UCLouvain

FACULTE DES SCIENCES

Faculté des Sciences

Mesure Géométrique de l'Intrication de la Chaîne d'Ising Quantique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du grade académique de Master [120] en sciences physiques, finalité approfondie

Auteur : Simon Hermesse
Promoteur : Prof. Christian Walmsley Hagendorf
Lecteurs : Prof. Jan Govaerts, Prof. Philippe Ruelle
École de Physique, IRMP, GPP
Année académique 2024-2025

Remerciements

La réalisation d'un mémoire est un travail de longue haleine qui exige non seulement un effort personnel soutenu, mais aussi l'accompagnement de nombreuses personnes. C'est avec beaucoup de reconnaissance que je consacre ces quelques lignes à l'expression de mes plus sincères remerciements à tous ceux qui ont, de près ou de loin, contribué à l'aboutissement de ce projet.

En premier lieu, je souhaite remercier chaleureusement mon promoteur, le Professeur Christian Walmsley Hagendorf. Il m'a accordé un temps précieux tout au long de ce travail, en dépit de sa charge de travail conséquente. Sa supervision rigoureuse, ses relectures minutieuses et ses conseils avisés ont été essentiels dans l'élaboration de ce mémoire. Sa patience, son écoute et sa grande pédagogie m'ont permis d'aborder avec confiance chaque étape dans la réalisation de ce mémoire.

Je tiens également à exprimer toute ma gratitude aux Professeurs Philippe Ruelle et Jan Govaerts, mes lecteurs, pour avoir pris le temps d'analyser ce mémoire en détails et pour la qualité de leurs commentaires. Leurs observations judicieuses et constructives m'ont permis de l'améliorer significativement. Je leur en suis profondément reconnaissant.

Un très grand merci également à mes parents pour leur soutien indéfectible tout au long de ces années d'études. Bien que le sujet de ce mémoire ait parfois pu leur paraître lointain ou complexe, leur intérêt et leurs encouragements ont été des sources de motivation inestimables.

Enfin, je ne voudrais pas oublier de remercier mes camarades de cours, en particulier Chloé, Arthur, Nathan, Néot, Logan et Alexandre, avec qui j'ai partagé de nombreux moments de travail et de réflexion, mais aussi des moments de complicité. Ces années passées à leurs côtés ont non seulement été enrichissantes sur le plan académique, mais elles ont également forgé de précieuses amitiés.

Table des Matières

Remerciements . . . . . **i**

Table des Matières . . . . . **iii**

Table des Figures . . . . . **v**

Chapitre I
Introduction **1**

Chapitre II
Chaîne d'Ising Quantique **5**
2.1 Chaînes de spins quantiques 5
2.1.1 Chaîne XY quantique 5
2.1.2 Chaîne XX quantique 7
2.1.3 Chaîne d'Ising quantique 7
2.2 Diagonalisation exacte de la chaîne ouverte 7
2.2.1 Transformation de Jordan-Wigner 8
2.2.2 Transformation de Bogoliubov 11
2.2.3 État fondamental et états excités 13
2.3 Diagonalisation exacte de la chaîne périodique 14
2.3.1 Transformation de Jordan-Wigner 14
2.3.2 Transformation de Bogoliubov 17
2.3.3 Méthode équivalente de diagonalisation 18
2.4 Choix des conditions aux bords et limite thermodynamique 22

Chapitre III
Intrication Quantique **25**
3.1 Caractérisation de l'intrication quantique 25
3.1.1 États purs 25
3.1.2 États mixtes 26
3.2 Critères de séparabilité 27
3.2.1 Décomposition de Schmidt 27
3.2.2 Critère de Peres-Horodecki (P.P.T.) 30
3.3 Mesures de l'intrication quantique 31

3.3.1 Critères de définition 31
3.3.2 Entropie d'intrication 31
3.3.3 Mesure géométrique de l'intrication 32

Chapitre IV
Intrication de la Chaîne d'Ising Quantique 37
4.1 Intrication de l'état fondamental de la chaîne d'Ising périodique 37
4.1.1 Recouvrement et mesure géométrique de l'intrication 37
4.1.2 Limite thermodynamique de la densité d'intrication 40
4.1.3 Densité d'intrication des régimes limites 41
4.1.4 Résultats numériques pour N fini 42
4.1.5 Résultats numériques dans la limite thermodynamique 44
4.2 Intrication de l'état fondamental de la chaîne d'Ising ouverte 47
4.2.1 Résultats numériques pour N fini 47
4.3 Intrication de l'état fondamental de la chaîne XX 50
4.4 Intrication de l'état fondamental de la chaîne XY 51
4.5 Intrication du premier état excité de la chaîne d'Ising 53
4.5.1 Chaîne d'Ising périodique 53
4.5.2 Chaîne d'Ising ouverte 54

Chapitre V
Conclusion et Perspectives 55

Bibliographie 59

Annexe A
Diagonalisation de la Chaîne XX Quantique 63
A.1 Diagonalisation exacte de la chaîne ouverte 63
A.2 Diagonalisation exacte de la chaîne périodique 65

Table des Figures

2.1 Représentation informelle d'une chaîne de spins avec conditions aux bords ouvertes 6
2.2 Représentation informelle d'une chaîne de spins avec conditions aux bords périodiques 6
2.3 Spectre d'énergie $E = E(J, h)$ de la chaîne d'Ising ouverte, à $N = 4$ et $J = 1$ fixés 14
2.4 Spectre d'énergie $E = E(J, h)$ de la chaîne d'Ising périodique (secteur de Neveu-Schwarz), à $N = 4$ et $J = 1$ fixés 19

3.1 Représentation informelle de la distance d séparant $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ de son approximation séparable $|\phi\rangle \in \mathcal{S}$ 33

4.1 Densité d'intrication $\mathcal{E}_N = \mathcal{E}_N(J, h)$ de la chaîne d'Ising périodique pour $N = 4$. (a) En fonction de J. (b) À $J = 1$ fixé 43
4.2 Comparaison de la densité d'intrication $\mathcal{E}_N = \mathcal{E}_N(J, h)$ de la chaîne d'Ising périodique pour différentes valeurs finies de N, à $J = 1$ fixé 44
4.4 Densité d'intrication $\mathcal{E} = \mathcal{E}(J, h)$ de la chaîne d'Ising périodique pour $N = 10^3$. (a) En fonction de J. (b) Diagramme de phase. (c) À $J = 1$ fixé 45
4.5 Evolution du paramètre $\xi_{\max} = \xi_{\max}(J, h)$ de la chaîne d'Ising périodique, à $J = 1$ fixé et pour $N = 10^3$ 46
4.6 Graphe de la fonction $\partial_h \mathcal{E} = \partial_h \mathcal{E}(J, h)$ pour la chaîne d'Ising périodique, à $J = 1$ fixé et pour $N = 10^3$ 46
4.7 Densité d'intrication $\mathcal{E}_N = \mathcal{E}_N(J, h)$ de la chaîne d'Ising ouverte pour $N = 4$. (a) En fonction de J. (b) À $J = 1$ fixé 47
4.8 Evolution des paramètres $\xi_j^{(\max)} = \xi_j^{(\max)}(J, h)$ de la chaîne d'Ising ouverte, à $J = 1$ fixé et pour $N = 4$ 48
4.9 Evolution des paramètres $\delta_j^{(\max)} = \delta_j^{(\max)}(J, h)$ de la chaîne d'Ising ouverte, à $J = 1$ fixé et pour $N = 4$ 49
4.10 Comparaison de la densité d'intrication $\mathcal{E}_N = \mathcal{E}_N(J, h)$ de la chaîne d'Ising ouverte pour différentes valeurs finies de N, à $J = 1$ fixé 49
4.12 Densité d'intrication $\mathcal{E} = \mathcal{E}(J, h)$ de la chaîne XX périodique pour $N = 10^3$. (a) En fonction de J. (b) Diagramme de phase. (c) À $J = 1$ fixé 51
4.13 Graphe de la fonction $\partial_h \mathcal{E} = \partial_h \mathcal{E}(J, h)$ pour la chaîne XX périodique, à $J = 1$ fixé et pour $N = 10^3$ 52

4.14 Densité d'intrication $\mathcal{E} = \mathcal{E}(J, h, \gamma)$ de la chaîne XY périodique, à $J = 1$ fixé et pour $N = 10^3$. (a) Graphe de la fonction. (b) Diagramme de phase 52
4.15 Comparaison de la densité d'intrication $\mathcal{E}_N$ du premier état excité de la chaîne d'Ising périodique pour différentes valeurs finies de N, à $J = 1$ fixé . 53
4.16 Comparaison de la densité d'intrication $\mathcal{E}_N$ du premier état excité de la chaîne d'Ising ouverte pour différentes valeurs finies de N, à $J = 1$ fixé . . 54

A.1 Spectre d'énergie $E = E(J, h)$ de la chaîne XX ouverte, à $N = 4$ et $J = 1$ fixés 66
A.2 Spectre d'énergie $E = E(J, h)$ de la chaîne XX périodique, à $N = 4$ et $J = 1$ fixés 68

Chapitre I

Introduction

Le modèle d'Ising (classique), proposé en 1920 par Lenz et approfondi en 1925 par son étudiant de thèse Ising dans le cadre de l'étude du ferromagnétisme [1], est l'un des piliers fondamentaux de la physique statistique moderne. Il constitue un paradigme à la fois simple et universel pour appréhender les transitions de phase, les interactions entre particules et les phénomènes ferromagnétiques dans les matériaux. Dans sa formulation classique, le modèle d'Ising s'apparente à un "toy model", c'est-à-dire un modèle simplifié d'un système, conçu pour en capturer les caractéristiques essentielles, tout en restant suffisamment maniable pour se prêter à une approche analytique. Il décrit un ensemble de spins localisés sur les sites d'un réseau cristallin, interagissant avec leurs plus proches voisins. Malgré son apparente simplicité, le modèle d'Ising capture des comportements complexes, tels que l'émergence spontanée d'une aimantation à basse température et l'apparition de transitions de phase dans certaines dimensions [2, 3]. Ces propriétés remarquables lui ont permis d'être au cœur de nombreux ouvrages scientifiques depuis son invention.

Le modèle quantique de Heisenberg, quant à lui, constitue une famille de modèles développés pour décrire, dans le formalisme de la mécanique quantique, les interactions magnétiques dans les matériaux, notamment les points critiques et les transitions de phase [4]. Parmi cette classe de modèles, une attention particulière s'est développée autour des systèmes unidimensionnels de spins 1/2 : ils sont appelés chaînes de spins quantiques. La chaîne XXZ, la chaîne XY anisotrope ou encore la chaîne d'Ising en sont des exemples, qui ont fait l'objet d'études intensives depuis les années 1960. Comme l'ont rapidement compris Baxter, Lieb, Schultz et Mattis [5, 6], ces modèles présentent l'intérêt majeur d'appartenir à la classe restreinte de modèles quantiques exactement solubles de la théorie des systèmes quantiques à plusieurs corps [7].

La chaîne d'Ising quantique est un cas particulier de la chaîne XY anisotrope (en champ transversal) dont l'intérêt n'a cessé de croître ces dernières décennies, notamment en raison de la simplicité de son formalisme et de la présence d'une transition de phase purement quantique dans la limite thermodynamique [8]. L'étude de ce type de comportement critique constitue un domaine de recherche très actif de la physique de la matière condensée et il s'avère que l'intrication quantique permet, entre autres, d'en caractériser certaines propriétés [9]. Dans son travail fondateur de 1970 [10], Pfeuty établit

les fonctions de corrélation, les composantes de l'aimantation et met en évidence l'existence d'un champ magnétique critique marquant l'apparition d'un ordre à longue portée dans l'état fondamental. Il a ouvert la voie aux recherches contemporaines. Ce mémoire s'inscrit dans cette lignée en se concentrant plus particulièrement sur les propriétés d'intrication de la chaîne d'Ising quantique.

Un autre concept fondamental de la physique moderne est celui d'intrication quantique, sans doute l'une des manifestations les plus fascinantes et contre-intuitives de la mécanique quantique. Introduite au début du 20$^{\text{ème}}$siècle par Einstein, Podolsky et Rosen en tant qu'expérience de pensée visant à réfuter l'interprétation de l'Ecole de Copenhague de la mécanique quantique [11], l'intrication quantique se manifeste par des corrélations entre états de systèmes physiques qui ne peuvent être expliquées par une théorie classique locale. Plus précisément, la mesure d'une observable sur une partie d'un système intriqué peut influencer instantanément les résultats de mesure sur une autre partie du système, indépendamment de la distance les séparant. Ce phénomène, qui heurtait initialement les intuitions physiques traditionnelles, est aujourd'hui notamment reconnu comme une ressource essentielle de la théorie de l'information quantique [12].

Proposé dès 2002 comme signature des transitions de phase quantiques [13], le concept d'intrication s'est depuis imposé comme un puissant outil dans l'étude des phénomènes critiques et a été intensivement investigué dans le cadre des systèmes de la physique de la matière condensée, puisque ceux-ci sont considérés comme candidats potentiels dans le développement de technologies quantiques [14]. La caractérisation quantitative de l'intrication reste un domaine de recherche actif, ayant donné naissance à plusieurs mesures spécifiques [9] : entropie d'intrication, négativité, concurrence et mesure géométrique globale de l'intrication, entre autres. Ces différentes observables ont permis d'accumuler de nombreuses connaissances sur les systèmes quantiques bipartis et multipartis, bien qu'une compréhension complète de leurs propriétés et de leur portée physique demeure un objectif [15]. Dans ce travail, nous présentons deux observables permettant de quantifier le degré d'intrication : l'entropie d'intrication — première observable étudiée dans le contexte de la physique de la matière condensée — et la mesure géométrique de l'intrication, une observable relativement récente. Ce mémoire est consacré au calcul de cette dernière au sein de la chaîne d'Ising quantique.

L'organisation du manuscrit est la suivante. Le **chapitre 2** introduit la chaîne XY en champ transversal et son cas particulier, la modèle d'Ising quantique. Nous présentons la diagonalisation complète du modèle via les transformations de Jordan-Wigner et Bogoliubov, en considérant deux conditions aux bords : ouvertes et périodiques. Pour chacune d'entre elles, l'état fondamental et la construction de l'ensemble des états excités du hamiltonien sont discutés. Enfin, nous analysons brièvement les propriétés des deux régimes limites (ferromagnétique et paramagnétique) du modèle et de son comportement critique dans la limite thermodynamique.

Le **chapitre 3** est consacré à l'intrication quantique. Nous la définissons formellement et en donnons des exemples simples inspirés par le formalisme développé au chapitre 2. Des critères de séparabilité d'états purs et mixtes sont présentés. Deux mesures de l'intrication — l'une bipartie et l'autre multipartie — sont alors introduites : l'entropie et la mesure géométrique de l'intrication. La dérivation de l'expression de cette dernière est présentée d'un point de vue géométrique pour les états purs, puis étendue au cas d'états mixtes.

Dans le **chapitre 4**, nous présentons les résultats obtenus, à la fois analytiquement et numériquement, pour la mesure géométrique de l'intrication de l'état fondamental de la chaîne d'Ising quantique. Nous examinons séparément les cas de conditions aux bords ouvertes et périodiques, en distinguant les systèmes de taille finie de la limite thermodynamique. La dérivée de la densité d'intrication est également étudiée afin de caractériser la transition de phase quantique du modèle. Une comparaison avec les chaînes XX et XY est proposée. Enfin, pour conclure notre analyse, nous présentons les résultats obtenus pour la mesure géométrique de l'intrication du premier état excité de la chaîne d'Ising.

Chapitre II

Chaîne d'Ising Quantique

L'objectif de ce chapitre est double. D'une part, il s'agit de réaliser la diagonalisation exacte du modèle d'Ising en champ transversal, et d'autre part, de discuter brièvement son comportement critique. Pour ce faire, nous introduisons dans un premier temps le modèle en question, en partant de la chaîne XY anisotrope. Des conditions aux bords ouvertes et périodiques sont traitées. Ensuite, nous présentons les transformations de Jordan-Wigner et de Bogoliubov, et les appliquons au modèle d'Ising afin d'en réaliser la diagonalisation. L'état fondamental et les états excités du hamiltonien sont ainsi déterminés. Enfin, nous décrivons qualitativement le comportement du système dans la limite thermodynamique, notamment la transition de phase quantique qu'il présente.

2.1 Chaînes de spins quantiques

2.1.1 Chaîne XY quantique. La *chaîne XY anisotrope en champ transversal* est une famille de modèles quantiques décrivant les interactions entre des particules de spin 1/2 [7]. Dans la suite, nous nous restreignons au cas unidimensionnel. Nous supposons qu'elle est constituée de N sites et est soumise à un champ magnétique externe. En tout site $j \in \{1, \dots, N\}$ se trouve une particule de spin 1/2 décrite par un opérateur de spin S_j^a, $a \in \{x, y, z\}$, interagissant avec ses plus proches voisins. Il s'avère que la littérature regorge de conventions différentes quant à l'expression de l'opérateur hamiltonien de ce système. Celle que nous adoptons dans ces notes est la suivante :

$$H_{\mathrm{XY}} = -\sum_j J_x S_j^x S_{j+1}^x + J_y S_j^y S_{j+1}^y - h \sum_j S_j^z. \tag{2.1}$$

Le premier terme, souvent appelé "hopping term", correspond à l'interaction entre les plus proches voisins dans le plan Oxy, tandis que le second représente l'interaction avec le champ magnétique externe $\vec{H} = h\,\hat{e}_z$. Ici, $J_x, J_y \in \mathbb{R}$ sont souvent définies par

$$J_x = J(1+\gamma), \quad J_y = J(1-\gamma),$$

avec $\gamma \in [0, 1]$ un paramètre d'anisotropie et $J \in \mathbb{R}$ une constante de couplage, parfois appelée intégrale d'échange. Le cas $J > 0$ (resp. $J < 0$) correspond au régime ferromagnétique (resp. antiferromagnétique). Dans la suite, nous adoptons la convention $J, h > 0$.

L'état de spin en un site $j \in \{1, \dots, N\}$ appartient à un espace de Hilbert local $\mathcal{H}_j = \mathbb{C}^2$, dont la base est notée $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, avec

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Ainsi, S_j^a est représenté par l'opérateur σ_j^a, avec $a \in \{x, y, z\}$, et correspond à l'action de la matrice de Pauli σ^a sur le $j^{\text{ème}}$ site, c'est-à-dire

$$\sigma_j^a = \underbrace{\mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}}_{j-1} \otimes \sigma^a \otimes \underbrace{\mathbb{I} \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}}_{N-j},$$

avec $\mathbb{I}$ la matrice identité et

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

En conséquence, l'opérateur hamiltonien (2.1) agit sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = \bigotimes_{j=1}^N \mathcal{H}_j = (\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$, de dimension 2^N.

La première sommation sur j apparaissant dans l'expression (2.1) dépend du choix des conditions aux bords. Dans le cadre de ce travail, nous considérons uniquement deux telles conditions : ouvertes et périodiques. Les conditions aux bords ouvertes correspondent à la situation où le premier et le dernier spins du réseau ne peuvent interagir, comme l'illustre la Fig. 2.1.

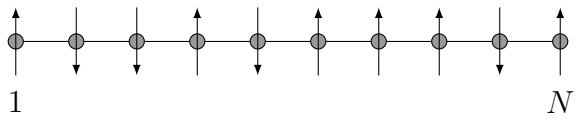


FIGURE 2.1 – Représentation informelle d'une chaîne de spins avec conditions aux bords ouvertes

Les conditions aux bords périodiques consistent quant à elles à imposer que le premier et le dernier spins soient voisins, c'est-à-dire à effectuer l'identification

$$\sigma_{N+1}^a = \sigma_1^a$$

pour tout $a \in \{x, y, z\}$. Ce type de conditions aux bords est illustré sur la Fig. 2.2.

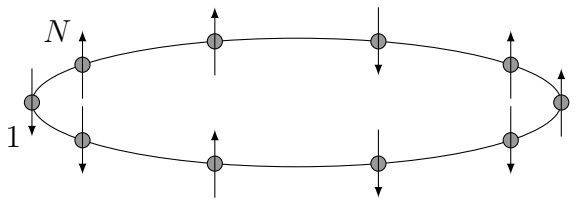


FIGURE 2.2 – Représentation informelle d'une chaîne de spins avec conditions aux bords périodiques

La chaîne XY a été étudiée en détails dans un célèbre article rédigé par les chercheurs Lieb, Schultz et Mattis [5]. Ils en ont, entre autres, réalisé la diagonalisation, calculé l'énergie libre et les fonctions de corrélation.

2.1.2 Chaîne XX quantique. Un cas particulier de la chaîne XY, dont l'étude se révèle en pratique plus aisée, correspond à sa limite isotrope $J_x = J_y$. Dans ce cas, $\gamma = 0$ et l'on parle du *modèle XX*. Il appartient cependant à une classe d'universalité différente de celle de la chaîne XY et du modèle d'Ising. Le hamiltonien (2.1) s'écrit dans cette limite

$$H_{\mathrm{XX}} = -\frac{J}{4}\sum_j \sigma_j^x\sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y\sigma_{j+1}^y - \frac{h}{2}\sum_j \sigma_j^z. \tag{2.2}$$

De nombreux articles sont consacrés à l'étude de ce modèle [16, 17]. En particulier, l'absence d'anisotropie rend sa diagonalisation relativement immédiate (voir l'annexe A). Par ailleurs, il a la propriété de présenter une transition de phase quantique dans la limite thermodynamique, caractérisée par un changement brutal dans la nature de son état fondamental. Ce comportement critique est discuté dans le chapitre 4.

2.1.3 Chaîne d'Ising quantique. La chaîne de spins quantique à laquelle nous nous intéressons particulièrement dans ce travail est celle dite de *chaîne* (ou modèle) *d'Ising quantique en champ transversal*. Le hamiltonien de cette chaîne correspond à celui de la chaîne XY lorsque l'anisotropie est maximale ($\gamma = 1$), à savoir

$$H_{\mathrm{Ising}} = -\frac{J}{2}\sum_j \sigma_j^x\sigma_{j+1}^x - \frac{h}{2}\sum_j \sigma_j^z. \tag{2.3}$$

Ce modèle est également un célèbre exemple de système quantique à N exactement soluble. Il présente lui aussi une transition de phase quantique au voisinage d'une valeur critique h_c du champ magnétique, discutée dans la section 2.4 et le chapitre 4.

