$$

$$[S^-; S^z] = [S^x; S^z] - i[S^y; S^z] = -iS^y + S^x = S^- \quad (66)$$

$$[S^+; S^-] = -i[S^x; S^y] + i[S^y; S^x] = 2S^z \quad (67)$$

Soit $|v>$ vecteur propre de S^z de valeur propre λ. Alors $S^{+(-)}|v>$ est vecteur propre de S^z de valeur $\lambda + (-)1$.

Démonstration.

$$S^z S^{+(-)}|v> = S^{+(-)} S^z|v> + [S^z; S^{+(-)}]|v> = \lambda S^{+(-)}|v> + (-)S^{+(-)}|v> \quad (68)$$

□

$$\begin{aligned} S(S+1) &= (S^z)^2 + (\frac{1}{2}(S^+ + S^-))^2 + (\frac{1}{2i}(S^+ - S^-))^2 \\ &= (S^z)^2 + \frac{1}{2}(S^+S^- + S^-S^+) \\ &= (S^z)^2 + S^z + S^-S^+ \\ &= (S^z)^2 - S^z + S^+S^- \end{aligned}$$

Donc $S^+|v> = 0$ si et seulement si $S^z|v> = S|v>$ et $S^-|v> = 0$ si et seulement si $S^z|v> = -S|v>$.Si S^z admet une valeur propre ν différente de $[-S; S+1; ...; S-1; S]$ alors $(S^+)^n|v>$ ou $(S^-)^n|v>$ n'est jamais nulle, or S^z est bornée ce qui est absurde.

□

6.2 Paire de spin

On s'intéresse maintenant à l'opérateur $(\vec{S_a} + \vec{S_b})^2$

$$(\vec{S_a} + \vec{S_b})^2 =_{def} (S_a^x + S_b^x)^2 + (S_a^y + S_b^y)^2 + (S_a^z + S_b^z)^2 \tag{69}$$

6.2.1 Théorèmes de valeurs propres

Les valeurs propres de $(\vec{S_a} + \vec{S_b})^2$ sont $k(k+1)$ $k \in [0, 1, 2, ..., 2S]$, dont la multiplicité de la valeur propre $k(k+1)$ est $2k+1$.

Démonstration. : on calcul d'abord quelques commutateurs.

$$\begin{aligned}
(\vec{S_a} + \vec{S_b})^2 &= \frac{1}{4}((S_a^+ + S_a^-) + (S_b^+ + S_b^-))^2 - \frac{1}{4}((S_a^+ - S_a^-) + (S_b^+ - S_b^-))^2 + (S_a^z + S_b^z)^2 \\
&= \frac{1}{2}(S_a^+ + S_b^+)(S_a^- + S_b^-) + \frac{1}{2}(S_a^- + S_b^-)(S_a^+ + S_b^+) + (S_a^z + S_b^z)^2 \\
&= (S_a^+ + S_b^+)(S_a^- + S_b^-) + (S_a^z + S_b^z) + (S_a^z + S_b^z)^2 \qquad (70) \\
&= (S_a^- + S_b^-)(S_a^+ + S_b^+) - (S_a^z + S_b^z) + (S_a^z + S_b^z)^2 \qquad (71)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[S_a^+ + S_b^+; (\vec{S_a} + \vec{S_b})^2] &= \frac{1}{2}(S_a^+ + S_b^+)([S_a^+ + S_b^+; (S_a^- + S_b^-)]) + \\
&\quad \frac{1}{2}[(S_a^+ + S_b^+)(S_a^- + S_b^-)](S_a^+ + S_b^+) + [S_a^+ + S_b^+; (S_a^z + S_b^z)^2] \\
&= -(S_a^+ + S_b^+)(S_a^z + S_b^z) - (S_a^z + S_b^z)(S_a^+ + S_b^+) + \\
&\quad (S_a^+ + S_b^+)(S_a^z + S_b^z) + (S_a^z + S_b^z)(S_a^+ + S_b^+) \\
&= 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[S_a^z + S_b^z; (\vec{S_a} + \vec{S_b})^2] &= (S_a^x + S_b^x)[S_a^z + S_b^z; (S_a^x + S_b^x)] + [S_a^z + S_b^z; (S_a^x + S_b^x)](S_a^x + S_b^x) \\
&\quad [S_a^z + S_b^z; (S_a^y + S_b^y)](S_a^y + S_b^y) + (S_a^y + S_b^y)[S_a^z + S_b^z; (S_a^y + S_b^y)] \\
&= i(S_a^x + S_b^x)(S_a^y + S_b^y) + i(S_a^y + S_b^y)(S_a^x + S_b^x) \\
&\quad -i(S_a^y + S_b^y)(S_a^x + S_b^x) - i(S_a^x + S_b^x)(S_a^y + S_b^y) \\
&= 0
\end{aligned}$$

$$[S_a^+ + S_b^+; (S_a^z + S_b^z)] = -(S_a^+ + S_b^+)$$

En conclusion $S_a^z + S_b^z$ et $(\vec{S_a} + \vec{S_b})^2$ commutent donc diagonalisable dans une même base. $S_a^+ + S_b^+$ et $(\vec{S_a} + \vec{S_b})^2$ commutent donc $S_a^+ + S_b^+$ laisse stable les sous espaces propres de $(\vec{S_a} + \vec{S_b})^2$. Soit $|v>$ vecteur propre de $S_a^z + S_b^z$ et $(\vec{S_a} + \vec{S_b})^2$ de valeur propre λ et J alors $(S_a^+ + S_b^+)|v>$ est vecteur propre de $S_a^z + S_b^z$ de valeur propre $\lambda + 1$. En utilisant 70 ou 71 et même argument que dans le cas à 1 spin, $(S_a^+ + S_b^+)|v> = 0$ ssi $(\lambda + 1)\lambda = J$.Mais les valeurs propres de $S_a^z + S_b^z$ sont connus ce sont les $\lambda_a + \lambda_b$ donc sont des entiers plus petits que 2S. Un argument de dimension, (on remarque que $\sum_{k=0}^{2S}(2k+1) = (2S+1)^2$) nous permet d'affirmer que k parcours toutes les valeurs entre 0 et $2S$.