L'étude des propriétés physiques du modèle d'Ising en champ transversal nécessite de déterminer les états propres et le spectre de son hamiltonien (2.3), et donc, de le diagonaliser. Les sections qui suivent sont consacrées à cet objectif.

2.2 Diagonalisation exacte de la chaîne ouverte

Dans le cas de conditions aux bords ouvertes, le hamiltonien de la chaîne d'Ising quantique s'écrit

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j^x\sigma_{j+1}^x - \frac{h}{2}\sum_{j=1}^{N} \sigma_j^z. \tag{2.4}$$

2.2.1 Transformation de Jordan-Wigner. La première étape dans la diagonalisation de (2.4) consiste à effectuer la transformation de Jordan-Wigner [18]. Il s'agit d'une transformation associant à un système de spins en interaction un système de fermions libres (sans interaction) et sans spin. Pour ce faire, rappelons l'expression des opérateurs d'échelle :

$$\sigma^+ = \frac{1}{2}(\sigma^x + \mathrm{i}\sigma^y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^- = \frac{1}{2}(\sigma^x - \mathrm{i}\sigma^y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.5}$$

Ils agissent sur les états de spin en élevant et abaissant leur spin :

$$\sigma^+|\uparrow\rangle = 0, \quad \sigma^+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle, \quad \sigma^-|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle, \quad \sigma^-|\downarrow\rangle = 0.$$

Les relations inverses

$$\sigma^x = \sigma^+ + \sigma^-, \quad \sigma^y = \mathrm{i}\Big(\sigma^- - \sigma^+\Big),$$

permettent d'écrire le hamiltonien (2.4) sous la forme

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j^+\sigma_{j+1}^+ + \sigma_j^+\sigma_{j+1}^- + \sigma_j^-\sigma_{j+1}^+ + \sigma_j^-\sigma_{j+1}^- - \frac{h}{2}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^z. \tag{2.6}$$

La *transformation de Jordan-Wigner* est alors définie pour tout $j \in \{1, \dots, N\}$ par les opérateurs

$$c_j = (-1)^{j-1}\left(\prod_{m=1}^{j-1}\sigma_m^z\right)\sigma_j^-, \quad c_j^\dagger = (-1)^{j-1}\left(\prod_{m=1}^{j-1}\sigma_m^z\right)\sigma_j^+, \tag{2.7}$$

avec la convention

$$\prod_{m=1}^{j-1}\sigma_m^z = \mathbb{I} \text{ pour } j = 1.$$

Plus formellement,

$$c_j = (-1)^{j-1}\left(\bigotimes_{m=1}^{j-1}\sigma_m^z\right) \otimes \sigma_j^- \otimes \left(\bigotimes_{m=j+1}^{N}\mathbb{I}_m\right).$$

Il n'est pas difficile d'inverser les relations (2.7). Soulignons par ailleurs la non localité par rapport aux variables de spin de cette transformation, et ce, en raison de la présence du facteur $\prod_{m=1}^{j-1}\sigma_m^z$, souvent appelé corde de Jordan-Wigner. Ces opérateurs sont dits *fermioniques*, en ce sens qu'ils satisfont les relations d'anticommutation canoniques suivantes :

Proposition 2.1 (Relations d'anticommutation canoniques). *Les opérateurs* (2.7) *satisfont pour tous* $i, j \in \{1, \dots, N\}$ *:*

$$\Big\{c_i, c_j^\dagger\Big\} = \delta_{i,j}, \quad \{c_i, c_j\} = \Big\{c_i^\dagger, c_j^\dagger\Big\} = 0. \tag{2.8}$$

Démonstration. Montrons la première identité de (2.8). Soit $i \in \{1, \ldots, N-1\}$ tel que $i < j$. Remarquons que

$$\left[\sigma_i^-, \sigma_n^z\right] = \begin{cases} 0, & i \neq n, \\ 2\sigma_i^-, & i = n, \end{cases}$$

et que $[\sigma_m^z, \sigma_n^z] = 0$ pour tous $m, n \in \{1, \ldots, N\}$. Par conséquent,

$$\begin{aligned}\left\{c_i, c_j^\dagger\right\} &= (-1)^{i+j-2}\left[\left(\prod_{m=1}^{i-1}\sigma_m^z\right)\sigma_i^-\left(\prod_{n=1}^{j-1}\sigma_n^z\right)\sigma_j^+ + \left(\prod_{n=1}^{j-1}\sigma_n^z\right)\sigma_j^+\left(\prod_{m=1}^{i-1}\sigma_m^z\right)\sigma_i^-\right] \\ &= (-1)^{i+j-2}\left[\left(\prod_{m=1}^{i-1}\sigma_m^z\right)\left(\prod_{\substack{n=1\\n\neq i}}^{j-1}\sigma_n^z\right)(2+\sigma_i^z)\sigma_i^-\sigma_j^+ + \left(\prod_{m=1}^{i-1}\sigma_m^z\right)\left(\prod_{\substack{n=1\\n\neq i}}^{j-1}\sigma_n^z\right)\sigma_i^z\sigma_j^+\sigma_i^-\right].\end{aligned}$$

Or, puisque $\sigma_i^z\sigma_i^- = -\sigma_i^-$ et $\left[\sigma_j^+, \sigma_i^-\right] = 0$ pour tout $i \neq j$, il s'ensuit

$$\begin{aligned}\left\{c_i, c_j^\dagger\right\} &= (-1)^{i+j-2}\left(\prod_{m=1}^{i-1}\sigma_m^z\right)\left(\prod_{\substack{n=1\\n\neq i}}^{j-1}\sigma_n^z\right)\left[\sigma_i^-\sigma_j^+ - \sigma_i^-\sigma_j^+\right] \\ &= 0.\end{aligned}$$

Le cas $i > j$ se traite de façon similaire. Supposons maintenant que $i = j$. Pour les mêmes raisons que ci-dessus, nous avons

$$\left\{c_i, c_i^\dagger\right\} = (-1)^{2i-2}\left(\prod_{m=1}^{i-1}\sigma_m^z\right)^2\left[\sigma_i^-\sigma_i^+ + \sigma_i^+\sigma_i^-\right].$$

La propriété $(\sigma^a)^2 = \left\{\sigma_i^-, \sigma_i^+\right\} = \mathbb{I}$ satisfaite pour tout $a \in \{x, y, z\}$ nous permet de conclure que

$$\left\{c_i, c_i^\dagger\right\} = \mathbb{I}.$$

La seconde identité de (2.8) se démontre de façon identique. □

Une conséquence immédiate des relations (2.8) est le caractère nilpotent des opérateurs de Jordan-Wigner :

$$(c_j)^2 = \left(c_j^\dagger\right)^2 = 0, \quad j \in \{1, \ldots, N\}. \tag{2.9}$$

Nous interprétons c_j (resp. $c_j^\dagger$) comme un opérateur d'annihilation (resp. de création) d'un fermion sans spin sur le $j^{\text{ème}}$site de la chaîne. Observons que

$$c_j^\dagger c_j = \sigma_j^+\sigma_j^- = \frac{1}{2}\left(\sigma_j^z + \mathbb{I}\right),$$

d'où

$$\sigma_j^z = 2c_j^\dagger c_j - \mathbb{I}. \tag{2.10}$$

Une définition équivalente des opérateurs de Jordan-Wigner, parfois plus pratique à manipuler [19], est la suivante :

Proposition 2.2. *Pour tout $j \in \{1, \dots, N\}$, on a*

$$c_j = \exp\left(\mathrm{i}\pi \sum_{m=1}^{j-1} \sigma_m^+ \sigma_m^-\right) \sigma_j^-, \quad c_j^\dagger = \sigma_j^+ \exp\left(-\mathrm{i}\pi \sum_{m=1}^{j-1} \sigma_m^+ \sigma_m^-\right). \tag{2.11}$$

Démonstration. Montrons la première identité de (2.11). Nous avons

$$\begin{aligned} \exp\left(\mathrm{i}\pi \sum_{m=1}^{j-1} \sigma_m^+ \sigma_m^-\right) \sigma_j^- &= \prod_{m=1}^{j-1} \exp\bigl(\mathrm{i}\pi \sigma_m^+ \sigma_m^-\bigr) \sigma_j^- \\ &= \prod_{m=1}^{j-1} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}\pi)^k}{k!} \bigl(\sigma_m^+ \sigma_m^-\bigr)^k\right) \sigma_j^-. \end{aligned}$$

Par convention, $(\sigma_m^+ \sigma_m^-)^0 = \mathbb{I}$ et il n'est pas difficile de montrer que pour tout $k > 0$, $(\sigma_m^+ \sigma_m^-)^k = \sigma_m^+ \sigma_m^-$. De ce fait, et en vertu de la relation (2.10),

$$\begin{aligned} \exp\left(\mathrm{i}\pi \sum_{m=1}^{j-1} \sigma_m^+ \sigma_m^-\right) \sigma_j^- &= \prod_{m=1}^{j-1} \bigl(\mathbb{I} - 2\sigma_m^+ \sigma_m^-\bigr) \sigma_j^- \\ &= (-1)^{j-1} \left(\prod_{m=1}^{j-1} \sigma_m^z\right) \sigma_j^-, \end{aligned}$$

ce qui conclut la démonstration. La seconde identité de (2.11) s'obtient par conjugaison hermitienne de la première. □

À partir des définitions (2.7) ou (2.11) et des relations d'anticommutation (2.8), nous obtenons

$$\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^+ = c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger, \quad \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- = c_j^\dagger c_{j+1}, \quad \sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ = -c_j c_{j+1}^\dagger, \quad \sigma_j^- \sigma_{j+1}^- = -c_j c_{j+1},$$

auquel cas le hamiltonien (2.6) devient

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{j=1}^{N-1} c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j + c_{j+1} c_j - h \sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_j + \frac{hN}{2} \mathbb{I}. \tag{2.12}$$

Il s'agit d'une forme quadratique en les opérateurs de Jordan-Wigner. Il existe une méthode générale de diagonalisation de telles formes, due à Lieb, Schultz et Mattis [5], et discutée dans le cadre du modèle d'Ising par Pfeuty [10].

2.2.2 Transformation de Bogoliubov. La technique de Lieb, Schultz et Mattis consiste à effectuer la transformation de Bogoliubov des opérateurs de Jordan-Wigner [3, 20, 21]. Pour ce faire, remarquons que (2.12) peut s'écrire sous la forme

$$H = \sum_{i,j=1}^{N} c_i^\dagger A_{ij} c_j + \frac{1}{2}\big(c_i^\dagger B_{ij} c_j^\dagger - c_i B_{ij} c_j\big) + \frac{hN}{2}\mathbb{I},$$

où $A, B \in \mathbb{R}^{N,N}$ sont des matrices hermitienne et antisymétrique, respectivement, données par

$$A = \begin{pmatrix} -h & -J/2 & 0 & \dots & 0 \\ -J/2 & -h & -J/2 & \dots & 0 \\ 0 & -J/2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -J/2 \\ 0 & 0 & 0 & -J/2 & -h \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & -J/2 & 0 & \dots & 0 \\ +J/2 & 0 & -J/2 & \dots & 0 \\ 0 & +J/2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -J/2 \\ 0 & 0 & 0 & +J/2 & 0 \end{pmatrix}.$$

L'objectif est d'écrire ce hamiltonien sous la forme diagonale suivante :

$$H = 2\sum_{k} \lambda_k \eta_k^\dagger \eta_k + C\,\mathbb{I}, \tag{2.13}$$

où λ_k est l'énergie fermionique du mode k et $C \in \mathbb{R}$ une constante à déterminer. Ici,

$$\eta_k = \sum_{i=1}^{N} g_{ki} c_i + h_{ki} c_i^\dagger, \quad \eta_k^\dagger = \sum_{i=1}^{N} g_{ki} c_i^\dagger + h_{ki} c_i \tag{2.14}$$

sont les opérateurs définissant la *transformation de Bogoliubov* et g_{ki}, h_{ki} sont des fonctions que l'on peut choisir réelles au besoin. Pour que la transformation soit canonique (c'est-à-dire que les opérateurs de Bogoliubov soient fermioniques), il nous faut imposer

$$\sum_{i=1}^{N} g_{ki} g_{k'i} + h_{ki} h_{k'i} = \delta_{k,k'}, \quad \sum_{i=1}^{N} g_{ki} h_{k'i} - g_{k'i} h_{ki} = 0.$$

Si la diagonalisation de H sous la forme (2.13) est possible, alors nous devons avoir

$$[\eta_k, H] - \lambda_k \eta_k = 0.$$

Substituant les expressions (2.14) dans cette relation, il vient

$$\lambda_k g_{ki} = \sum_{j=1}^{N} g_{kj} A_{ji} - h_{kj} B_{ji}, \quad \lambda_k h_{ki} = \sum_{j=1}^{N} g_{kj} B_{ji} - h_{kj} A_{ji}. \tag{2.15}$$

Si l'on introduit maintenant les combinaisons linéaires

$$\phi_{ki} = g_{ki} + h_{ki}, \quad \psi_{ki} = g_{ki} - h_{ki},$$

les équations couplées (2.15) s'écrivent, sous forme matricielle,

$$\phi_k(A-B) = \lambda_k \psi_k, \quad \psi_k(A+B) = \lambda_k \phi_k.$$

En éliminant soit ϕ_k, soit ψ_k des équations précédentes, on obtient le problème aux valeurs propres

$$\phi_k(A-B)(A+B) = \lambda_k^2 \phi_k,$$

ou encore

$$\psi_k(A+B)(A-B) = \lambda_k^2 \psi_k.$$

La résolution du problème est donc réduite à la diagonalisation de l'une des matrices des excitations $(A-B)(A+B)$ et $(A+B)(A-B)$, disons la première.

En toute généralité, puisque A est toujours symétrique et B antisymétrique [1], les matrices $(A-B)(A+B)$ et $(A+B)(A-B)$ sont toujours symétriques et au minimum définies semi-positives. En conséquence, les énergies λ_k sont réelles et les $2N$ vecteurs propres ϕ_k et ψ_k peuvent être choisis réels et orthogonaux. De plus, si les vecteurs ϕ_k sont normés, alors les vecteurs ψ_k le sont également. Pour la chaîne d'Ising ouverte, nous avons explicitement

$$(A-B)(A+B) = \begin{pmatrix} h^2 & Jh & 0 & \dots & 0 \\ Jh & J^2+h^2 & Jh & 0 & 0 \\ 0 & Jh & J^2+h^2 & \ddots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & Jh \\ 0 & 0 & 0 & Jh & J^2+h^2 \end{pmatrix}.$$

Il s'agit d'une matrice tridiagonale particulière dont la diagonalisation est connue [22, 23]. La résolution d'une équation de récurrence permet de résoudre le problème aux valeurs propres correspondant (voir par exemple l'annexe A) et fournit les vecteurs et valeurs propres

$$(\phi_k)_j = N_k \sin(jk), \quad \lambda_k^2 = J^2 + h^2 + 2Jh\cos k,$$

où N_k est un facteur de normalisation et les valeurs permises pour k sont quantifiées : elles correspondent aux N solutions de l'équation

$$J\sin(Nk) + h\sin((N+1)k) = 0. \tag{2.16}$$

Finalement, la constante C dans (2.13) s'obtient de l'invariance de $\mathrm{Tr}(H)$ sous la transformation de Bogoliubov. Elle est donnée par

$$C = \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{N} A_{ii} - \sum_k \lambda_k\right) + \frac{hN}{2}.$$

1. En effet, en imposant l'hermiticité d'une matrice hamiltonienne quadratique générale $H = c^\dagger A c + \frac{1}{2}\left(c^\dagger B c^\dagger - cBc\right)$, il vient d'emblée $A^\dagger = A$ et $B^\dagger = -B$. Dans la situation qui nous occupe, nous pouvons faire en sorte que A et B soient réelles [5].

Par conséquent, le hamiltonien du modèle d'Ising avec conditions aux bords ouvertes prend la forme diagonale

$$H = 2\sum_k \lambda_k \eta_k^\dagger \eta_k + E_0\,\mathbb{I}, \tag{2.17}$$

avec

$$\lambda_k = \sqrt{J^2 + h^2 + 2Jh\cos k}, \quad E_0 = -\sum_k \lambda_k.$$

2.2.3 État fondamental et états excités. Observons que pour tout k satisfaisant (2.16) et $J, h > 0$, nous avons $\lambda_k \geq 0$. On en déduit que l'état fondamental $|\psi_0\rangle$ du hamiltonien (2.17) est l'état de vide de Bogoliubov, satisfaisant pour tout k,

$$\eta_k|\psi_0\rangle = 0, \tag{2.18}$$

et d'énergie $E_0 = -\sum_k \lambda_k$. Autrement dit, l'état fondamental de la chaîne d'Ising ouverte correspond à un état où il n'y a aucun η-fermion sur celle-ci [3, 8]. Toutefois, en vertu des relations (2.14), il est clair que $|\psi_0\rangle \neq |0\rangle$, où $|0\rangle = \bigotimes_{j=1}^N |{\downarrow_j}\rangle$ dénote l'état de vide des c-fermions (satisfaisant $c_j|0\rangle = 0$ pour tout $j \in \{1, \ldots, N\}$). En termes de cet état, il est donné par

$$|\psi_0\rangle = \prod_{k>0} \eta_{-k}\eta_k|0\rangle.$$

Les états propres de (2.17) sont construits par action des opérateurs de création de Bogoliubov sur l'état fondamental. Ainsi, un état excité à m η-fermions est donné par

$$|\psi\rangle = \prod_{j=1}^m \eta_{k_j}^\dagger |\psi_0\rangle,$$

où $k_i \neq k_j$ pour tout $i \neq j$, et dont l'énergie est

$$E = \sum_{j=1}^m 2\lambda_{k_j} + E_0.$$

En effet, avec les relations d'anticommutation canoniques

$$\left\{\eta_k, \eta_{k'}^\dagger\right\} = \delta_{k,k'}, \quad \{\eta_k, \eta_{k'}\} = \left\{\eta_k^\dagger, \eta_{k'}^\dagger\right\} = 0$$

et l'équation (2.18), il n'est pas difficile de montrer que

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle &= 2\sum_k \lambda_k \eta_k^\dagger \prod_{j=1}^m \left(\delta_{k,k_j} - \eta_{k_j}^\dagger \eta_k\right)|\psi_0\rangle + E_0 \prod_{j=1}^m \eta_{k_j}^\dagger |\psi_0\rangle \\ &= \left(\sum_{j=1}^m 2\lambda_{k_j} + E_0\right)|\psi\rangle. \end{aligned}$$

Le spectre du hamiltonien (2.17) est illustré sur la Fig. 2.3. Il correspond identiquement au spectre que l'on obtient numériquement à partir du hamiltonien non diagonal (2.4).

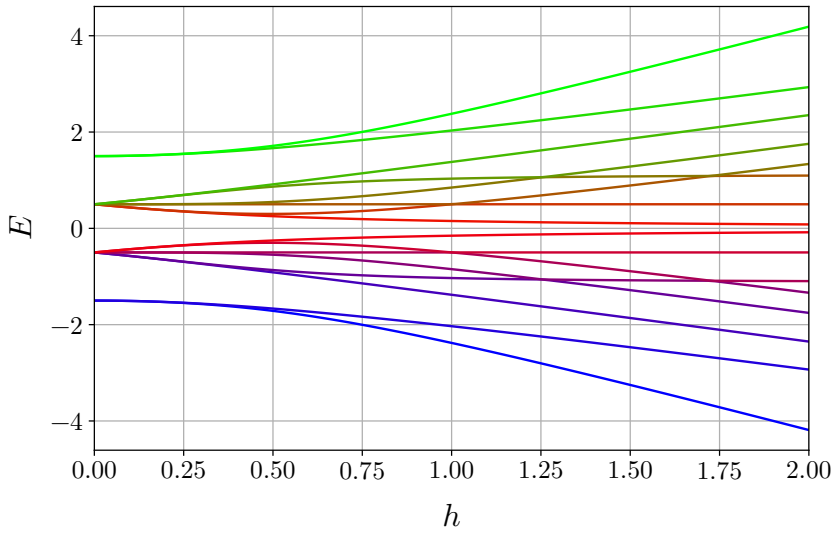


FIGURE 2.3 – Spectre d'énergie $E = E(J, h)$ de la chaîne d'Ising ouverte, à $N = 4$ et $J = 1$ fixés

2.3 Diagonalisation exacte de la chaîne périodique

La méthode de Lieb, Schultz et Mattis [5] introduite dans la section précédente permet également de diagonaliser le modèle d'Ising avec conditions aux bords périodiques. Cependant, pour ce choix de conditions, il apparait une subtilité dans la transformation de Jordan-Wigner. Le hamiltonien que nous considérons désormais est

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x - \frac{h}{2}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^z. \tag{2.19}$$

Observons que contrairement à celui de la chaîne ouverte (2.12), ce hamiltonien est invariant sous translation des spins du système, définie par l'opérateur $T \in \mathrm{End}(\mathcal{H})$ tel que pour tous $j \in \{1, \dots, N\}$ et $a \in \{x, y, z\}$,

$$T\sigma_j^a T^{-1} = \sigma_{j+1}^a \pmod N.$$

2.3.1 Transformation de Jordan-Wigner. Tout comme c'était le cas pour les conditions aux bords ouvertes, nous souhaitons dans un premier temps exprimer le hamiltonien (2.19) en termes des opérateurs définis par (2.7) (ou encore (2.11)). Pour ce

faire, nous l'exprimons d'abord en termes des opérateurs d'échelle :

$$\begin{aligned} H = &-\frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N-1}\sigma_j^+\sigma_{j+1}^+ + \sigma_j^+\sigma_{j+1}^- + \sigma_j^-\sigma_{j+1}^+ + \sigma_j^-\sigma_{j+1}^- - \frac{h}{2}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^z \\ &-\frac{J}{2}\Big(\sigma_N^+\sigma_1^+ + \sigma_N^+\sigma_1^- + \sigma_N^-\sigma_1^+ + \sigma_N^-\sigma_1^-\Big). \end{aligned} \tag{2.20}$$

Le terme de bords qui apparaît dans cette expression doit être traité avec prudence. Introduisons l'opérateur du *nombre de fermions*, défini par

$$F = \sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_j.$$

Ses valeurs propres sont notées $f \in \{0, \dots, N\}$. Nous dénotons par $\mathcal{H}_f \subset \mathcal{H}$ le sous-espace de Hilbert à f fermions. Clairement, nous avons la décomposition

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{f=0}^{N} \mathcal{H}_f.$$

Notons que dans chaque sous-espace $\mathcal{H}_f$, nous pouvons faire l'identification

$$(-1)^{N+F} = (-1)^{N+f}.$$

Cet opérateur, appelé *opérateur de parité*, joue un rôle important dans la diagonalisation du modèle, notamment grâce au résultat suivant :

Proposition 2.3. *On a*

$$\prod_{j=1}^{N}\sigma_j^z = (-1)^{N+F}. \tag{2.21}$$

Démonstration. Partant de l'identité

$$\exp\Big(\mathrm{i}\theta\sigma_j^z\Big) = \cos\theta\,\mathbb{I} + \mathrm{i}\sin\theta\,\sigma_j^z$$

évaluée en $\theta = \pi/2$, nous obtenons

$$\mathrm{i}\sigma_j^z = \exp\Big(\frac{\mathrm{i}\pi}{2}\sigma_j^z\Big).$$

Par conséquent,

$$\prod_{j=1}^{N}\sigma_j^z = \prod_{j=1}^{N}\exp\Big(\frac{\mathrm{i}\pi}{2}\big(\sigma_j^z - \mathbb{I}\big)\Big).$$

Enfin, en vertu de (2.10), il s'ensuit

$$\prod_{j=1}^{N}\sigma_j^z = (-1)^N\prod_{j=1}^{N}\exp\Big(\mathrm{i}\pi c_j^\dagger c_j\Big)$$

$$= (-1)^N \exp\left(\mathrm{i}\pi \sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_j \right)$$
$$= (-1)^{N+F},$$

où nous avons utilisé la relation de commutation $\left[c_i^\dagger c_i, c_j^\dagger c_j\right] = 0$, vérifiée pour tous $i, j \in \{1, \ldots, N\}$. Ceci conclut la démonstration. □

Le résultat (2.21) nous permet d'exprimer les termes de bords en termes des opérateurs de Jordan-Wigner. En effet, puisque

$$\sigma_N^z \sigma_N^+ = \sigma_N^+, \quad \sigma_N^z \sigma_N^- = -\sigma_N^-,$$

nous obtenons

$$c_N^\dagger c_1 = (-1)^{N-1} \left(\prod_{m=1}^{N-1} \sigma_m^z \right) \sigma_N^+ \sigma_1^-$$
$$= -(-1)^F \sigma_N^+ \sigma_1^-$$

et

$$c_N c_1^\dagger = (-1)^{N-1} \left(\prod_{m=1}^{N-1} \sigma_m^z \right) \sigma_N^- \sigma_1^+$$
$$= (-1)^F \sigma_N^- \sigma_1^+.$$

Les autres termes s'obtiennent de façon similaire par conjugaison hermitienne. La substitution de ces résultats dans (2.20) nous conduit à

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{j=1}^{N-1} c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j + c_{j+1} c_j - h \sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_j + \frac{hN}{2} \mathbb{I}$$
$$+(-1)^F \frac{J}{2} \left(c_N^\dagger c_1^\dagger + c_N^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_N + c_1 c_N \right).$$

C'est à ce stade qu'une subtilité apparaît : le hamiltonien dépend de l'opérateur $(-1)^F$. Posons

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_-,$$

où $\mathcal{H}_+, \mathcal{H}_- \subset \mathcal{H}$ contiennent respectivement les sous-espaces $\mathcal{H}_f$ pour lesquels $(-1)^F = +1$ et $(-1)^F = -1$. On parle des *secteurs de Neveu-Schwarz* (F pair) et de *Ramond* (F impair) [24]. Cette décomposition simplifie le problème puisqu'elle nous permet de traiter les deux secteurs séparément. En effet, remarquons que $[F, H] \neq 0$, mais que

$$\left[(-1)^F, H\right] = 0.$$

De ce fait, les opérateurs $(-1)^F$ et H peuvent être diagonalisés simultanément. De plus, puisque $(-1)^F$ ne possède que deux valeurs propres (-1 et $+1$), on en déduit que H est diagonal par bloc :

$$H = \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix},$$

avec

$$H_\pm = -\frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N-1} c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j + c_{j+1}c_j - h\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_j + \frac{hN}{2}\mathbb{I}$$
$$\pm \frac{J}{2}\Big(c_N^\dagger c_1^\dagger + c_N^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_N + c_1 c_N\Big).$$

Si l'on impose $c_{N+1} = -c_1$ pour H_+ (secteur de Neveu-Schwarz) et $c_{N+1} = c_1$ pour H_- (secteur de Ramond), nous obtenons dans les deux cas le hamiltonien plus compact :

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j + c_{j+1}c_j - h\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_j + \frac{hN}{2}\mathbb{I}. \tag{2.22}$$

2.3.2 Transformation de Bogoliubov. La diagonalisation de (2.22) est à nouveau réalisée grâce à la technique de Lieb, Schultz et Mattis [3, 5, 10]. Les résultats sont similaires. En effet, pour les conditions aux bords périodiques, nous obtenons

$$H = \sum_{i,j=1}^{N} c_i^\dagger A_{ij} c_j + \frac{1}{2}\Big(c_i^\dagger B_{ij} c_j^\dagger - c_i B_{ij} c_j\Big) + \frac{hN}{2}\mathbb{I},$$

où $A, B \in \mathbb{R}^{N,N}$ sont maintenant données par

$$A = \begin{pmatrix} -h & -J/2 & 0 & \dots & \pm J/2 \\ -J/2 & -h & -J/2 & \dots & 0 \\ 0 & -J/2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -J/2 \\ \pm J/2 & 0 & 0 & -J/2 & -h \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & -J/2 & 0 & \dots & \mp J/2 \\ +J/2 & 0 & -J/2 & \dots & 0 \\ 0 & +J/2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -J/2 \\ \pm J/2 & 0 & 0 & +J/2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ainsi, dans le secteur de Ramond, par exemple, on obtient :

$$(A-B)(A+B) = \begin{pmatrix} J^2+h^2 & Jh & 0 & \dots & Jh \\ Jh & J^2+h^2 & Jh & 0 & 0 \\ 0 & Jh & J^2+h^2 & \ddots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & Jh \\ Jh & 0 & 0 & Jh & J^2+h^2 \end{pmatrix}.$$

Il s'agit à nouveau d'une matrice particulière, dite circulante, dont la diagonalisation est bien connue [25, 26]. Elle est obtenue grâce à une transformation de Fourier discrète. On en déduit

$$(\phi_k)_j = \frac{1}{\sqrt{N}}\exp(-\mathrm{i}jk), \quad \lambda_k^2 = J^2 + h^2 + 2Jh\cos k,$$

où la quantification de k dépend du secteur considéré et de la parité de N. Dans la suite, nous supposerons sans perte de généralité que N est pair [2]. Pour le secteur de

2. Le cas N impair est similaire [27].

Neveu-Schwarz, on a

$$k \in K_{\rm NS} \quad \text{avec} \quad K_{\rm NS} = \left\{ \frac{2\pi q}{N} \,\middle|\, q = -\frac{(N-1)}{2}, -\frac{(N-1)}{2}+1, \ldots, \frac{N-1}{2} \right\}. \tag{2.23}$$

Par contre, pour le secteur de Ramond,

$$k \in K_{\rm R} \quad \text{avec} \quad K_{\rm R} = \left\{ \frac{2\pi q}{N} \,\middle|\, q = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2}+1, \ldots, \frac{N}{2}-1 \right\}. \tag{2.24}$$

Dans les deux cas, il s'ensuit

$$H = 2\sum_k \lambda_k \eta_k^\dagger \eta_k + E_0\, \mathbb{I}, \tag{2.25}$$

avec

$$\lambda_k = \sqrt{J^2 + h^2 + 2Jh\cos k}, \quad E_0 = -\sum_k \lambda_k. \tag{2.26}$$

Il s'agit du même résultat qu'avec conditions aux bords ouvertes ; seule la quantification des modes k diffère. C'est cette différence qui, pour une chaîne de taille N finie, est à l'origine de contributions des bords différentes de celles de la chaîne ouverte. L'état fondamental et les états excités se construisent quant à eux de la même façon. La Fig. 2.4 illustre le spectre du hamiltonien (2.25) pour $N = 4$ et $J = 1$, dans le secteur de Neveu-Schwarz, et est à comparer avec la Fig. 2.3. On note une dégénérescence des niveaux d'énergie plus importante que dans le cas de la chaîne ouverte. À nouveau, le spectre obtenu est identique à celui que l'on peut calculer numériquement de façon exacte à partir de (2.19).

Soulignons également que chaque secteur de parité apporte formellement 2^N énergies propres au spectre du hamiltonien ; on pourrait en conclure qu'il y en a 2^{N+1} au total. Cependant, la moitié d'entre elles n'est pas physique. Pour obtenir le spectre physique du modèle, il nous faut éliminer les énergies du secteur de Ramond correspondant à un nombre pair de fermions sur la chaîne, et inversement pour les énergies venant du secteur de Neveu-Schwarz.

2.3.3 Méthode équivalente de diagonalisation. Notons qu'il est possible, et même instructif, de diagonaliser le hamiltonien (2.22) en s'inspirant de la théorie BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) de la supraconductivité [28, 29, 30]. Cette méthode est équivalente à celle de Lieb, Schultz et Mattis [5], mais plus immédiate. Le résultat est bien entendu le même que celui obtenu par Pfeuty [10, 27].

Pour ce faire, nous exploitons l'invariance sous translation de (2.19) en effectuant une transformation de Fourier discrète, à savoir

$$d_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} \exp(-\mathrm{i}jk)\, c_j, \quad d_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} \exp(\mathrm{i}jk)\, c_j^\dagger.$$

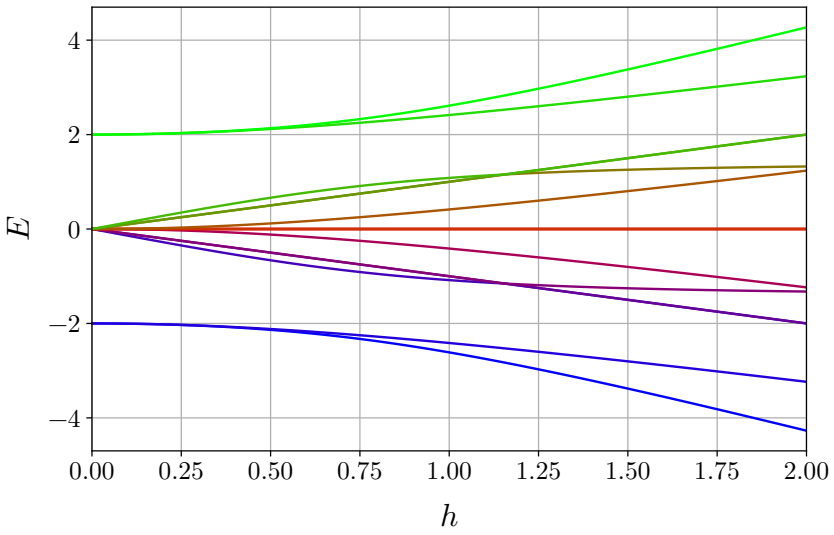


FIGURE 2.4 – Spectre d'énergie $E = E(J, h)$ de la chaîne d'Ising périodique (secteur de Neveu-Schwarz), à $N = 4$ et $J = 1$ fixés

La transformation inverse est donnée par

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(\mathrm{i}jk)\, d_k, \quad c_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(-\mathrm{i}jk)\, d_k^\dagger. \tag{2.27}$$

À nouveau, les valeurs autorisées pour k dépendent du secteur considéré. Pour N pair, nous avons

$$\begin{aligned} c_{N+1} = -c_1 &\Leftrightarrow \exp(\mathrm{i}kN) = -1 \\ &\Leftrightarrow k \in K_{\mathrm{NS}} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} c_{N+1} = c_1 &\Leftrightarrow \exp(\mathrm{i}kN) = 1 \\ &\Leftrightarrow k \in K_{\mathrm{R}}. \end{aligned}$$

Il s'agit des mêmes contraintes que (2.23) et (2.24). La transformation de Fourier étant unitaire, les opérateurs d_k et $d_k^\dagger$ sont fermioniques. En effet, à l'aide de l'identité

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \exp(\mathrm{i}j(k \pm k')) = \delta_{k,\mp k'}, \tag{2.28}$$

on vérifie sans peine que

$$\begin{aligned} \left\{d_k, d_{k'}^\dagger\right\} &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \exp(-\mathrm{i}jk + \mathrm{i}jk') \left\{c_j, c_j^\dagger\right\} \\ &= \delta_{k,k'}. \end{aligned}$$

Les autres relations $\{d_k, d_{k'}\} = \left\{d_k^\dagger, d_{k'}^\dagger\right\} = 0$ se vérifient de la même façon. En vertu des identités (2.27), nous trouvons

$$\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger = \sum_k \exp(\mathrm{i}k)\, d_k^\dagger d_{-k}^\dagger, \quad \sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_{j+1} = \sum_k \exp(\mathrm{i}k)\, d_k^\dagger d_k,$$

$$\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_j = \sum_k d_k^\dagger d_k,$$

auquel cas le hamiltonien (2.22) devient

$$H = \sum_k (-J\cos k - h) d_k^\dagger d_k - \frac{J}{2}\Big(\exp(\mathrm{i}k)\, d_k^\dagger d_{-k}^\dagger + \exp(-\mathrm{i}k)\, d_{-k} d_k\Big) + \frac{hN}{2}\mathbb{I}.$$

Ici, k est à nouveau quantifié selon (2.23) ou (2.24) en fonction du secteur considéré. Nous pouvons décomposer la somme sur ces modes k en une somme sur $k > 0$ de sorte à obtenir

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k>0} (-J\cos k - h)\Big(d_k^\dagger d_k + d_{-k}^\dagger d_{-k}\Big) - \mathrm{i}J\sin k\Big(d_k^\dagger d_{-k}^\dagger + d_k d_{-k}\Big) + \frac{hN}{2}\mathbb{I} \\ &= \sum_{k>0} \begin{pmatrix} d_k^\dagger & d_{-k} \end{pmatrix} H_k \begin{pmatrix} d_k \\ d_{-k}^\dagger \end{pmatrix} + \frac{hN}{2}\mathbb{I}, \end{aligned} \tag{2.29}$$

où

$$H_k = \begin{pmatrix} -J\cos k - h & -\mathrm{i}J\sin k \\ \mathrm{i}J\sin k & J\cos k + h \end{pmatrix}.$$

L'opérateur hamiltonien (2.29) est similaire à celui de la théorie BCS de la supraconductivité [28, 30]. En conséquence, nous pouvons lui appliquer la même méthode de diagonalisation, à savoir la transformation de Bogoliubov [20, 29].

Introduisons les opérateurs

$$\eta_k = u_k d_k - \mathrm{i}v_k d_{-k}^\dagger, \quad \eta_k^\dagger = u_k d_k^\dagger + \mathrm{i}v_k d_{-k},$$

avec $u_k, v_k \in \mathbb{C}$. En imposant leur caractère fermionique, il vient

$$|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1.$$

Sans perte de généralité, nous posons donc

$$u_k = \cos\theta_k, \quad v_k = \sin\theta_k,$$

où $\theta_k \in \mathbb{R}$ sont les angles de Bogoliubov. Motivés par les conditions de quantification (2.23) et (2.24), nous imposons $\theta_{-k} = -\theta_k$, ce qui implique $u_{-k} = u_k$ et $v_{-k} = -v_k$. De là, nous déduisons les expressions inverses

$$d_k = u_k \eta_k + \mathrm{i}v_k \eta_{-k}^\dagger, \quad d_{-k} = u_k \eta_{-k} - \mathrm{i}v_k \eta_k^\dagger,$$

en termes desquelles le hamiltonien (2.29) se réduit à la forme diagonale (2.25). Ici, les angles de Bogoliubov θ_k sont choisis de sorte à éliminer les termes non diagonaux (de la forme $\eta\eta$ ou $\eta^\dagger\eta^\dagger$) de l'expression de H ; ils satisfont

$$\tan 2\theta_k = \frac{J \sin k}{J \cos k + h}. \tag{2.30}$$

Les états propres du hamiltonien s'obtiennent de la même façon qu'avec la méthode de Lieb, Schultz et Mattis [3, 5]. En particulier, l'état fondamental $|\psi_0\rangle$ est à nouveau l'état de vide de Bogoliubov, d'énergie E_0 donnée par (2.26). Toutefois, l'avantage de la méthode inspirée de la théorie BCS de la supraconductivité est qu'elle permet de caractériser $|\psi_0\rangle$ en termes d'un état "gaussien" en les opérateurs fermioniques et d'en déduire une forme fermée de sa mesure géométrique de l'intrication. En effet, d'après [29], on a, pour le secteur de Neveu-Schwarz,

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle &= \prod_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}}\\ k>0}} \eta_{-k}\eta_k|0\rangle \\ &= \prod_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}}\\ k>0}} \Big(u_k\mathbb{I} + \mathrm{i}v_k d_k^\dagger d_{-k}^\dagger\Big)|0\rangle \\ &= \prod_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}}\\ k>0}} \Big(\cos\theta_k \exp\Big(\mathrm{i}\tan\theta_k\, d_k^\dagger d_{-k}^\dagger\Big)\Big)|0\rangle, \end{aligned} \tag{2.31}$$

où $|0\rangle$ satisfait $d_k|0\rangle$ pour tout $k \in K_{\mathrm{NS}}$. Ce résultat se vérifie facilement en montrant que

$$\begin{aligned} \eta_k|\psi_0\rangle &= \Big(u_k d_k - \mathrm{i}v_k d_{-k}^\dagger\Big) \prod_{\substack{k'\in K_{\mathrm{NS}}\\ k'>0}} \Big(u_{k'} + \mathrm{i}v_{k'} d_{k'}^\dagger d_{-k'}^\dagger\Big)|0\rangle \\ &= \prod_{\substack{k'\in K_{\mathrm{NS}}\\ k'>0 \text{ et } k'\neq\pm k}} \Big(u_{k'} + \mathrm{i}v_{k'} d_{k'}^\dagger d_{-k'}^\dagger\Big)\Big(u_k d_k - \mathrm{i}v_k d_{-k}^\dagger\Big)\Big(u_k + \mathrm{i}v_k d_k^\dagger d_{-k}^\dagger\Big)|0\rangle \\ &= 0. \end{aligned}$$

Ici, nous avons utilisé les relations (2.8) et (2.9). Remarquons que l'état fondamental est composé d'un nombre pair de d-fermions, et ce, en raison de la présence des paires $d_k^\dagger d_{-k}^\dagger$ dans son expression (2.31).

Le secteur de Ramond est quant à lui plus subtil. Pour celui-ci, la quantification des modes k autorise la valeur $k = 0$, qui doit être traitée avec précaution. Ainsi, l'on peut montrer que

$$|\psi_0\rangle = d_0^\dagger \prod_{\substack{k\in K_{\mathrm{R}}\\ k>0}} \Big(u_k + \mathrm{i}v_k d_k^\dagger d_{-k}^\dagger\Big)|0\rangle.$$

L'état fondamental est alors constitué d'un nombre impair de d-fermions.

2.4 Choix des conditions aux bords et limite thermodynamique

Jusqu'à présent, nous avons procédé à la diagonalisation de la chaîne d'Ising quantique en champ transversal en considérant deux types de conditions aux bords — ouvertes et périodiques — sans examiner les implications de ce choix sur la physique du système. Les résultats obtenus précédemment sont similaires, à ceci près que la quantification des modes de Bogoliubov k diffère d'une condition à l'autre. Il s'avère que, dans la limite thermodynamique, ce choix de conditions aux bords n'a pas d'influence sur l'ordre dominant de nombreuses quantités d'intérêt physique. En effet, on peut montrer que les contributions des termes de bords de (2.20) sont d'ordre $\mathcal{O}(1/N)$. Elles peuvent par conséquent être négligées dans la limite $N \to \infty$ [5, 16].

Par ailleurs, une analyse numérique montre que l'état fondamental du modèle d'Ising avec conditions aux bords périodiques est toujours celui du secteur de Neveu-Schwarz pour autant que $N < \infty$ [9, 31]. En conséquence, nous nous restreignons à ce secteur de parité. Notons toutefois que dans la limite thermodynamique $N \to \infty$, il y a dégénérescence des états fondamentaux de chaque secteur pour $h \in [0, J]$; l'état fondamental du système peut alors être choisi comme combinaison linéaire des deux états fondamentaux de chacun des secteurs [24]. Cette dégénérescence est levée lorsque $h > J$.

Comme nous le verrons dans le chapitre 4, une autre phénomène intéressant de la limite $N \to \infty$ du modèle est la présence, autour d'une valeur critique h_c du champ externe, d'une transition de phase purement quantique. Il s'agit de l'une des caractéristiques ayant fait le succès du modèle d'Ising quantique. Par définition, une transition de phase quantique a lieu lorsqu'il apparait un changement significatif dans la nature de l'état fondamental du système, et ce, autour d'une valeur critique λ_c de l'un des paramètres de son hamiltonien. Le système subit alors, au voisinage de λ_c, un croisement de niveaux, c'est-à-dire une dégénérescence des niveaux d'énergies de certains états, ou encore la fermeture du gap d'énergie (entre l'état fondamental et le premier état excité), et ce, lorsque la taille du système est suffisamment grande. Ces transitions ont lieu à température nulle et sont donc de nature purement quantique [8].

Avant d'aborder plus en détail la transition de phase quantique elle-même au chapitre 4, il est essentiel de comprendre comment le champ magnétique externe module l'état fondamental du système. C'est précisément cette modification de l'état fondamental qui est au cœur de la transition. La nature de l'état fondamental est effectivement modifiée par l'introduction de ce champ [3, 8], et ces variations peuvent être déterminées, à l'ordre dominant, par une analyse perturbative du hamiltonien de la chaîne :

$$H = \underbrace{-\frac{J}{2}\sum_j \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x}_{\equiv H_{\mathrm{I}}} \underbrace{-\frac{h}{2}\sum_j \sigma_j^z}_{\equiv H_{\mathrm{T}}}, \quad J, h > 0,$$

où nous avons mis en évidence les contributions des deux types d'interaction considérées.