□

Remarque : le modèle d'Heisenberg fait apparaitre l'opérateur $S_a^x S_b^x + S_a^y S_b^y + S_a^z S_b^z = \frac{1}{2}(\vec{S_a} + \vec{S_b})^2 - S(S+1)$. en particulier la plus grande valeur propre est S^2 et sa plus petite $-S(S+1)$.

6.2.2 Rotation de spin

Soit $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$

$$S^{\vec{a}} =_{def} a_x S^x + a_y S^y + a_z S^z \tag{72}$$

propriété

$$[S^{\vec{a}}, S^{\vec{b}}] = i S^{\vec{a} \wedge \vec{b}} \tag{73}$$

Démonstration. vrai pour x,y,z plus linéarité. □

On pose $\Omega_{\vec{a}}$ la rotation dans $\mathbb{R}^3$ selon le vecteur $\vec{a}$.

Propriété

$$\exp(iS^(\vec{a}) S^{\vec{b}} \exp(-iS^(\vec{a}) = S^{\Omega_{\vec{a}}(\vec{b})} \tag{74}$$

démonstration :

$$\frac{d}{d\lambda}[\exp(i\lambda S^(\vec{a}) S^{\vec{b}} \exp(-i\lambda S^(\vec{a})] = i[\vec{a}, \exp(i\lambda S^(\vec{a}) S^{\vec{b}} \exp(-i\lambda S^(\vec{a})] \tag{75}$$

$$\frac{d}{d\lambda} S^{\Omega_{\lambda\vec{a}}(\vec{b})} = S^{\vec{a} \wedge \Omega_{\lambda\vec{a}}(\vec{b})} = i[S^{\vec{a}}, S^{\Omega_{\lambda\vec{a}}(\vec{b})}] \tag{76}$$

Donc $\exp(iS^(\vec{a}) S^{\vec{b}} \exp(-iS^(\vec{a})$ et $S^{\Omega_{\vec{a}}(\vec{b})}$ sont solution de la même équation différentielle avec même condition initiale. Il sont donc égaux.

Cas particulier.

$$\exp(i\pi S^y) S^x \exp(-i\pi S^y) = -S^x \exp(i\pi S^y) S^z \exp(-i\pi S^y) = -S^z \tag{77}$$

On pose E' le sous réseau de E tel que la somme des coordonné soit paire (cela contient un atome sur deux) et $R =_{def} \pi \sum_{a_i n E'} S^y_a$ Alors

$$\exp(iR) H \exp(-iR) = J \sum_{<a,b>} (S^x_a S^x_b + i S^y_a i S^y_b + S^z_a S^z_b) \tag{78}$$

7 ANNEXE Calcul

7.1 Double commutateur

on calcul ici le terme $< [S^z_k, [H, S^z_{-k}]] >$

$$\begin{aligned}
[H, S^z_{-k}] &= -J \sum_{<a,b>} \sum_c \exp(-ik.c)[S^x_a S^x_b + S^y_a S^y_b + S^z_a S^z_b, S^z_c] \\
&= -J \sum_{<a,b>} \exp(-ik.a)[S^x_a S^x_b + S^y_a S^y_b, S^z_a] + \exp(-ik.b)[S^x_a S^x_b + S^y_a S^y_b, S^z_b] \\
&= -2J \sum_{<a,b>} (-S^y_a S^x_b + S^x_a S^y_b) \exp(-ik.a)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
[S^z_k,[H,S^z_{-k}]] &= 2J\sum_{<a,b>}\sum_c [(-S^y_aS^x_b+S^x_aS^y_b),S^z_c]\exp(-ik.a)\exp(ik.c)\\
&= -2J\sum_{<a,b>}[(-S^y_aS^x_b+S^x_aS^y_b),S^z_a]+[(-S^y_aS^x_b+S^x_aS^y_b),S^z_b]\exp(-ik.(a-b))\\
&= 2J\sum_{<a,b>}(-S^x_aS^x_b-S^y_aS^y_b)+[(S^y_aS^y_b+S^x_aS^x_b)\exp(-ik.(a-b))\\
&= -2J\sum_{<a,b>}(S^x_aS^x_b+S^y_aS^y_b)(1-\exp(-ik.(a-b))
\end{aligned}
$$

Remarque

$$
<[S^z_k,[\beta H,S^z_{-k}]]>\leqslant \epsilon(k)2JS^2\beta \tag{79}
$$

Références

[1] Eric Carlen. http ://www.mathphys.org/AZschool/material/AZ09-carlen.pdf.

[2] Ueltschi Daniel. Inégalité de matrice et opérateur de spin.

[3] Ueltschi Daniel. Random loop representations for quantum spin systems, 2012. http ://arxiv.org/pdf/1301.0811v2.pdf.

[4] eugene R. speer. Failure of reflection positivity in the quantum heisenberg ferromagnet. 1985.

[5] Simon, Lieb, and Dyson. Phase transition in quantum spin systems with isotropic and nonisotropic interactions. 1978. J. Stat. Phys. 18, 335-383.

[6] Toth. transition de phase antiferromagnétique.