Celui-ci possède deux régimes limites à distinguer [8, 32] :

(i) Lorsque $h \gg J$, c'est le terme H_{T} qui domine. Dans ce cas, le système se trouve dans une phase paramagnétique. En effet, lorsque $J = 0$, les spins de l'état fondamental sont alignés avec la direction $\hat{e}_z$ du champ magnétique externe :

$$|\psi_0\rangle = |\uparrow\rangle^{\otimes N}, \tag{2.32}$$

ceci, quelles que soient les conditions aux bords imposées et la taille N du système. Pour $J \neq 0$, l'état fondamental de la chaîne est, au premier ordre en J/h,

$$|\psi_0\rangle = \left(1 + \frac{NJ^2}{16h^2}\right)^{-1/2} \left(|\uparrow\rangle^{\otimes N} + \frac{J}{4h} \sum_j |\uparrow \ldots \downarrow_j \downarrow_{j+1} \ldots \uparrow\rangle\right).$$

(ii) À l'inverse, lorsque $h \ll J$, c'est le terme H_{I} qui domine. Le système se trouve dans une phase ferromagnétique. Les états fondamentaux sont dégénérés pour $h = 0$ et leurs spins sont alignés ou antialignés avec la direction $\hat{e}_x$ de l'interaction entre les plus proches voisins :

$$|\psi_0\rangle = |\rightarrow\rangle^{\otimes N} \quad \text{ou} \quad |\leftarrow\rangle^{\otimes N}, \tag{2.33}$$

avec

$$|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), \quad |\leftarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle),$$

ceci, quel que soit le choix des conditions aux bords. L'introduction d'un faible champ magnétique $h \neq 0$ agit comme une perturbation qui lève cette dégénérescence, l'état fondamental étant alors la combinaison linéaire symétrique

$$\left|\psi_0^+\right\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\rightarrow\rangle^{\otimes N} + |\leftarrow\rangle^{\otimes N}\right).$$

Dans la limite thermodynamique, il s'avère que le système "choisit" spontanément comme état fondamental l'un des deux états de l'équation (2.33) : il y a brisure spontanée de la symétrie $\mathbb{Z}_2$ [3].

Cette approche perturbative, appliquée par Wei et ses collaborateurs à la chaîne d'Ising [9], nous permet de déterminer de manière analytique la mesure géométrique de l'intrication dans les deux régimes limites. Les résultats ainsi obtenus sont corroborés par les simulations numériques (voir le chapitre 4).

Clairement, les comportements physiques distincts manifestés par le système dans les régimes limites $h \gg J$ et $h \ll J$ suggèrent une transition non analytique dans les propriétés de l'état fondamental (et donc, un changement significatif dans la nature de

3. Il s'agit de la symétrie sous la permutation $\sigma_j^x \to -\sigma_j^x$.

celui-ci). La limite thermodynamique $N \to \infty$ du modèle révèle qu'un tel changement se produit au voisinage d'une valeur critique h_c du champ appliqué. En effet, une analyse des fonctions de corrélation à deux points pour les deux régimes $h \gg J$ et $h \ll J$ montre qu'il n'est pas possible de les interpoler par une fonction analytique en la variable h [8, 32]. De surcroît, le gap d'excitation Δ — défini comme la différence d'énergie entre le premier état excité — s'annule au point critique h_c en suivant la loi d'échelle $\Delta \sim |h - h_c|^{z\nu}$. Dans cette expression, z désigne l'exposant dynamique et ν l'exposant critique associé à la longueur de corrélation, laquelle diverge selon $L_c \sim |h - h_c|^{-\nu}$ [9]. Le point critique de cette transition de phase quantique du second ordre est caractérisé par

$$h_c = J, \quad z\nu = 1.$$

Dans le chapitre 4, ce comportement critique de la chaîne d'Ising est investigué grâce aux calculs de l'intrication de son état fondamental et celle de son premier état excité.

Chapitre III

Intrication Quantique

L'objectif de ce chapitre est d'introduire la notion d'intrication quantique, en mettant en évidence sa représentation mathématique pour des systèmes bipartis et N-partis, et de définir deux observables permettant d'en réaliser la mesure quantitative. Pour ce faire, nous mentionnons dans un premier temps deux critères de séparabilité, l'un pour les états purs, l'autre pour les états mixtes. Ensuite, nous rappelons les critères qu'une "bonne" définition de mesure de l'intrication doit satisfaire. Deux mesures satisfaisant ces conditions sont alors présentées : l'entropie d'intrication et la mesure géométrique de l'intrication.

3.1 Caractérisation de l'intrication quantique

3.1.1 États purs. Considérons un système quantique *biparti*, c'est-à-dire un système composé de deux sous-systèmes A et B. Les espaces de Hilbert de chacun des sous-systèmes sont respectivement notés $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B \subset \mathcal{H}$. L'espace de Hilbert du système complet est $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Dans la suite, nous supposons qu'il est de dimension finie. L'intrication d'un état pur se définit alors de la façon suivante [12, 30] :

Définition 3.1. Soit $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ un état pur normalisé. Il est appelé *état produit* s'il existe des états purs $|\psi_A\rangle \in \mathcal{H}_A$ et $|\psi_B\rangle \in \mathcal{H}_B$ tels que

$$|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle. \tag{3.1}$$

Il est dit *séparable* (ou factorisable) s'il peut s'écrire sous la forme d'un état produit. À l'inverse, si la décomposition (3.1) n'est pas possible, il est dit *intriqué*.

En guise d'exemple, considérons un système biparti d'espace de Hilbert $\mathcal{H} = \mathbb{C}^4 = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$. Si l'on adopte la notation

$$|\mu\nu\rangle = |\mu_A\rangle \otimes |\nu_B\rangle, \quad \mu, \nu \in \{\downarrow, \uparrow\},$$

alors, clairement, l'état

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\rangle)$$

est séparable (et donc, non intriqué). Toutefois, l'état

$$\left|\Phi^+\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\rangle) \tag{3.2}$$

est intriqué. Pour le montrer, on procède par l'absurde. Supposons que la décomposition (3.1) soit possible. Posons

$$|\psi_A\rangle = a_1|\downarrow\rangle + a_2|\uparrow\rangle, \quad |\psi_B\rangle = b_1|\downarrow\rangle + b_2|\uparrow\rangle,$$

avec $a_1, a_2, b_1, b_2 \in \mathbb{C}$. Dans ce cas, nous avons

$$\left|\Phi^+\right\rangle = a_1b_1|\downarrow\downarrow\rangle + a_1b_2|\downarrow\uparrow\rangle + a_2b_1|\uparrow\downarrow\rangle + a_2b_1|\uparrow\uparrow\rangle.$$

Par identification, on en déduit que $a_1b_2 = 0$, et donc que soit $a_1 = 0$, soit $b_2 = 0$. De là, $a_1b_1 = 0$ ou $a_2b_2 = 0$, ce qui est en contradiction avec (3.2).

L'état $|\Phi^+\rangle$ est un célèbre exemple d'état intriqué, appelé *état de Bell* [33]. Il en existe trois autres, à savoir

$$\left|\Phi^-\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\downarrow\rangle - |\uparrow\uparrow\rangle), \quad \left|\Psi^+\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle), \quad \left|\Psi^-\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle).$$

Ces quatre états forment une base orthonormée de $\mathcal{H} = \mathbb{C}^4$.

Le phénomène d'intrication se comprend intuitivement de la façon suivante : supposons qu'un système quantique biparti, par exemple une paire d'électrons, soit préparé dans l'état de Bell $|\Phi^+\rangle$. Nous disposons de deux observateurs, traditionnellement nommés Alice et Bob, séparés d'une distance quelconque. Alice ne peut mesurer que des observables restreintes au sous-système A (un électron), et Bob au sous-système B (l'autre électron). On dénote par $\{|\uparrow_j\rangle, |\downarrow_j\rangle\}$ la base des états de spin de l'électron $j \in \{A, B\}$. Si Alice observe son électron A dans l'état $|\uparrow_A\rangle$, alors Bob obtiendra nécessairement pour le sien $|\uparrow_B\rangle$, et vice-versa. Il en va de même si elle observe $|\downarrow_B\rangle$. Cette interaction est non locale et instantanée [12].

3.1.2 États mixtes. Il n'est pas toujours possible de décrire un système quantique par un unique état pur. Dans ce cas, il y a incertitude sur l'état de celui-ci et seules les probabilités d'être dans l'un ou l'autre état sont connues. On parle d'état mixte ou de mélange statistique [2]. Soient $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}$, avec $i \in \{1, \ldots, k\}$, des états purs et $\mathcal{A}(\mathcal{H})$ l'ensemble des opérateurs auto-adjoints sur un espace de Hilbert $\mathcal{H}$. Un état mixte est représenté par un opérateur densité $\rho \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$, donné par

$$\rho = \sum_{i=1}^{k} p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|,$$

où $p_i \geq 0$ sont les probabilités du mélange statistique et vérifient $\sum_{i=1}^{k} p_i = 1$. Rappelons que l'opérateur densité ρ décrit un état pur si et seulement si $\mathrm{Tr}(\rho^2) = 1$. Il est par ailleurs de grande utilité dans le calcul de l'espérance d'un opérateur. En effet, l'espérance de $O \in \mathrm{End}(\mathcal{H})$ est donnée par

$$\langle O \rangle = \mathrm{Tr}(\rho O).$$

Considérons à présent un espace de Hilbert biparti $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. L'intrication des états mixtes se définit de manière analogue à celle des états purs [30] :

Définition 3.2. Soit $\rho \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$ un état mixte. Il est appelé *état produit* s'il existe des états mixtes $\rho_A \in \mathcal{A}(\mathcal{H}_A)$ et $\rho_B \in \mathcal{A}(\mathcal{H}_B)$ tels que

$$\rho = \rho_A \otimes \rho_B.$$

Il est dit *séparable* s'il existe $p_i \geq 0$ satisfaisant $\sum_{i=1}^{k} p_i = 1$ et des états produits $\rho_i \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$, avec $i \in \{1, \ldots, k\}$, tels que

$$\rho = \sum_{i=1}^{k} p_i \rho_i = \sum_{i=1}^{k} p_i \rho_i^A \otimes \rho_i^B. \tag{3.3}$$

À l'inverse, si la décomposition (3.3) n'est pas possible, il est dit *intriqué*.

La généralisation des Définitions 3.1 et 3.2 aux états quantiques multipartis est immédiate [34].

3.2 Critères de séparabilité

Déterminer si un état quantique donné est intriqué nécessite d'établir des critères de séparabilité. La recherche de tels critères est un sujet actif de la théorie de l'information quantique [12]. Dans ce travail, nous en présentons deux : la décomposition de Schmidt [35] et le critère de Peres-Horodecki (P.P.T.) [36, 37].

3.2.1 Décomposition de Schmidt.

Il existe un résultat important d'algèbre linéaire, qui n'est autre qu'une reformulation du théorème de décomposition en valeurs singulières [38], permettant de déterminer si un état pur donné est intriqué ou non. Considérons à nouveau un espace de Hilbert biparti $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ de partition $\mathcal{H}_A$ et $\mathcal{H}_B$. Notons $n_A = \dim(\mathcal{H}_A)$ et $n_B = \dim(\mathcal{H}_B)$. Le résultat s'énonce comme suit [35] :

Lemme 3.3 (Décomposition de Schmidt). *Soit $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ un état pur normalisé. Alors il existe des bases orthonormées $\left\{\left|u_i^A\right\rangle \in \mathcal{H}_A\right\}$ et $\left\{\left|v_i^B\right\rangle \in \mathcal{H}_B\right\}$ telles que*

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\chi} \alpha_i \left|u_i^A\right\rangle \otimes \left|v_i^B\right\rangle, \tag{3.4}$$

où $\chi \leq \min(n_A, n_B)$ est le nombre de Schmidt et $\alpha_i \in \mathbb{C}$, avec $i \in \{1, \ldots, \chi\}$, sont les coefficients de Schmidt[1] *satisfaisant $\sum_{i=1}^{\chi} |\alpha_i|^2 = 1$.*

1. Également appelés *valeurs propres de Schmidt*.

Démonstration. Soient $\{|e_k\rangle \in \mathcal{H}_A\}$ et $\{|f_\ell\rangle \in \mathcal{H}_B\}$, avec $k \in \{1, \dots, n_A\}$ et $\ell \in \{1, \dots, n_B\}$, des bases orthonormées de $\mathcal{H}_A$ et $\mathcal{H}_B$, respectivement. Tout état pur normalisé $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ peut se décomposer dans ces bases comme

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{n_A} \sum_{\ell=1}^{n_B} c_{kl} |e_k\rangle \otimes |f_\ell\rangle, \quad c_{kl} \in \mathbb{C}.$$

Notons $C = (c_{kl})_{1\leq k\leq n_A}^{1\leq \ell\leq n_B}$ la matrice des coefficients de cette décomposition et χ son rang. Par le théorème de décomposition en valeurs singulières, il existe des matrices unitaires $S = (s_{k\ell})_{1\leq k,\ell\leq n_A}$, $T = (t_{k\ell})_{1\leq k,\ell\leq n_B}$ et une matrice diagonale $\Lambda = (\lambda_{k\ell})_{1\leq k\leq n_A}^{1\leq \ell\leq n_B}$, avec

$$\lambda_{11} \geq \lambda_{22} \geq \cdots \geq \lambda_{\chi\chi} > 0, \quad \lambda_{kk} = 0,$$

pour tout $k > \chi$, telle que

$$C = S\Lambda T^\dagger.$$

Autrement dit, en termes des éléments de matrice,

$$c_{k\ell} = \sum_{i=1}^{\chi} \lambda_i s_{ki} t^*_{\ell i}.$$

Si l'on définit deux nouvelles bases

$$\left|u_i^A\right\rangle = \sum_{k=1}^{n_A} s_{ki} |e_k\rangle, \quad \left|v_i^B\right\rangle = \sum_{\ell=1}^{n_B} t^*_{ki} |f_\ell\rangle \tag{3.5}$$

de $\mathcal{H}_A$ et $\mathcal{H}_B$, respectivement, il s'ensuit

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\chi} \lambda_i \left|u_i^A\right\rangle \otimes \left|v_i^B\right\rangle.$$

En posant $\alpha_i = \lambda_i \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_i}$ pour chaque $i \in \{1, \dots, \chi\}$ et en absorbant les phases dans les définitions (3.5), nous obtenons la décomposition de Schmidt (3.4). L'orthonormalité des bases $\left\{\left|u_i^A\right\rangle \in \mathcal{H}_A\right\}$ et $\left\{\left|v_i^B\right\rangle \in \mathcal{H}_B\right\}$ découle du caractère unitaire de S et T :

$$\left\langle u_i^A \middle| u_j^A \right\rangle = \left(S^\dagger S\right)_{ij} = \delta_{ij}, \quad \left\langle v_i^A \middle| v_j^A \right\rangle = \left(TT^\dagger\right)_{ij} = \delta_{ij}, \tag{3.6}$$

tandis que la condition $\sum_{i=1}^{\chi} |\alpha_i|^2 = 1$ découle de la normalisation de $|\psi\rangle$. Notons que la décomposition (3.4) n'est pas nécessairement unique. □

En termes de l'opérateur densité $\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$, la décomposition de Schmidt s'écrit

$$\rho = \sum_{i,j=1}^{\chi} \alpha_i \alpha_j \left|u_i^A\right\rangle\left\langle u_j^A\right| \otimes \left|v_i^B\right\rangle\left\langle v_j^B\right|$$

et possède des applications intéressantes. Premièrement, elle permet d'évaluer facilement les matrices densités réduites $\rho_A \in \mathcal{A}(\mathcal{H}_A)$ et $\rho_B \in \mathcal{A}(\mathcal{H}_B)$. On obtient en effet

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_B}(\rho) = \sum_{i=1}^{\chi} \alpha_i^2 \left|u_i^A\right\rangle\!\left\langle u_i^A\right|, \tag{3.7}$$

où $\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_B}$ dénote la trace partielle sur $\mathcal{H}_B$. L'expression de ρ_B est tout à fait similaire. Deuxièmement, elle fournit un critère de séparabilité d'un état pur. On définit pour ce faire le *rang de Schmidt* d'un tel état $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, noté $\mathrm{Rk}(\psi)$, par le nombre de coefficients de Schmidt non nuls de (3.4). Le critère de séparabilité s'énonce alors de la façon suivante [12] :

Proposition 3.4 (Critère de Schmidt). *Soit $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ un état pur normalisé. Alors il est séparable si et seulement si* $\mathrm{Rk}(\psi) = 1$.

Démonstration.

(i) En premier lieu, montrons la suffisance ($\Rightarrow$). Supposons que $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ soit séparable et normalisé. Par hypothèse et en vertu du Lemme 3.3, nous avons

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\chi} \alpha_i \left|u_i^A\right\rangle \otimes \left|v_i^B\right\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle,$$

avec $|\psi_A\rangle \in \mathcal{H}_A$ et $|\psi_B\rangle \in \mathcal{H}_B$. Or, par définition de trace partielle,

$$\begin{aligned} \rho_A &= \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_B}(|\psi\rangle\langle\psi|) \\ &= |\psi_A\rangle\langle\psi_A| \,\mathrm{Tr}(|\psi_B\rangle\langle\psi_B|) \\ &= |\psi_A\rangle\langle\psi_A|, \end{aligned}$$

et de ce fait, ρ_A décrit un état pur. Dans ce cas, $\mathrm{Tr}(\rho_A^2) = 1$ et l'on déduit de (3.7) que

$$\sum_{i=1}^{\chi} \alpha_i^4 = 1. \tag{3.8}$$

Or, puisque $\sum_{i=1}^{\chi} \alpha_i^2 = 1$, il s'ensuit que l'égalité (3.8) est satisfaite si et seulement si $\mathrm{Rk}(\psi) = 1$.

(ii) Ensuite, montrons la réciproque ($\Leftarrow$). Soit $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ un état pur normalisé de rang de Schmidt $\mathrm{Rk}(\psi) = 1$. Par définition, il existe $j, k \in \{1, \ldots, \chi\}$ tels que $\alpha_j = 1$ et $\alpha_{k\neq j} = 0$. Autrement dit, en vertu du Lemme 3.3,

$$|\psi\rangle = \alpha_j \left|u_j^A\right\rangle \otimes \left|v_j^B\right\rangle = \left|u_j^A\right\rangle \otimes \left|v_j^B\right\rangle.$$

La comparaison de cette expression avec (3.1) fournit la conclusion.

□

Un corollaire immédiat de ce résultat est que tout état pur intriqué est de rang de Schmidt strictement supérieur à l'unité. Ainsi, pour autant que la décomposition de Schmidt puisse être obtenue explicitement, ceci nous fournit un moyen de déterminer si un état pur donné est intriqué ou non.

3.2.2 Critère de Peres-Horodecki (P.P.T.). L'un des critères de séparabilité les plus célèbres pour les mélanges statistiques est probablement celui de *critère de Peres-Horodecki* [36], aussi appelé critère de la transposition partielle positive (P.P.T.), et ce, en raison de sa simplicité et son efficacité. Il s'agit d'une condition nécessaire pour qu'un état mixte soit séparable. Si de plus $n_A = 2$ et $n_B = 2$ ou 3, on peut montrer qu'il s'agit même d'une condition suffisante [39].

Soient $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ un espace de Hilbert biparti et $\left\{\left|u_i^A\right\rangle \in \mathcal{H}_A\right\}$, $\left\{\left|v_i^B\right\rangle \in \mathcal{H}_B\right\}$ des bases orthonormées de $\mathcal{H}_A$ et $\mathcal{H}_B$, respectivement. Tout état mixte $\rho \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$ peut se décomposer de la façon suivante :

$$\rho = \sum_{i,j=1}^{n_A} \sum_{k,l=1}^{n_B} \rho_{ijkl} \left|u_i^A\right\rangle\!\left\langle u_j^A\right| \otimes \left|v_k^B\right\rangle\!\left\langle v_l^B\right|.$$

On obtient alors

$$\begin{aligned}
\rho^{T_A} &= (T \otimes \mathbb{I})(\rho) \\
&= \sum_{i,j=1}^{n_A} \sum_{k,l=1}^{n_B} \rho_{ijkl} \left(\left|u_i^A\right\rangle\!\left\langle u_j^A\right|\right)^T \otimes \left|v_k^B\right\rangle\!\left\langle v_l^B\right| \\
&= \sum_{i,j=1}^{n_A} \sum_{k,l=1}^{n_B} \rho_{jikl} \left|u_i^A\right\rangle\!\left\langle u_j^A\right| \otimes \left|v_k^B\right\rangle\!\left\langle v_l^B\right|.
\end{aligned}$$

L'expression de l'autre transposée partielle ρ^{T_B} s'obtient de façon analogue. Un état ρ est dit être *P.P.T.* si ρ^{T_A} (ou, de façon équivalente, ρ^{T_B}) est définie semi-positive. Le critère de séparabilité s'énonce alors comme suit :

Proposition 3.5 (Critère de Peres-Horodecki (P.P.T.)). *Tout état mixte séparable $\rho \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$ est P.P.T.*

Démonstration. Soit $\rho \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$ un état mixte séparable. Par définition, nous avons

$$\rho^{T_A} = \sum_{i=1}^{k} p_i \left(\rho_i^A\right)^T \otimes \rho_i^B.$$

Il s'agit à nouveau d'un état mixte. Puisque toute matrice densité associée à un état mixte est définie semi-positive, il s'ensuit que la matrice ρ^{T_A} est également définie semi-positive. Ceci prouve la nécessité du critère P.P.T. □

On peut montrer qu'une matrice est définie semi-positive si et seulement si toutes ses valeurs propres sont positives [38]. De ce fait, si l'on obtient une transposée partielle d'un état mixte ayant au moins une valeur propre négative, l'état est nécessairement intriqué. Soulignons qu'il existe des généralisations de ce critère [37], et qu'une observable de l'intrication parmi tant d'autres, appelée négativité, en est directement inspirée [40].

3.3 Mesures de l'intrication quantique

L'intrication ne se limite pas à un phénomène qualitatif. Il est donc important d'en trouver des observables quantitatives.

3.3.1 Critères de définition. Il existe plusieurs observables permettant la mesure de l'intrication. Une telle observable E se doit de satisfaire, à minima, les conditions suivantes :

(i) Positivité : $E(\rho) \geq 0$, l'égalité étant obtenue si et seulement si ρ est séparable ;

(ii) Invariance sous transformations unitaires locales ;

(iii) Monotonie sous l'action d'opérations locales et de communication classique (L.O.C.C.) : pour toute opération L.O.C.C. décrite par une famille d'opérations quantiques $\{O_i\}$ avec probabilités $p_i = \mathrm{Tr}(O_i(\rho))$, on a

$$\sum_i p_i E\left(\frac{O_i(\rho)}{p_i}\right) \leq E(\rho);$$

(iv) Convexité :

$$E\left(\sum_{i=1}^{k} p_i \rho_i\right) \leq \sum_{i=1}^{k} p_i E(\rho_i).$$

Dans ce cas, on dit que E est un *monotone d'intrication* [39, 41, 42]. Nous en présentons deux dans les sections qui suivent. Notons que certaines mesures de l'intrication satisfont des propriétés supplémentaires, telles que la continuité ou l'additivité [43].

3.3.2 Entropie d'intrication. La plus célèbre mesure de l'intrication est l'entropie d'intrication. Pour rappel, on définit l'*entropie de Shannon* (ou simplement, entropie) d'une variable aléatoire discrète X par

$$H(X) = -k \sum_{i=1}^{n} p_i \log_a p_i,$$

où nous avons supposé que X prend ses valeurs dans $\{x_i \,|\, i = 1, \ldots, n\}$ avec probabilité associée $\{p_i \neq 0 \,|\, i = 1, \ldots, n\}$. Ici, k est une constante qui dépend du domaine d'application. Intuitivement, cette entropie correspond à la quantité d'information perdue sur la distribution de la variable aléatoire X. En d'autres termes, elle mesure l'incertitude sur la réalisation de cette variable aléatoire. Si l'une des réalisations x_i de la variable aléatoire X a pour probabilité $p_i = 1$, alors $H(X) = 0$: il n'y a aucune incertitude sur la réalisation de X. À l'inverse, si les résultats x_i sont équiprobables, l'incertitude $H(X)$ est maximale [12].

La version quantique de l'entropie de Shannon est appelée *entropie de von Neumann*, et est définie pour tout $\rho \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$ par

$$S(\rho) = -\,\mathrm{Tr}(\rho \ln \rho), \tag{3.9}$$

avec la convention $0 \ln 0 = 0$ et, pour toute matrice M,

$$\ln M = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{(M - \mathbb{I})^k}{k}. \tag{3.10}$$

Clairement, si le système quantique considéré se trouve dans l'état pur $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, alors la matrice ρ associée ne possède qu'une seule valeur propre non nulle égale à l'unité, et nous avons $S(\rho) = 0$ [12].

Soit $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ un espace de Hilbert biparti. On définit l'*entropie d'intrication* du sous-système A par

$$S_A = S(\rho_A) = -\operatorname{Tr}_{\mathcal{H}_A}(\rho_A \ln \rho_A).$$

En vertu de (3.7), elle peut être écrite en termes des coefficients de Schmidt comme suit :

$$S_A = -\sum_{i=1}^{\chi} \alpha_i^2 \ln\left(\alpha_i^2\right). \tag{3.11}$$

À partir de la décomposition de Schmidt, on se convainc sans peine que $S_A = S_B$ lorsque le système se trouve dans un état pur. Cela est cohérent : en découvrant que A est intriqué avec B, on déduit que B est intriqué avec A ; la quantité d'informations découvertes est identique. Soulignons également que si l'on interprète α_i^2 comme des probabilités, alors l'entropie d'intrication est identique à l'entropie de Shannon de ce jeu de probabilités. Par conséquent, elle s'interprète de la même façon.

L'entropie d'intrication jouit de bonnes propriétés [12]. En plus de celles discutées dans la section 3.3.1, elle satisfait notamment la propriété d'additivité, à savoir pour $\rho = \bigotimes_{i=1}^{k} \rho_i$:

$$S\left(\bigotimes_{i=1}^{k} \rho_i\right) = \sum_{i=1}^{k} S(\rho_i).$$

Celle-ci permet, entre autres, d'évaluer l'entropie d'intrication entre deux blocs de spins de la chaîne XX [44].

3.3.3 Mesure géométrique de l'intrication. L'entropie d'intrication discutée dans la section précédente n'est pas la seule quantité à même de mesurer l'intrication. Une autre mesure valable est la mesure géométrique (globale) de l'intrication. Elle fut introduite en 1995 par Shimony [45] dans le cadre de systèmes bipartis, et généralisée en 2001 par Barnum et Linden [46] pour des systèmes purs multipartis (c'est-à-dire constitué de $N > 2$ sous-systèmes). L'étude de la chaîne d'Ising quantique nécessite de considérer de tels états multipartis, ce qui justifie notre intérêt pour cette mesure de l'intrication. En 2003, Wei et Goldbart [9] l'ont étendue au cas d'états mixtes N-partis.

Pour introduire la mesure géométrique globale de l'intrication, rappelons qu'un état pur $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ d'un système quantique biparti peut se décomposer dans des bases orthonormées $\left\{\left|e_i^A\right\rangle \in \mathcal{H}_A\right\}$ et $\left\{\left|e_j^B\right\rangle \in \mathcal{H}_B\right\}$ de la façon suivante :

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{ij} \left|e_i^A\right\rangle \otimes \left|e_j^B\right\rangle, \quad \psi_{ij} \in \mathbb{C}.$$

De la même façon, un état pur $|\psi\rangle \in \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_i$ d'un système N-parti s'écrit

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{m_1,\ldots,m_N} \psi_{m_1\ldots m_N} \left|e_{m_1}^{(1)}\right\rangle \otimes \cdots \otimes \left|e_{m_N}^{(N)}\right\rangle \\ &= \sum_{m_1,\ldots,m_N} \psi_{m_1\ldots m_N} \left|e_{m_1}^{(1)} \ldots e_{m_N}^{(N)}\right\rangle, \end{aligned}$$

avec $\psi_{m_1\ldots,m_N} \in \mathbb{C}$ et $\left\{\left|e_{m_i}^{(i)}\right\rangle \in \mathcal{H}_i\right\}$ des bases orthonormées. Pour les chaînes de spins 1/2 discutées dans le chapitre précédent, nous avions $e_{m_i}^{(i)} = |\uparrow_i\rangle$ ou $|\downarrow_i\rangle$. Dans la suite, nous supposerons sans perte de généralité que l'état $|\psi\rangle$ est normalisé.

La mesure géométrique de l'intrication repose sur de simples considérations géométriques des espaces de Hilbert, comme l'illustre la Fig. 3.1. L'idée de Wei et Goldbart est de considérer la distance

$$d = \min_{|\phi\rangle \in \mathcal{S}} ||\psi\rangle - |\phi\rangle|,$$

où $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$ dénote le sous-ensemble des états purs normalisés et séparables de $\mathcal{H}$. Il est clair que

$$d = \sqrt{2(1 - \cos\theta)}, \quad \cos\theta = \mathrm{Re}(\langle\psi|\phi\rangle).$$

C'est cette distance qui nous permet de caractériser intuitivement l'intrication d'un état : plus $|\psi\rangle$ est intriqué, moins il se trouve proche de sa meilleure approximation séparable $|\phi\rangle$, et plus θ est grand.

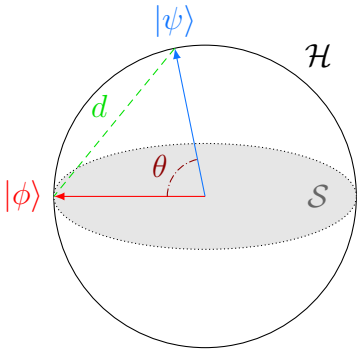


FIGURE 3.1 – Représentation informelle de la distance d séparant $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ de son approximation séparable $|\phi\rangle \in \mathcal{S}$

Pour déterminer $|\phi\rangle$, il convient de minimiser la quantité $||\psi\rangle - |\phi\rangle|^2$, sujette à la contrainte $\langle\phi|\phi\rangle = 1$. Si l'on pose

$$|\phi\rangle = \bigotimes_{i=1}^{N} \left|\phi^{(i)}\right\rangle = \bigotimes_{i=1}^{N} \left(\sum_{m_i} c_{m_i}^{(i)} \left| e_{m_i}^{(i)} \right\rangle \right)$$

et que l'on se restreigne au sous-ensemble des solutions $|\phi\rangle \in \mathcal{S}$ satisfaisant $\left\langle \phi^{(i)} \middle| \phi^{(i)} \right\rangle = 1$, alors la résolution du problème d'optimisation sous contrainte

$$||\psi\rangle - |\phi\rangle|^2 + \Lambda(\langle\phi|\phi\rangle - 1)$$

conduit au problème aux valeurs propres non linéaire suivant :

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{m_1,\ldots,\widehat{m_i},\ldots,m_N} \psi^*_{m_1\ldots m_N} c^{(1)}_{m_1} \ldots \widehat{c_{m_i}} \ldots c^{(N)}_{m_N} = \Lambda \left(c^{(i)}_{m_i} \right)^*, \\ \displaystyle\sum_{m_1,\ldots,\widehat{m_i},\ldots,m_N} \psi_{m_1\ldots m_N} \left(c^{(1)}_{m_1} \right)^* \ldots \widehat{(\hat{c}_{m_i})^*} \ldots \left(c^{(N)}_{m_N} \right)^* = \Lambda c^{(i)}_{m_i}. \end{cases} \tag{3.12}$$

Ici, le symbole " $\widehat{\cdot}$ " désigne l'omission du terme et Λ est le multiplicateur de Lagrange. Sous une forme indépendante du choix de base, cette équation s'écrit

$$\begin{cases} \langle\psi| \left(\displaystyle\bigotimes_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} \left|\phi^{(j)}\right\rangle \right) = \Lambda \left\langle \phi^{(i)} \right|, \\ \left(\displaystyle\bigotimes_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} \left\langle \phi^{(j)} \right| \right) |\psi\rangle = \Lambda \left|\phi^{(i)}\right\rangle. \end{cases} \tag{3.13}$$

En général, en raison de la non-linéarité de ces systèmes, seules des solutions numériques peuvent être déterminées. Toutefois, des systèmes (3.12) ou (3.13), nous déduisons que les valeurs propres Λ sont réelles et indépendantes du choix de base. Par l'inégalité de Cauchy-Schwarz, nous obtenons de plus $\Lambda \in [-1, 1]$. De ce fait, nous pouvons les identifier aux cosinus des angles θ entre $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$. La mesure géométrique (globale) de l'intrication d'un état pur se définit alors comme suit [43] :

Définition 3.6. Soit $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ un état pur N-parti. On définit la plus grande valeur propre de (3.12) ou (3.13), appelée *valeur propre d'intrication de* $|\psi\rangle$, par

$$\Lambda_{\max}(\psi) = \max_{\langle\phi|\in\mathcal{S}^*} |\langle\phi|\psi\rangle|. \tag{3.14}$$

On définit la *mesure géométrique de l'intrication de* $|\psi\rangle$ par [2]

$$E(\psi) = -\log_2 \left(\Lambda^2_{\max}(\psi) \right). \tag{3.15}$$

2. On rencontre parfois dans la littérature une autre définition : $E(\psi) = 1 - \Lambda^2_{\max}(\psi)$.

L'interprétation de la valeur propre d'intrication, parfois appelée recouvrement maximal, est claire : elle caractérise la proximité entre $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ et correspond au plus petit angle θ entre eux. Ainsi, plus $\Lambda_{\max}(\psi)$ est grande, moins $|\psi\rangle$ est intriqué, et inversement. En effet, on vérifie sans peine que si $\Lambda_{\max}(\psi) = 1$, alors $E(\psi) = 0$. À l'inverse, lorsque $\Lambda_{\max}(\psi) \to 0$, $E(\psi) \to +\infty$. La mesure géométrique de l'intrication vérifie par ailleurs les autres propriétés discutées dans la section 3.3.1 [43, 47].

Il est à souligner que, dans le cas d'un système quantique biparti, le système (3.12) est linéaire et sa résolution équivaut en fait à l'obtention de la décomposition de Schmidt. Ainsi, la valeur propre d'intrication (3.14) correspond au plus grand coefficient de Schmidt de la décomposition (3.4).

En guise d'exemple de calcul de la mesure géométrique de l'intrication, supposons être en possession de la décomposition de Schmidt d'un état pur biparti :

$$|\psi\rangle = \sqrt{p}|\downarrow\downarrow\rangle + \sqrt{1-p}|\uparrow\uparrow\rangle, \quad p \in [0,1].$$

Nous avons

$$\Lambda_{\max}(\psi) = \max_{p\in[0,1]} \left\{\sqrt{p}, \sqrt{1-p}\right\}, \quad \Lambda^2_{\max}(\psi) = \max_{p\in[0,1]} \{p, 1-p\}.$$

Posons $x = p - 1/2$, de sorte que

$$\begin{aligned}\Lambda^2_{\max}(\psi) &= \max\left\{\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - x\right\} \\ &= \frac{1}{2} + |x|.\end{aligned}$$

Si l'on introduit [3] maintenant $C = 2\sqrt{p(1-p)}$, il s'ensuit

$$|x| = \frac{1}{2}\sqrt{1-C^2},$$

d'où

$$\Lambda^2_{\max}(\psi) = \frac{1}{2}\left(1 + \sqrt{1-C^2}\right), \quad E(\psi) = 1 - \log_2\left(1 + \sqrt{1-C^2}\right).$$

En appliquant ce résultat à l'état de Bell $|\Phi^+\rangle$, il vient

$$E\left(\Phi^+\right) = 1.$$

3. Il s'agit de la concurrence de $|\psi\rangle$ [48].

La généralisation de la mesure géométrique de l'intrication aux états mixtes est réalisée grâce à la construction d'enveloppes convexes. Elle consiste à minimiser par rapport à toutes les décompositions en états purs. En d'autres termes, elle est définie pour un état mixte $\rho = \sum_{i=1}^{k} p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$ par

$$E(\rho) = \min_{\{p_i, \psi_i\}} \sum_{i=1}^{k} p_i E(\psi_i).$$

Cette définition satisfait les conditions de la section 3.3.1 [43]. Cependant, elle complique en général le calcul analytique de l'intrication d'un état mixte.

Lorsque la taille N du système est importante, il est d'usage de travailler avec les quantités

$$\mathcal{E}_N = \frac{1}{N} E(\rho), \quad \mathcal{E} = \lim_{N \to \infty} \mathcal{E}_N,$$

la première étant appelée *densité d'intrication*. Comme nous le verrons dans le chapitre 4, il s'avère que, dans la limite thermodynamique $N \to \infty$, les dérivées de celle-ci peuvent être utilisées dans la détection de transitions de phase quantiques [9, 49].

Chapitre IV

Intrication de la Chaîne d'Ising Quantique

L'objectif de ce chapitre est de quantifier l'intrication de la chaîne d'Ising quantique. Pour ce faire, nous calculons, de manières analytique et numérique, la mesure géométrique de l'intrication de l'état fondamental. Nous distinguons les conditions aux bords périodiques, pour lesquelles un choix approprié de paramétrisation de l'état séparable permet d'obtenir une forme fermée du recouvrement maximal, et les conditions aux bords ouvertes, qui ne se prêtent pas à une résolution analytique. Les résultats obtenus pour une chaîne de taille finie sont comparés avec ceux de la limite thermodynamique. En particulier, nous retrouvons, dans cette limite, la transition de phase quantique du modèle grâce à la dérivée par rapport au champ appliqué de la densité d'intrication. Enfin, nous présentons les mesures géométriques de l'intrication de l'état fondamental des chaînes XX et XY et du premier état excité de la chaîne d'Ising.

4.1 Intrication de l'état fondamental de la chaîne d'Ising périodique

4.1.1 Recouvrement et mesure géométrique de l'intrication. Considérons le secteur de Neveu-Schwarz du modèle d'Ising avec conditions aux bords périodiques et fixons un $N \in \mathbb{N}_0$ pair. Nous souhaitons déterminer la valeur propre d'intrication de l'état fondamental

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle &= \prod_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}}\\ k>0}} \Big(\cos\theta_k \exp\Big(\mathrm{i}\tan\theta_k\, d_k^\dagger d_{-k}^\dagger\Big)\Big)|0\rangle \\ &= \prod_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}}\\ k>0}} \Big(\cos\theta_k\, \mathbb{I} + \mathrm{i}\sin\theta_k\, d_k^\dagger d_{-k}^\dagger\Big)|0\rangle \end{aligned} \tag{4.1}$$

et en déduire sa mesure géométrique (3.15). L'approche suivie dans ce chapitre est inspirée de [9]. Nous paramétrons la famille des états séparables $\{|\phi\rangle \in \mathcal{S}\}$ comme suit :

$$|\phi(\xi_j,\delta_j)\rangle = \bigotimes_{j=1}^{N}\left[\cos\frac{\xi_j}{2}|{\downarrow_j}\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_j}\sin\frac{\xi_j}{2}|{\uparrow_j}\rangle\right], \quad \xi_j,\delta_j \in [0,2\pi). \tag{4.2}$$

Au lieu de maximiser le recouvrement par rapport aux $2N$ paramètres réels $\{\xi_j,\delta_j\}$, nous exploitons l'invariance sous translation du système en posant $\xi_j = \xi$ et $\delta_j = \delta$ pour tout

$j \in \{1, \dots, N\}$. De plus, puisque l'état fondamental du système est un vecteur de Perron, nous posons $\delta = 0$. En d'autres termes, nous faisons l'ansatz [1]

$$\begin{aligned} |\phi(\xi)\rangle &= \bigotimes_{j=1}^{N} \left[\cos\frac{\xi}{2} |\downarrow_j\rangle + \sin\frac{\xi}{2} |\uparrow_j\rangle \right] \\ &= \exp\left(\mathrm{i}\frac{\xi}{2} \sum_{j=1}^{N} \sigma_j^y \right) |\downarrow\rangle^{\otimes N} \end{aligned} \tag{4.3}$$

pour déterminer $\Lambda_{\max}(\psi_0)$. Remarquons que cette forme de l'état séparable $|\phi\rangle$ est obtenue en appliquant une rotation globale d'axe Oy à l'état de vide $|0\rangle = \bigotimes_{j=1}^{N} |\downarrow_j\rangle$ des c-fermions.

Pour les conditions aux bords périodiques, il est possible de déterminer une forme fermée du recouvrement $\langle\psi_0|\phi(\xi)\rangle$. Pour ce faire, nous exprimons (4.3) en termes des opérateurs de Jordan-Wigner. Étant donné que $\left[\sigma_i^y, \sigma_j^y\right] = 0$ pour tous $i, j \in \{1, \dots, N\}$ tels que $i \neq j$, nous avons d'une part

$$|\phi(\xi)\rangle = \prod_{j=1}^{N} \exp\left(\mathrm{i}\frac{\xi}{2} \sigma_j^y \right) |0\rangle.$$

D'autre part, avec les identités

$$\sigma_j^y = \mathrm{i}(-1)^{j-1} \left(\prod_{m=1}^{j-1} \sigma_m^z \right) \left(c_j - c_j^\dagger \right), \quad \exp(\mathrm{i}\theta\sigma^a) = \cos\theta\, \mathbb{I} + \mathrm{i}\sin\theta\, \sigma^a,$$

et l'équation (2.10), nous trouvons

$$\begin{aligned} |\phi(\xi)\rangle &= \prod_{j=1}^{N} \left[\cos\frac{\xi}{2}\, \mathbb{I} + (-1)^{j-1} \sin\frac{\xi}{2} \left(\prod_{m=1}^{j-1} \left(2c_m^\dagger c_m - \mathbb{I} \right) \right) c_j^\dagger \right] |0\rangle \\ &= \prod_{j=1}^{N} \left(\cos\frac{\xi}{2}\, \mathbb{I} + \sin\frac{\xi}{2}\, c_j^\dagger \right) |0\rangle \\ &= \cos^N\frac{\xi}{2} \prod_{j=1}^{N} \exp\left(\tan\frac{\xi}{2}\, c_j^\dagger \right) |0\rangle. \end{aligned}$$

Ici, nous avons à nouveau utilisé les propriétés des opérateurs fermioniques. Par la formule de Baker-Campbell-Hausdorff, il s'ensuit

$$|\phi(\xi)\rangle = \cos^N\left(\frac{\xi}{2}\right) \exp\left(\tan\frac{\xi}{2} \sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger \right) \exp\left(\tan^2\frac{\xi}{2} \sum_{1 \leq j < \ell \leq N} c_j^\dagger c_\ell^\dagger \right) |0\rangle.$$

1. La validité de cet ansatz a été numériquement corroborée, pour des chaînes de faible taille N, par Wei et ses collaborateurs [50]. Toutefois, cette confirmation numérique n'est pas indispensable, dans la mesure où l'on peut montrer que tout état séparable admet une telle représentation (à une phase globale près).

La contrainte $j < \ell$ peut être relaxée en $j \leq \ell$ grâce à l'identité (2.9). Nous avons alors, en espace de Fourier,

$$\sum_{1\leq j\leq \ell\leq N} c_j^\dagger c_\ell^\dagger = \frac{1}{N} \sum_{k,k'\in K_{\mathrm{NS}}} \sum_{\ell=1}^{N} \sum_{j=1}^{\ell} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(jk+\ell k')} d_k^\dagger d_{k'}^\dagger.$$

En évaluant les sommes géométriques et avec (2.28), il vient

$$\begin{aligned}\sum_{1\leq j\leq \ell\leq N} c_j^\dagger c_\ell^\dagger &= \frac{1}{N} \sum_{k,k'\in K_{\mathrm{NS}}} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}}{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}} \sum_{\ell=1}^{N} \Big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\ell k'} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\ell(k+k')}\Big) d_k^\dagger d_{k'}^\dagger \\ &= \frac{2}{N} \sum_{k,k'\in K_{\mathrm{NS}}} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}}{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'}}{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'}} d_k^\dagger d_{k'}^\dagger - \sum_{k,k'\in K_{\mathrm{NS}}} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}}{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}} \delta_{k,k'} d_k^\dagger d_{k'}^\dagger.\end{aligned}$$

Le premier terme de cette égalité étant symétrique en k et k', il ne contribue pas au résultat en vertu des relations (2.8). Il reste donc

$$\begin{aligned}\sum_{1\leq j<\ell\leq N} c_j^\dagger c_\ell^\dagger &= -\sum_{k\in K_{\mathrm{NS}}} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}}{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}} d_k^\dagger d_{-k}^\dagger \\ &= \sum_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}}\\ k>0}} \left(\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}}{1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}} - \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}}{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}}\right) d_k^\dagger d_{-k}^\dagger \\ &= \mathrm{i} \sum_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}}\\ k>0}} \cot\frac{k}{2}\, d_k^\dagger d_{-k}^\dagger.\end{aligned}$$

De ce fait,

$$|\phi(\xi)\rangle = \cos^N\frac{\xi}{2} \exp\left(\tan\frac{\xi}{2}\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger\right) \exp\left(\mathrm{i}\tan^2\frac{\xi}{2} \sum_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}}\\ k>0}} \cot\frac{k}{2}\, d_k^\dagger d_{-k}^\dagger\right)|0\rangle.$$

Finalement, puisque

$$\exp\left(\tan\frac{\xi}{2}\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger\right) = \mathbb{I} + \tan\frac{\xi}{2}\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger$$

et

$$\exp\left(\mathrm{i}\tan^2\frac{\xi}{2} \sum_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}}\\ k>0}} \cot\frac{k}{2}\, d_k^\dagger d_{-k}^\dagger\right) = \prod_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}}\\ k>0}} \left(\mathbb{I} + \mathrm{i}\tan^2\frac{\xi}{2}\cot\frac{k}{2}\, d_k^\dagger d_{-k}^\dagger\right),$$

l'état séparable se réécrit

$$|\phi(\xi)\rangle = \cos^N\frac{\xi}{2}\left(\mathbb{I} + \tan\frac{\xi}{2}\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger\right) \prod_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}}\\ k>0}} \left[\frac{1}{\cos^2\xi/2}\left(\cos^2\frac{\xi}{2}\,\mathbb{I} + \mathrm{i}\sin^2\frac{\xi}{2}\cot\frac{k}{2}\, d_k^\dagger d_{-k}^\dagger\right)\right]|0\rangle$$

$$= \left(\mathbb{I} + \tan\frac{\xi}{2} \sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger \right) \prod_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}} \\ k>0}} \left[\cos^2\frac{\xi}{2}\,\mathbb{I} + \mathrm{i}\sin^2\frac{\xi}{2}\cot\frac{k}{2}\, d_k^\dagger d_{-k}^\dagger \right] |0\rangle. \tag{4.4}$$

Étant donné que deux états de nombres de fermions différents ne peuvent contribuer au recouvrement, nous en déduisons que les termes proportionnels à $\tan(\xi/2)\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger$ s'annulent. De (4.1) et (4.4), il s'ensuit

$$\langle \psi_0 | \phi(\xi) \rangle = \prod_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}} \\ k>0}} \left(\cos\theta_k \cos^2\frac{\xi}{2} + \sin\theta_k \sin^2\frac{\xi}{2}\cot\frac{k}{2} \right), \tag{4.5}$$

où, pour rappel, k et θ_k satisfont respectivement (2.23) et (2.30). En conséquence, la mesure géométrique de l'intrication est donnée par

$$E(\psi_0) = -2 \max_{\xi\in[0,2\pi)} \sum_{\substack{k\in K_{\mathrm{NS}} \\ k>0}} \log_2 \left| \cos\theta_k \cos^2\frac{\xi}{2} + \sin\theta_k \sin^2\frac{\xi}{2}\cot\frac{k}{2} \right|. \tag{4.6}$$

La maximisation sur le paramètre ξ peut être réalisée numériquement. Notons également qu'il est possible d'obtenir une expression similaire pour le secteur de Ramond ou encore pour les chaînes XX et XY avec conditions aux bords périodiques [9].

4.1.2 Limite thermodynamique de la densité d'intrication. À l'aide d'une approximation intégrale adéquate, nous obtenons, à partir de (4.6), la limite thermodynamique de la densité d'intrication :

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= -\frac{2}{\ln 2} \max_{\xi\in[0,2\pi)} \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{0<q\le(N-1)/2} \ln\left(\cos\theta_q \cos^2\frac{\xi}{2} + \sin\theta_q \sin^2\frac{\xi}{2}\cot\frac{\pi q}{N} \right) \\ &= -\frac{2}{\ln 2} \max_{\xi\in[0,2\pi)} \int_0^{1/2} \ln\left(\cos\theta \cos^2\frac{\xi}{2} + \sin\theta \sin^2\frac{\xi}{2}\cot\pi\mu \right) \mathrm{d}\mu, \end{aligned}$$

où $\theta = \theta(\mu, J, h)$ satisfait [2]

$$\tan 2\theta = \frac{J\sin 2\pi\mu}{J\cos 2\pi\mu + h}. \tag{4.7}$$

La dérivée $\partial_h \mathcal{E}$ peut être évaluée explicitement. La fonction à maximiser est

$$F(\xi, J, h) = \int_0^{1/2} \ln\left(\cos\theta \cos^2\frac{\xi}{2} + \sin\theta \sin^2\frac{\xi}{2}\cot\pi\mu \right) \mathrm{d}\mu$$

et les solutions stationnaires $\xi^* = \xi^*(J, h)$ satisfont la condition

$$\begin{aligned} \partial_\xi F(\xi, J, h)\Big|_{\xi=\xi^*} &= -\frac{1}{2}\sin\xi^* \int_0^{1/2} \frac{\cos\theta - \sin\theta\cot\pi\mu}{\cos\theta\cos^2(\xi^*/2) + \sin\theta\sin^2(\xi^*/2)\cot\pi\mu}\,\mathrm{d}\mu \\ &= 0. \end{aligned} \tag{4.8}$$

2. Il s'agit de la limite continue de la condition (2.30).

Soit $\xi^*(h)$ une telle solution à J fixé. Alors

$$\partial_h \mathcal{E} = -\frac{2}{\ln 2}\left(\partial_h \xi^*(h)\, \partial_\xi F(\xi, h)\Big|_{\xi=\xi^*} + \partial_h F(\xi^*, h)\right).$$

Le premier terme de cette expression s'annule identiquement en vertu de la condition (4.8). De là, à l'aide des formules trigonométriques de Carnot et de (4.7), nous déduisons

$$\partial_h \mathcal{E} = -\frac{J}{\ln 2}\int_0^{1/2} \frac{\sin 2\pi\mu}{\lambda_\mu^2}\left[\sqrt{\frac{\lambda_\mu - (h + J\cos 2\pi\mu)}{\lambda_\mu}}\cos^2\frac{\xi^*}{2} - \sqrt{\frac{\lambda_\mu + (h + J\cos 2\pi\mu)}{\lambda_\mu}}\sin^2\frac{\xi^*}{2}\right.$$
$$\left.\cot\pi\mu\right] \Bigg/ \left[\sqrt{\frac{\lambda_\mu + (h + J\cos 2\pi\mu)}{\lambda_\mu}}\cos^2\frac{\xi^*}{2} + \sqrt{\frac{\lambda_\mu - (h + J\cos 2\pi\mu)}{\lambda_\mu}}\sin^2\frac{\xi^*}{2}\cot\pi\mu\right] \mathrm{d}\mu,$$

où $\lambda_\mu = (J^2 + h^2 + 2Jh\cos 2\pi\mu)^{1/2}$.

Pour déterminer le comportement au voisinage du point critique $h_c = J$, nous considérons $h > J$ et définissons $\epsilon = h - J$. Le changement de variable $t = h + J\cos 2\pi\mu - \epsilon$ nous conduit à

$$\partial_h \mathcal{E} = -\frac{J}{2\pi \ln 2}\int_0^{2J} \frac{1}{\lambda_t^2}\left[\sqrt{2J - t}\sqrt{\lambda_t - (t+\epsilon)}\cos^2\frac{\xi^*}{2} - \sqrt{t}\sqrt{\lambda_t + (t+\epsilon)}\sin^2\frac{\xi^*}{2}\right]$$
$$\Bigg/\left[\sqrt{2J - t}\sqrt{\lambda_t + (t+\epsilon)}\cos^2\frac{\xi^*}{2} + \sqrt{t}\sqrt{\lambda_t - (t+\epsilon)}\sin^2\frac{\xi^*}{2}\right]\mathrm{d}t, \tag{4.9}$$

avec maintenant $\lambda_t = (2(J+\epsilon)t + \epsilon^2)^{1/2}$. Sous cette forme, nous observons que $\partial_h \mathcal{E}$ diverge lorsque $\epsilon \to 0$, c'est-à-dire lorsque $h \to h_c = J$. Les contributions divergentes proviennent de $t \to 0$. Si l'on sépare l'intégrale en

$$\int_0^{2J} = \int_0^{\delta} + \int_{\delta}^{2J}, \quad \delta \ll 1,$$

on peut montrer qu'au premier ordre en ϵ, lorsque $h \to h_c$ [9],

$$\partial_h \mathcal{E} \propto -\ln|h - J|.$$

Autrement dit, dans la limite thermodynamique, la dérivée de la mesure géométrique de l'intrication diverge logarithmiquement au voisinage du point critique $h_c = J$. L'évaluation numérique de l'intégrale (4.9) est discutée dans la section 4.1.5.

4.1.3 Densité d'intrication des régimes limites. Pour les régimes $h \gg J$ et $h \ll J$ discutés dans la section 2.4, il est possible de déterminer la mesure géométrique de l'intrication de l'état fondamental sans recourir à son expression exacte (4.1).

Considérons tout d'abord le régime $h \gg J$. Lorsque $h \to +\infty$, l'état fondamental est $|\psi_0\rangle \simeq |\uparrow\rangle^{\otimes N}$ et est clairement séparable. À l'inverse, pour $h \to -\infty$, $|\psi_0\rangle \simeq |\downarrow\rangle^{\otimes N}$, qui est également séparable. Dans les deux cas, nous obtenons respectivement

$$\mathcal{E}_N = 0, \quad \xi_{\max}^{(h>0)} = \pi, \quad \xi_{\max}^{(h<0)} = 0,$$

ceci, quelle que soit la taille de la chaîne.

Considérons ensuite le régime $h \ll J$. L'état fondamental pour $h \neq 0$ et $N < \infty$ est pour rappel donné par $\left|\psi_0^+\right\rangle = \left(|\rightarrow\rangle^{\otimes N} + |\leftarrow\rangle^{\otimes N}\right)/\sqrt{2}$. Ainsi,

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_N &= -\frac{2}{N}\log_2\left(\max_{\xi\in[0,2\pi)} 2^{-1/2}\left(2^{-N/2}\left(\cos\frac{\xi}{2}+\sin\frac{\xi}{2}\right)^N + 2^{-N/2}\left(\cos\frac{\xi}{2}-\sin\frac{\xi}{2}\right)^N\right)\right)\\ &= \frac{1}{N}.\end{aligned}$$

Dans la limite thermodynamique $N \to \infty$, l'état fondamental brise la symétrie $\mathbb{Z}_2$ du hamiltonien ; le système choisit soit $|\psi_0\rangle = |\rightarrow\rangle^{\otimes N}$, soit $|\psi_0\rangle = |\leftarrow\rangle^{\otimes N}$. Pour ces deux états, nous avons

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_N &= -\frac{2}{N}\log_2\left(\max_{\xi\in[0,2\pi)}\left(2^{-N/2}\left(\cos\frac{\xi}{2}\pm\sin\frac{\xi}{2}\right)^N\right)\right)\\ &= 0,\end{aligned}$$

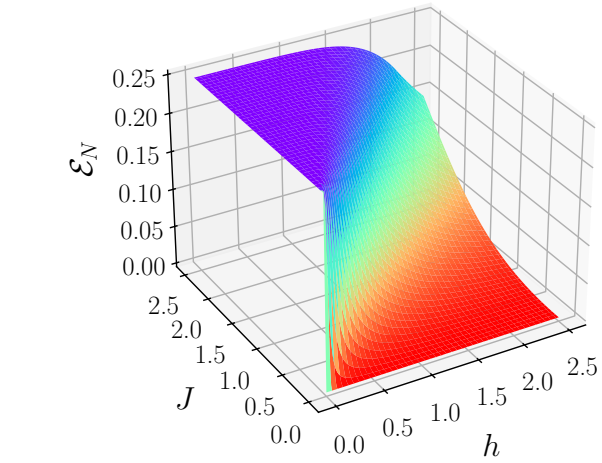
avec respectivement

$$\xi_{\max}^{(\rightarrow)} = \frac{\pi}{2}, \quad \xi_{\max}^{(\leftarrow)} = \frac{3\pi}{2}.$$

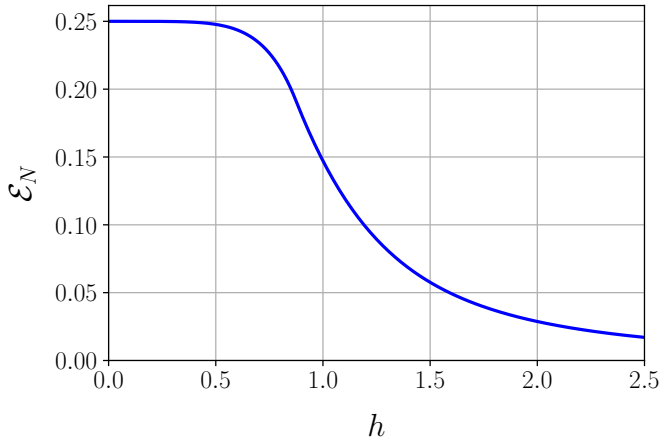
Dans les sections suivantes, nous calculons la densité d'intrication à partir de l'état fondamental exact (4.1) du système. Les résultats ainsi obtenus sont en accord avec ceux présentés ci-avant.

4.1.4 Résultats numériques pour N fini. La maximisation numérique sur le paramètre ξ de (4.6) peut être réalisée dans un premier temps pour N fini.

Les Figs. 4.1 illustrent la densité d'intrication $\mathcal{E}_N$ pour $N = 4$ de l'état fondamental en fonction des paramètres J et h. On observe que, lorsque l'interaction entre plus proches voisins domine ($h \ll J$), la densité d'intrication est constante et non nulle ; l'état fondamental est fortement intriqué. Au fur et à mesure que l'on se rapproche du point $h = J$, celle-ci décroît, jusqu'à tendre vers une valeur nulle lorsque l'interaction avec le champ magnétique est importante ($h \gg J$).



(a)



(b)

FIGURE 4.1 – Densité d'intrication $\mathcal{E}_N = \mathcal{E}_N(J, h)$ de la chaîne d'Ising périodique pour $N = 4$. (a) En fonction de J. (b) À $J = 1$ fixé

Sur la Fig. 4.2, nous avons illustré la densité d'intrication $\mathcal{E}_N$, à $J = 1$ fixé, pour différentes valeurs croissantes de N. À nouveau, lorsque $h < 1$, la densité d'intrication est constante et non nulle. Au voisinage du point $h = 1$ et pour une taille de chaîne suffisamment importante, elle augmente, puis décroît passé ce point. Plus le nombre de spins N sur la chaîne est grand, plus cette augmentation de l'intrication autour de $h = 1$ est marquée, comme le confirme la limite thermodynamique du système (voir les Figs. 4.4).

Soulignons que les résultats de cette section ont été confirmés par une analyse numérique en taille finie (qui n'est pas présentée dans ce travail) des recouvrements maximaux à partir du hamiltonien non diagonal (2.19), sans recourir à la forme fermée (4.6).

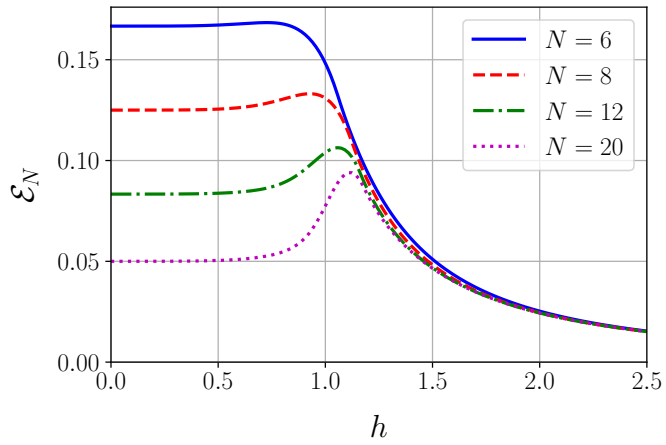
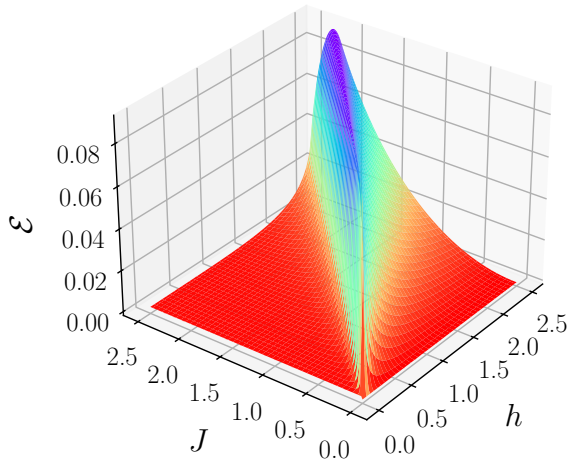


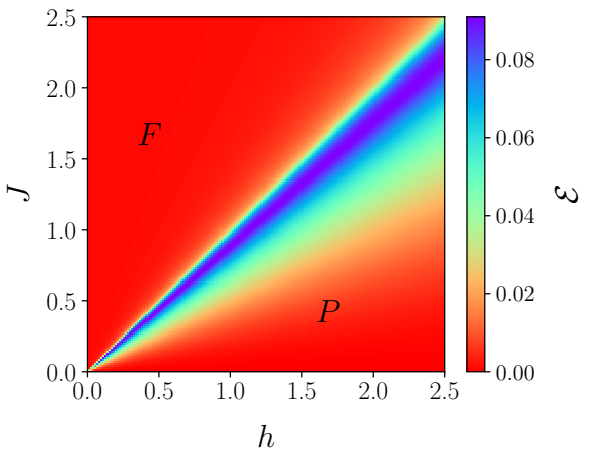
FIGURE 4.2 – Comparaison de la densité d'intrication $\mathcal{E}_N = \mathcal{E}_N(J, h)$ de la chaîne d'Ising périodique pour différentes valeurs finies de N, à $J = 1$ fixé

4.1.5 Résultats numériques dans la limite thermodynamique. L'avantage de la forme fermée (4.6) réside en la possibilité de la simuler numériquement pour des grandes tailles de chaîne. Dans la suite, nous présentons les calculs pour $N = 10^3$, qui constitue une bonne approximation numérique de la limite $N \to \infty$. Les résultats obtenus sont en accord avec ceux attendus (voir les discussions des sections 2.4 et 4.1.3).

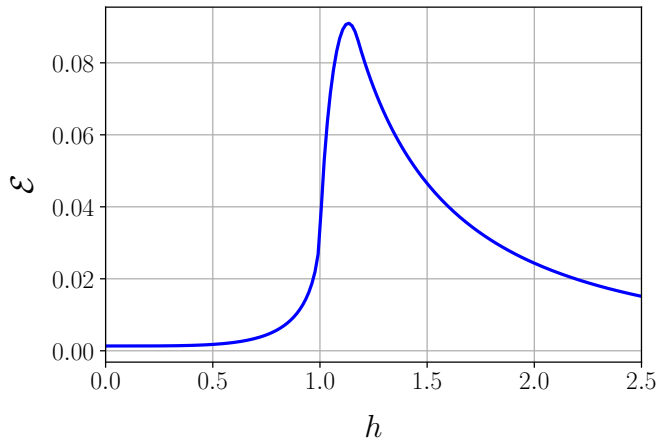
Nous présentons sur les Fig. 4.4 (a) et (c) la limite thermodynamique $\mathcal{E}$ de la densité d'intrication de la chaîne d'Ising avec conditions aux bords périodiques. On observe une importante augmentation de l'intrication de l'état fondamental autour d'une valeur critique $h_c = J$, le maximum global étant atteint en $h \simeq 1.14$ et correspondant à un état très fortement intriqué. On remarque également que, dans les deux cas limites $h \gg J$ et $h \ll J$, l'état fondamental est faiblement intriqué.



(a)



(b)



(c)

FIGURE 4.4 – Densité d'intrication $\mathcal{E} = \mathcal{E}(J, h)$ de la chaîne d'Ising périodique pour $N = 10^3$. (a) En fonction de J. (b) Diagramme de phase. (c) À $J = 1$ fixé

Ce changement significatif dans le comportement de l'état fondamental du système au voisinage de $h_c = J$ est typique d'une transition de phase purement quantique. Notre analyse en termes de la mesure géométrique de l'intrication indique que ce changement se traduit par une augmentation des corrélations entre les états de spin du fondamental.

La Fig. 4.4 (b) illustre quant à elle le diagramme de phase de la densité d'intrication $\mathcal{E}$ dans la limite thermodynamique. La transition de phase quantique y est clairement marquée : la ligne critique d'équation $h(J) = J$ délimite les phases ferromagnétique (F) et paramagnétique (P) respectivement associées aux deux régimes limites $h \ll J$ et $h \gg J$. À nouveau, on observe que le maximum global de la densité d'intrication ne se produit pas exactement au point critique $h_c = J$.

À titre d'information, nous montrons sur la Fig. 4.5 l'évolution, dans la limite thermodynamique, du paramètre $\xi_{\max}$ en fonction de h. Ici, nous avons également considéré les valeurs $h \leq 0$. On observe que l'analyse de $\xi_{\max}$ discutée dans la section 4.1.3 pour les deux régimes limites $h \gg J$ et $h \ll J$ est correcte. En effet, dans les deux cas, l'état fondamental n'est pas intriqué.

Au point critique $h_c = 1$, nous avons calculé $\xi_{\max} \simeq 0.90732$, ce qui est similaire au résultat $\xi_{\max} \simeq 0.897101$, obtenu numériquement par Wei et ses collaborateurs pour $N = 10^4$ [50].

On note également la non différentiabilité de la courbe au voisinage de $|h| \simeq 1.14$, correspondant au maximum de la densité d'intrication.

Finalement, comme mentionné dans la section 4.1.2, la dérivée $\partial_h \mathcal{E}$ est également un indicateur de la présence d'une transition de phase quantique dans le modèle. Elle peut être évaluée numériquement à l'aide de l'expression (4.9). Le résultat est illustré pour

$J = 1$ sur la Fig. 4.6. On retrouve la divergence logarithmique au voisinage du point critique, prédite de manière analytique dans la section 4.6 et marquant la transition de phase quantique du deuxième ordre, ainsi qu'un minimum global non différentiable en $h \simeq 1.14$.

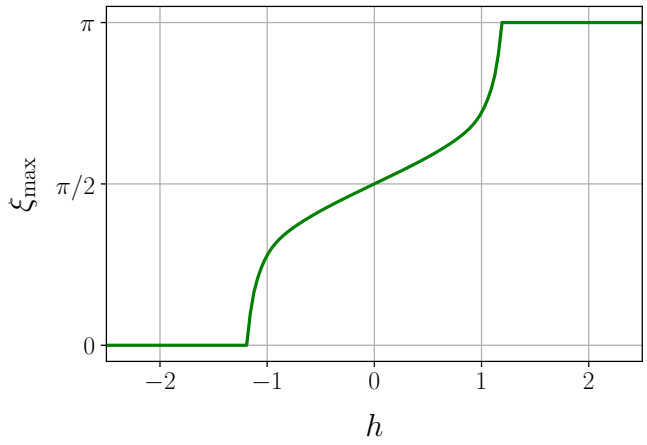


FIGURE 4.5 – Evolution du paramètre $\xi_{\max} = \xi_{\max}(J, h)$ de la chaîne d'Ising périodique, à $J = 1$ fixé et pour $N = 10^3$

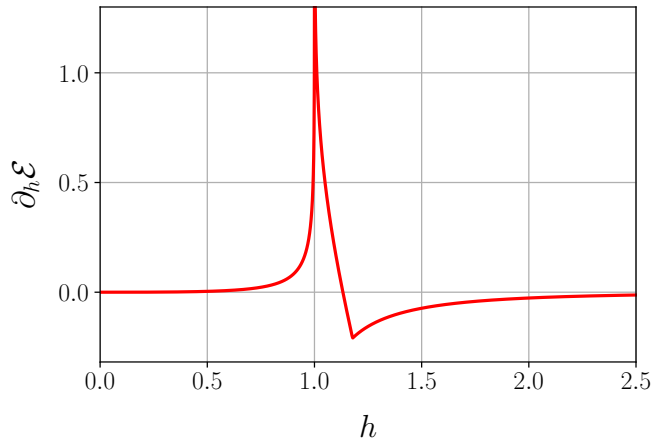
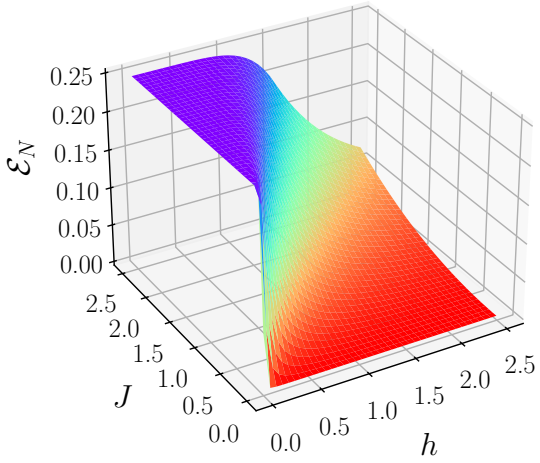


FIGURE 4.6 – Graphe de la fonction $\partial_h \mathcal{E} = \partial_h \mathcal{E}(J, h)$ pour la chaîne d'Ising périodique, à $J = 1$ fixé et pour $N = 10^3$

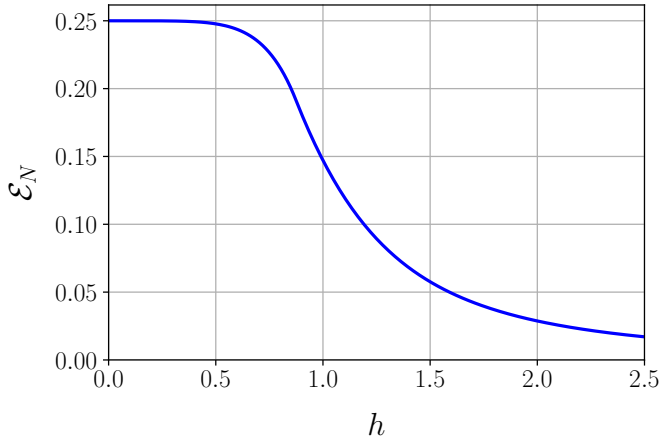
Soulignons qu'en comparant les valeurs de la pente $\partial_h \mathcal{E}_N$ au voisinage du point critique avec les valeurs de $\partial_h \mathcal{E}_N|_{h=h_{\max}}$ pour N suffisamment important, avec $h_{\max}$ la valeur du champ maximisant la pente, il est possible de retrouver les valeurs connues de l'exposant de la longueur de corrélation $L_c \sim |h - h_c|^{-\nu}$ pour le modèle, à savoir $\nu = 1$ [9].

4.2 Intrication de l'état fondamental de la chaîne d'Ising ouverte

4.2.1 Résultats numériques pour N fini. Pour les conditions aux bords ouvertes, l'absence d'invariance sous translation de la chaîne d'Ising ne justifie pas de poser $\xi_j = \xi$ et $\delta_j = \delta$ pour tout $j \in \{1, \ldots, N\}$, tout comme c'était le cas des conditions aux bords périodiques. En conséquence, pour déterminer la mesure géométrique de l'intrication de l'état fondamental, nous réalisons la maximisation sur les $2N$ paramètres $\{\xi_j, \delta_j\}$ avec l'ansatz (4.2). Pour celui-ci, il semble difficile de déterminer une forme fermée similaire à (4.6), ce pourquoi nous nous restreignons à une analyse numérique.



(a)



(b)

FIGURE 4.7 – Densité d'intrication $\mathcal{E}_N = \mathcal{E}_N(J, h)$ de la chaîne d'Ising ouverte pour $N = 4$. (a) En fonction de J. (b) À $J = 1$ fixé

Les résultats pour la densité d'intrication $\mathcal{E}_N$ d'une chaîne ouverte de taille $N = 4$ sont similaires à ceux des conditions aux bords périodiques, mais pas identiques, comme le

montre la Fig. 4.7.

En comparaison avec les conditions aux bords périodiques (voir la Fig. 4.1), nous remarquons que la chaîne d'Ising ouverte est plus sensible à l'introduction d'un faible champ externe ; la densité d'intrication présente un comportement similaire à celle de la chaîne périodique, mais pour de plus faibles valeurs du champ. La raison en est que l'absence des termes de bords dans son hamiltonien introduit une différence dans la polarisation des états de spin du fondamental, influençant alors les corrélations entre ces états. Toutefois, lorsque $h \gg J$ ou encore $h \ll J$, le comportement de la densité d'intrication est similaire à celui de la chaîne périodique.

Sur la Fig. 4.8 est illustrée, en fonction de h et pour $N = 4$, l'évolution des paramètres $\{\xi_j\}$. Par souci de clarté, nous avons délibérément décalé les courbes de ces paramètres. En effet, la maximisation numérique a fourni les relations

$$\xi_1^{(\max)} = \xi_4^{(\max)}, \quad \xi_2^{(\max)} = \xi_3^{(\max)},$$

mettant en évidence l'absence d'invariance sous translation du système. Ce résultat était prévisible.

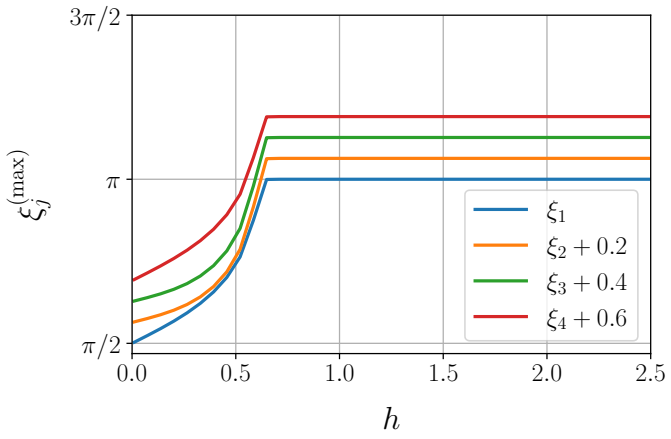


FIGURE 4.8 – Evolution des paramètres $\xi_j^{(\max)} = \xi_j^{(\max)}(J, h)$ de la chaîne d'Ising ouverte, à $J = 1$ fixé et pour $N = 4$

L'évolution des facteurs de phase $\{\delta_j\}$ est quant à elle illustrée sur la Fig. 4.9. Cette fois, la maximisation a fourni

$$\delta_1^{(\max)} = \delta_2^{(\max)} = \cdots = \delta_4^{(\max)} = 0.$$

Ce résultat était attendu puisque l'état fondamental de la chaîne ouverte est à nouveau un vecteur propre de Perron. Cela nous permet de simplifier l'ansatz (4.2) et, par conséquent, de restreindre la maximisation numérique aux N paramètres $\{\xi_j\}$.

Nous avons pu vérifier ces résultats pour d'autres tailles N du système. Dans chaque cas, il est apparu que, pour tous $j \in \{2, \dots, N-1\}$ et $k \in \{1, \dots, N\}$,

$$\xi_1^{(\max)} = \xi_N^{(\max)}, \quad \xi_j^{(\max)} = \xi_{N+1-j}^{(\max)}, \quad \delta_k^{(\max)} = 0.$$

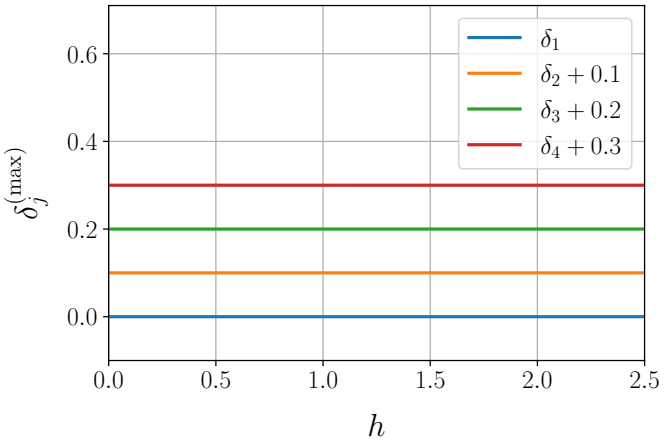


FIGURE 4.9 – Evolution des paramètres $\delta_j^{(\max)} = \delta_j^{(\max)}(J, h)$ de la chaîne d'Ising ouverte, à $J = 1$ fixé et pour $N = 4$

Sur la Fig. 4.10, nous avons illustré les densités d'intrication $\mathcal{E}_N$ pour différentes tailles N finies de la chaîne ouverte. Elles sont à comparer avec celles des conditions aux bords périodiques (voir la Fig. 4.2). À nouveau, on note un comportement de la densité d'intrication similaire à celui de la chaîne périodique lorsque $h \gg J$ et $h \ll J$, ainsi qu'une sensibilité au champ magnétique plus importante pour les conditions aux bords ouvertes.

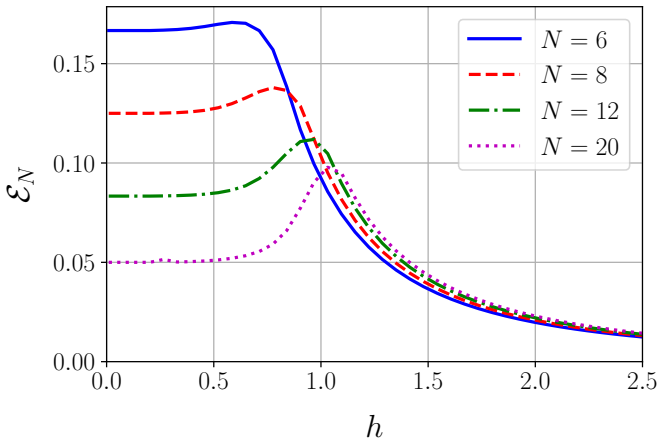


FIGURE 4.10 – Comparaison de la densité d'intrication $\mathcal{E}_N = \mathcal{E}_N(J, h)$ de la chaîne d'Ising ouverte pour différentes valeurs finies de N, à $J = 1$ fixé

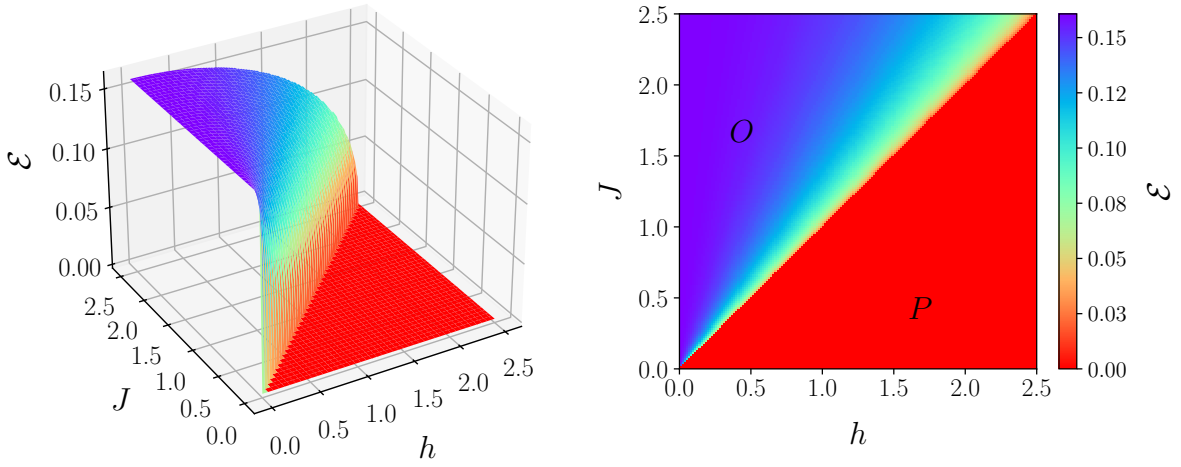
Soulignons que la complexité numérique de l'évaluation du recouvrement $\langle\psi_0|\phi(\xi_j,\delta_j)\rangle$ pour l'ansatz (4.2) ne nous permet pas de calculer la densité d'intrication $\mathcal{E}_N$ pour de grandes tailles de chaîne [3]. Cependant, nous observons que plus la taille du système croît, plus les résultats obtenus pour la chaîne ouverte coïncident avec ceux des conditions périodiques (voir par exemple le cas $N = 20$ des Figs. 4.2 et 4.10).

À nouveau, il est à noter que nous avons corroboré les résultats de cette section, obtenus via le hamiltonien diagonal, directement par une analyse numérique des recouvrements maximaux de l'état fondamental du hamiltonien non diagonal (2.4).

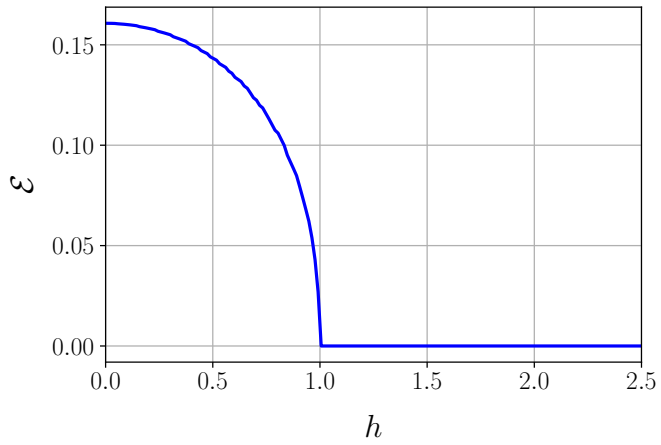
4.3 Intrication de l'état fondamental de la chaîne XX

Il est instructif de comparer la mesure géométrique de l'intrication des états fondamentaux des chaînes XX et d'Ising. En effet, cette dernière n'est pas la seule à présenter une transition de phase quantique dans la limite thermodynamique.

Nous présentons sur la Fig. 4.12 une bonne approximation numérique de la limite thermodynamique ($N = 10^3$) de la densité d'intrication $\mathcal{E}$ de la chaîne XX périodique, pour laquelle une forme fermée similaire à (4.6) peut être obtenue à partir des résultats de l'annexe A. On observe que, contrairement à la chaîne d'Ising, l'état fondamental de la chaîne XX est fortement intriqué dans le régime $h \ll J$. Au fur et à mesure que le champ magnétique augmente, la densité décroît rapidement pour atteindre une valeur identiquement nulle au point critique $h_c = J$. Ce comportement très différent du modèle était attendu : la chaîne XX n'appartient pas à la même classe d'universalité que les chaînes XY et d'Ising.



3. L'emploi initial de matrices denses dans la simulation numérique s'est rapidement révélé limité pour $N > 12$. Le recours à des matrices creuses, suggéré par l'assistant IA [51], a permis une réduction significative du temps de calcul.



(c)

FIGURE 4.12 – Densité d'intrication $\mathcal{E} = \mathcal{E}(J, h)$ de la chaîne XX périodique pour $N = 10^3$. (a) En fonction de J. (b) Diagramme de phase. (c) À $J = 1$ fixé

En effet, la ligne critique d'équation $h(J) = J$ marque une transition de phase quantique du premier ordre, séparant ainsi une phase paramagnétique (P), similaire à celle du modèle d'Ising, d'une phase ordonnée (O), dans laquelle il n'y a pas de gap énergétique [52].

Sur la Fig. 4.13 est illustrée la dérivée $\partial_h \mathcal{E}$ de la densité d'intrication pour la chaîne XX dans la limite thermodynamique. Elle a été obtenue de façon numérique à partir d'une expression intégrale similaire à (4.9) et est à comparer avec la Fig. 4.6. Au point critique $h_c = J$, la fonction diverge, indiquant à nouveau la transition de phase quantique du modèle. Il est également possible d'en obtenir, de façon analytique, le comportement asymptotique au voisinage du point critique [9] :

$$\partial_h \mathcal{E} \propto -\frac{1}{\sqrt{J-h}},$$

ce qui confirme l'appartenance à une autre classe d'universalité que la chaîne d'Ising.

4.4 Intrication de l'état fondamental de la chaîne XY

Il est clair que les résultats obtenus pour les chaînes d'Ising et XX dans la limite thermodynamique doivent pouvoir être déduits de la chaîne plus générale XY. Pour le vérifier, nous en avons également réalisé la diagonalisation et calculé une forme fermée de l'intrication de son fondamental, similaire à (4.6). Ce faisant, nous avons pu calculer numériquement la densité d'intrication $\mathcal{E}$ en fonction des paramètres h et γ. Les résultats obtenus sont en accord avec [9].

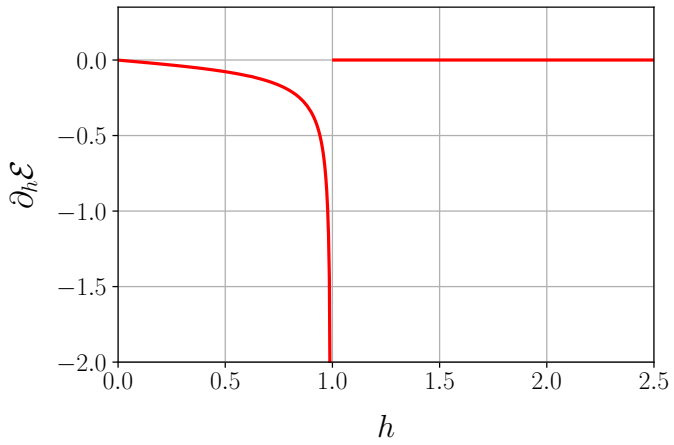


FIGURE 4.13 – Graphe de la fonction $\partial_h \mathcal{E} = \partial_h \mathcal{E}(J, h)$ pour la chaîne XX périodique, à $J = 1$ fixé et pour $N = 10^3$

La Fig. 4.14 illustre la limite thermodynamique de la densité d'intrication $\mathcal{E}$ de la chaîne XY. On observe un comportement du modèle plus riche que celui des cas particuliers $\gamma = 0$ (XX) et $\gamma = 1$ (Ising). En effet, le système présente, dans la limite thermodynamique, trois phases. Celles-ci sont caractérisées par le comportement à grande distance de leur fonction de corrélation spin-spin [53].

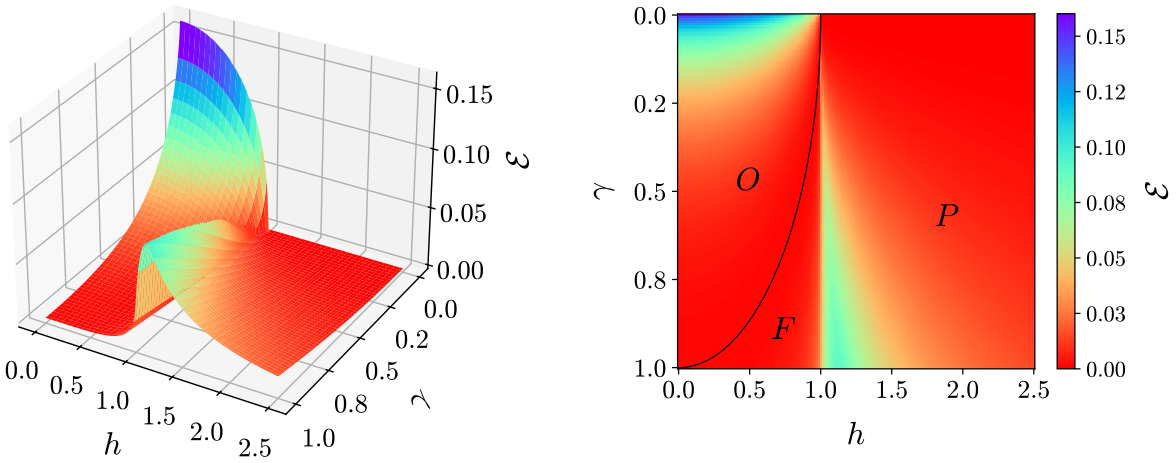


FIGURE 4.14 – Densité d'intrication $\mathcal{E} = \mathcal{E}(J, h, \gamma)$ de la chaîne XY périodique, à $J = 1$ fixé et pour $N = 10^3$. (a) Graphe de la fonction. (b) Diagramme de phase

La courbe critique d'équation $h^2 + \gamma^2 = 1$, le long de laquelle densité d'intrication s'annule identiquement [9], divise la phase ferromagnétique ($h < J$) en une phase ordonnée oscillatoire (O), qui présente des oscillations dans sa fonction de corrélation, et une phase

ordonnée ferromagnétique (F), dont la fonction de corrélation décroit de manière exponentielle.

De plus, on retrouve la présence de la ligne critique $h_c = 1$ de "type Ising", indiquant la transition de phase quantique propre à la famille XY de modèles anisotropes ($\gamma \neq 0$) [52].

4.5 Intrication du premier état excité de la chaîne d'Ising

4.5.1 Chaîne d'Ising périodique. En complément de l'étude de l'état fondamental (4.1) de la chaîne d'Ising, il est pertinent d'examiner ses états excités. Ces derniers sont pour rappel construits de la façon suivante :

$$|\psi\rangle = \prod_{j=1}^{m} \eta_{k_j}^{\dagger} |\psi_0\rangle,$$

avec $m \in \{1, \ldots, N\}$. Notons

$$|\psi_1\rangle = \eta_{k_1}^{\dagger} |\psi_0\rangle \tag{4.10}$$

le premier état excité, constitué d'un seul fermion de Bogoliubov de mode k_1 et d'énergie $E_1 = 2\lambda_{k_1} + E_0 > E_0$.

La Fig. 4.15 compare la densité d'intrication $\mathcal{E}_N$ de ce premier état excité pour différentes tailles N du modèle. De façon analogue à ce qui a été obtenu précédemment pour l'état fondamental, l'état excité est intriqué dans le régime $h \ll J$, l'intrication par site prenant la valeur $1/N$.

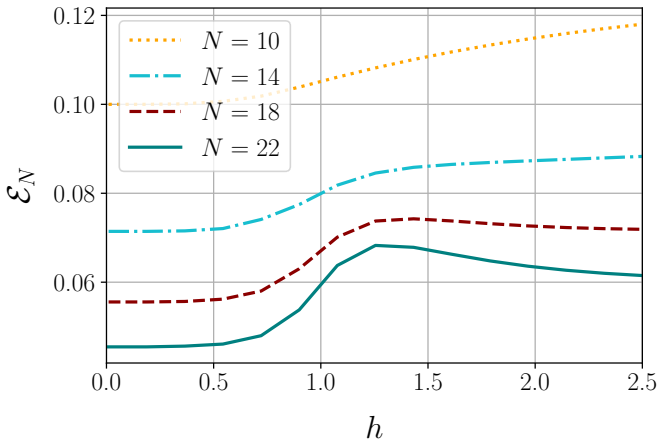


FIGURE 4.15 – Comparaison de la densité d'intrication $\mathcal{E}_N$ du premier état excité de la chaîne d'Ising périodique pour différentes valeurs finies de N, à $J = 1$ fixé

On constate également une augmentation significative de l'intrication au voisinage du point critique, situé en $h_c = 1$. Cette augmentation est d'autant plus marquée que la taille du système est importante et suggère, dans la limite thermodynamique, un renforcement important des corrélations entre les états de spin du système au voisinage de ce point. À nouveau, il semble que le maximum global associé à cette augmentation soit atteint après le point critique.

Un contraste notable avec l'état fondamental réside dans le comportement asymptotique de l'intrication lorsque $h \to +\infty$. Tandis que l'intrication de l'état fondamental tend vers zéro dans cette limite, celle-ci ne s'annule pas pour le premier état excité. Cette intrication résiduelle suggère que l'excitation (sous forme de quasi-particule de Bogoliubov) conserve un caractère délocalisé, maintenant une intrication non triviale même en présence d'un fort champ transversal.

4.5.2 Chaîne d'Ising ouverte. Les résultats obtenus pour les conditions aux bords ouvertes sont similaires à ceux des conditions aux bords périodiques.

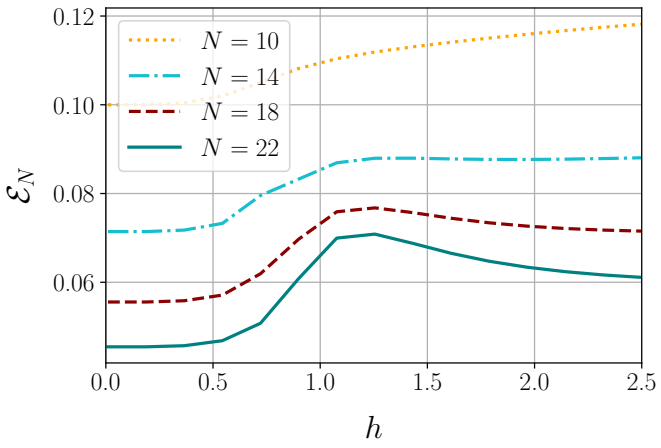


FIGURE 4.16 – Comparaison de la densité d'intrication $\mathcal{E}_N$ du premier état excité de la chaîne d'Ising ouverte pour différentes valeurs finies de N, à $J = 1$ fixé

Sur la Fig 4.16, nous avons illustré la densité d'intrication $\mathcal{E}_N$ du premier état excité pour différentes tailles N de la chaîne périodique. Elle est à comparer avec la Fig. 4.15. On constate à nouveau une augmentation significative de l'intrication au voisinage du point critique $h_c = 1$ lorsque la taille du système est suffisamment grande. Par ailleurs, tout comme pour l'état fondamental, le premier état excité se révèle plus sensible à la perturbation induite par un faible champ magnétique dans le régime $h \ll J$, ce qui se traduit par une croissance plus rapide de l'intrication lorsqu'un champ $h > 0$ est introduit. En revanche, dans le régime opposé $h \gg J$, la mesure géométrique de l'intrication est identique à celle de la chaîne périodique, comme attendu.

Chapitre V

Conclusion et Perspectives

Motivés par le caractère exactement soluble de la chaîne d'Ising quantique unidimensionnelle, nous avons dans ce mémoire étudié les propriétés d'intrication de ses états propres. Dans un premier temps, nous avons réalisé la diagonalisation du modèle, et ce, pour deux types de conditions aux bords : les conditions périodiques, très fréquemment rencontrées dans la littérature, et les conditions ouvertes. Ces dernières étant quant à elles peu explorées, leur étude nous a parue particulièrement pertinente. Ainsi, nous avons obtenu la forme diagonale du hamiltonien en termes des opérateurs fermioniques Jordan-Wigner et de Bogoliubov, l'état fondamental, les états excités et le spectre du hamiltonien du système pour chacune des conditions aux bords. Les propriétés de l'état fondamental dans les deux régimes limites $h \gg J$, $h \ll J$ et dans la limite thermodynamique $N \to \infty$ ont été brièvement évoquées.

Dans un deuxième temps, nous avons caractérisé mathématiquement le phénomène d'intrication quantique. Nous en avons donné une définition pour les états purs et les états mixtes, ainsi que des critères de séparabilité. Deux monotones d'intrication ont été présentés, l'un biparti (l'entropie d'intrication), et l'autre multiparti (la mesure géométrique de l'intrication). Cette dernière est d'intérêt dans le calcul de l'intrication des systèmes quantiques à N corps, particulièrement pour la chaîne d'Ising.

À l'aide d'un choix approprié de paramétrisation, nous avons obtenu, dans un troisième temps, une forme fermée de la mesure géométrique de l'intrication pour l'état fondamental de la chaîne d'Ising périodique de taille finie. Ce faisant, nous en avons déduit la limite thermodynamique et évalué la dérivée par rapport au champ appliqué. Au premier ordre, il s'est avéré que cette dernière diverge logarithmiquement au voisinage du point critique $h_c = J$. De plus, nous avons pu évaluer numériquement, à partir de la forme fermée, la densité d'intrication de l'état fondamental pour différentes tailles de chaîne. Les résultats obtenus ont reproduit le comportement attendu du système dans les deux régimes limites $h \gg J$ et $h \ll J$, ainsi que la transition de phase quantique dans la limite thermodynamique du modèle, indiquée par une augmentation significative de l'intrication au voisinage du point critique $h_c = J$.

Dans un quatrième temps, nous avons également analysé l'influence du choix des condi-

tions aux bords sur les propriétés d'intrication du système. Il a été observé numériquement que l'intrication de l'état fondamental est essentiellement la même pour les conditions aux bords ouvertes et périodiques lorsque $h \ll J$ et $h \gg J$. Toutefois, au voisinage du point critique $h_c = J$, son comportement diffère légèrement : la chaîne ouverte se révèle plus sensible à la perturbation induite par l'introduction d'un faible champ magnétique. Une tendance similaire a été observée dans le calcul de l'intrication du premier état excité. Bien que limités par la complexité de la simulation numérique, nous avons montré que ces différences s'amenuisent lorsque la taille N du système augmente. Dans la limite thermodynamique, on s'attend effectivement à ce que les résultats obtenus soient identiques.

Finalement, à l'aide de techniques de diagonalisation similaires à celles appliquées à la chaîne d'Ising et permettant d'obtenir une forme fermée de la mesure géométrique de l'intrication, nous avons pu calculer la densité d'intrication de l'état fondamental des chaînes XX et XY soumises aux conditions aux bords périodiques. Ainsi, nous avons ainsi pu reproduire les comportements critiques de ces modèles, comme la ligne critique $h_c = J$ pour la chaîne XX ou la courbe critique $h^2 + \gamma^2 = 1$ pour la chaîne XY, tels qu'ils ont été investigués par Wei et ses collaborateurs grâce à la mesure géométrique de l'intrication [9], ou encore par Radgohar et Montakhab à l'aide de la mesure de Meyer-Wallach de l'intrication [15].

Comme nous l'avons mis en évidence dans ce travail, l'intrication quantique constitue un indicateur pertinent pour détecter les transitions de phase quantiques (à température nulle) dans les chaînes de spins. La mesure géométrique de l'intrication, appliquée aux états purs N-partis de ces systèmes, apparaît comme une candidate sérieuse à cette fin. Au-delà de cet intérêt fondamental, l'étude de l'intrication intervient de manière essentielle dans plusieurs domaines émergents de la physique et de l'informatique quantiques, notamment dans la compréhension des systèmes à plusieurs corps [54], mais aussi dans la sécurisation des communications par cryptographie quantique [55].

Au regard de ces observations, plusieurs améliorations et prolongements peuvent être envisagés pour la chaîne d'Ising.

Concernant spécifiquement les conditions aux bords ouvertes de la chaîne d'Ising, il serait pertinent d'explorer deux directions complémentaires : d'une part, l'optimisation des temps de calcul par une amélioration algorithmique ou numérique de la simulation, d'autre part, la recherche d'autres paramétrisations pour la famille d'états séparables $\{|\phi\rangle\}$. Une telle approche permettrait potentiellement d'étendre l'étude de la densité d'intrication de l'état fondamental à des chaînes de spins de plus grande taille, et ainsi d'approfondir l'analyse en taille finie de l'impact des conditions aux bords sur les propriétés du système.

Par ailleurs, l'obtention (si cela est possible) d'une expression analytique fermée pour la mesure géométrique de l'intrication, comparable à celle existant dans le cas de conditions aux bords périodiques, faciliterait grandement cet objectif.

Aussi, Wei et ses collaborateurs ont-ils mis en évidence une loi d'échelle au point

critique $h_c = 1$ de la forme

$$\mathcal{E}_N \sim \mathcal{E}_\infty + \frac{b}{N} + \frac{c}{N^2}$$

pour la densité d'intrication de la chaîne d'Ising périodique, avec $\mathcal{E}_\infty \simeq 0$, $b \simeq 1$ (resp. $b \simeq 0.5$) et $c \simeq -1.4$ (resp. $c \simeq 2.9$) pour l'état fondamental du secteur de Neveu-Schwarz (resp. Ramond) [9]. Pour d'autres valeurs $\gamma \neq 0$ du paramètre d'anisotropie, ils ont observé des résultats similaires, et en particulier les relations

$$b_{\mathrm{NS}} \simeq 2b_{\mathrm{R}}, \quad c_{\mathrm{NS}} \simeq -\frac{c_{\mathrm{R}}}{2}.$$

Ces coefficients ont été obtenus à partir d'un ajustement numérique de la densité d'intrication pour des tailles de chaîne comprises entre $N = 10^2$ et $N = 10^3$. La correction en b/N s'est par ailleurs avérée être reliée à l'entropie d'Affleck-Ludwig [49]. Il serait donc instructif de réaliser un ajustement analogue pour les conditions aux bords ouvertes, dans le but d'établir d'éventuelles connexions avec la théorie conforme des champs.

Que l'on considère des conditions aux limites ouvertes ou périodiques, plusieurs pistes de recherche prometteuses émergent naturellement de ce travail. Une première direction serait d'étendre le calcul de la mesure géométrique de l'intrication et de sa dérivée aux autres états excités de la chaîne d'Ising quantique. Une telle étude permettrait d'établir si ces états présentent, comme l'état fondamental et le premier état excité, un comportement particulier au voisinage du point de transition quantique $h_c = J$, et d'en caractériser les éventuelles différences. L'analyse comparative des propriétés d'intrication entre état fondamental et états excités pourrait notamment révéler des signatures universelles de la transition de phase dans le spectre complet du hamiltonien.

Une deuxième voie de recherche consisterait à investiguer le comportement de l'état fondamental au voisinage du point $h \simeq 1.14$, qui, comme nous l'avons vu, est un maximum global de la densité d'intrication $\mathcal{E}$ dans la limite thermodynamique, ainsi qu'un point en lequel sa dérivée $\partial_h \mathcal{E}$ n'est pas différentiable.

D'autre part, une troisième piste de recherche serait de considérer l'intrication de l'état fondamental non plus par rapport à tous les spins de la chaîne, comme c'était le cas de ce travail, mais entre des blocs de spins de la chaîne. Un choix judicieux de paramétrisation pour l'état séparable

$$|\phi\rangle = \bigotimes_{j=1}^{N/2} \left|\phi^{[2j-1,2j]}\right\rangle$$

permettrait d'évaluer l'intrication entre des blocs de deux spins. On pourrait également considérer

$$|\phi\rangle = \bigotimes_{j=1}^{N/L} \left|\phi^{[Lj-L-1,\ldots,Lj]}\right\rangle,$$

dans le but de la calculer pour des blocs de L spins.

Finalement, une piste de recherche pouvant présenter un intérêt théorique considérable serait d'évaluer la mesure géométrique de l'intrication dans le cadre d'autres modèles de spins exactement solubles. Le formalisme de ce travail pourrait par exemple être étendu aux chaînes avec interactions aléatoires entre les plus proches voisins [56], ou encore celles soumises à un champ magnétique aléatoire [57]. Considérer également des modèles de type "cluster", pour lesquels les interactions s'étendent au-delà des premiers voisins [54], pourrait révéler de nouvelles classes d'états fortement intriqués ou d'autres formes de comportements critiques. Enfin, l'analyse de l'influence d'autres types de conditions aux bords mériterait d'être approfondie, en considérant par exemple une condition fixe où l'un des spins de la chaîne — typiquement le premier ou le dernier — est maintenu dans un état déterminé [58].

Bibliographie

[1] E. Ising. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Z. Phys.* **31** (1925), 253-258.

[2] B. Diu et al. *Éléments de Physique Statistique*. Collection Enseignement des sciences. Paris : Hermann, 2007.

[3] S. Suzuki, J.-i. Inoue et B. Chakrabarti. *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models*. T. 862. Springer, 2013.

[4] W. Heisenberg. Zur Theorie des Ferromagnetismus. *Z. Phys.* **49** (1928), 619-636.

[5] E. Lieb, T. Schultz et D. Mattis. Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain. *Ann. Phys. (N.Y.)* **16** (1961), 407-466.

[6] R. J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Dover Publications, 2013.

[7] E. Barouch, B. M. McCoy et M. Dresden. Statistical Mechanics of the XY Model. I. *Phys. Rev. A* **2** (1970), 1075-1092.

[8] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2011.

[9] T.-C. Wei, S. Vishveshwara et P. M. Goldbart. Global Geometric Entanglement in Transverse-field XY Spin Chains: Finite and Infinite Systems. *Quantum Inf. Comput.* **11** (2011), 326-354.

[10] P. Pfeuty. The One-dimensional Ising Model with a Transverse Field. *Ann. Phys. (N.Y.)* **57** (1970), 79-90.

[11] A. Einstein, B. Podolsky et N. Rosen. Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete? *Phys. Rev.* **47** (1935), 777-780.

[12] M. A. Nielsen et I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2010.

[13] A. Osterloh et al. Scaling of Entanglement Close to a Quantum Phase Transition. *Nature* **416** (2002), 608-610.

[14] W. C. de Freitas Silva et al. *Single-site Entanglement as a Marker for Quantum phase Transitions at Non-zero Temperatures*. 2025. arXiv : `2505.00628 [cond-mat.str-el]`.

[15] R. Radgohar et A. Montakhab. Global Entanglement and Quantum Phase Transitions in the Transverse XY Heisenberg Chain. *Phys. Rev. B* **97** (2018), 024434.

[16] A. De Pasquale et al. XX Model on the Circle. *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **160** (2008), 127-138.

[17] F. Benatti, R. Floreanini et L. Memarzadeh. Exact Steady State of the Open XX-Spin Chain: Entanglement and Transport Properties. *PRX Quantum* **2** (2021), 030344.

[18] P. Jordan et E. Wigner. Über das Paulische Äquivalenzverbot. *Z. Phys.* **47** (1928), 631-651.

[19] L. Šamaj. Introduction to Integrable Many-Body Systems II. *Acta Phys. Slovaca* **60** (2010), 155-257.

[20] N. N. Bogoljubov, V. V. Tolmachov et D. V. Širkov. A New Method in the Theory of Superconductivity. *Fortschr. Phys.* **6** (1958), 605-682.

[21] T. Niemeijer. Some Exact Calculations on a Chain of Spins 1/2. *Physica* **36** (1967), 377-419.

[22] W.-C. Yueh. Eigenvalues of Several Tridiagonal Matrices. *Appl. Math. E-Notes* **5** (2005), 66-74.

[23] S. Kouachi. Eigenvalues and Eigenvectors of Tridiagonal Matrices. *Electron. J. Linear. Al.* **15** (2006), 115-133.

[24] P. Calabrese, F. H. L. Essler et M. Fagotti. Quantum Quench in the Transverse-Field Ising Chain. *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011), 227203.

[25] P. J. Davis. *Circulant Matrices*. Wiley, 1979.

[26] I. Kra et R. S. Santiago. On Circulant Matrices. *Not. Am. Math. Soc.* **59** (2012), 368-377.

[27] Y. He et H. Guo. The Boundary Effects of Transverse Field Ising Model. *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* **2017** (2017), 093101.

[28] J. Bardeen, L. N. Cooper et J. R. Schrieffer. Theory of Superconductivity. *Phys. Rev.* **108** (1957), 1175-1204.

[29] G. G. Cabrera et R. Jullien. Role of Boundary Conditions in the Finite-size Ising Model. *Phys. Rev. B* **35** (1987), 7062-7072.

[30] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë. *Quantum Mechanics. Fermions, Bosons, Photons, Correlations and Entanglement*. T. 3. Wiley-VCH, 2024.

[31] G. E. Santoro. "Non-equilibrium Quantum Systems, Lecture Notes". 2016.

[32] A. Dutta et al. *Quantum Phase Transitions in Transverse Field Spin Models: From Statistical Physics to Quantum Information*. Cambridge University Press, 2015.

[33] J. S. Bell et A. Aspect. *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics: Collected Papers on Quantum Philosophy*. Cambridge University Press, 2004.

[34] M. Walter, D. Gross et J. Eisert. *Multi-partite Entanglement*. 2017. arXiv : `1612.02437 [quant-ph]`.

[35] E. Schmidt. Zur Theorie der linearen und nichtlinearen Integralgleichungen. I. Teil: Entwicklung willkürlicher Funktionen nach Systemen vorgeschriebener. *Math. Ann.* **63** (1907), 433-476.

[36] A. Peres. Separability Criterion for Density Matrices. *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996), 1413-1415.

[37] M. Horodecki, P. Horodecki et R. Horodecki. Separability of Mixed States: Necessary and Sufficient Conditions. *Phys. Lett. A* **223** (1996), 1-8.

[38] S. J. Axler. *Linear Algebra Done Right*. Undergraduate Texts in Mathematics. Springer, 2024.

[39] M. Horodecki, P. Horodecki et R. Horodecki. Limits for Entanglement Measures. *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000), 2014-2017.

[40] X. Wang et al. Entanglement in Spin-1 Heisenberg Chains. *J. Phys. A Math. Gen.* **38** (2005), 8703-8713.

[41] G. Vidal. Entanglement Monotones. *J. Mod. Opt.* **47** (2000), 355-376.

[42] V. Vedral et M. B. Plenio. Entanglement Measures and Purification Procedures. *Phys. Rev. A* **57** (1998), 1619-1633.

[43] T.-C. Wei et P. M. Goldbart. Geometric Measure of Entanglement and Applications to Bipartite and Multipartite Quantum States. *Phys. Rev. A* **68** (2003).

[44] J. I. Latorre et A. Riera. A Short Review on Entanglement in Quantum Spin Systems. *J. Phys. A Math. Gen.* **42** (2009), 504002.

[45] A. Shimony. Degree of Entanglement. *Ann. N. Y. Acad. Sci.* **755** (1995), 675-679.

[46] H. Barnum et N. Linden. Monotones and Invariants for Multi-particle Quantum States. *J. Phys. A Math. Gen.* **34** (2001), 6787.

[47] K. Uyanik et S. Turgut. Geometric Measures of Entanglement. *Phys. Rev. A* **81** (2010), 032306.

[48] W. K. Wootters. Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits. *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998), 2245-2248.

[49] J.-M. Stéphan, G. Misguich et F. Alet. Geometric Entanglement and Affleck-Ludwig Boundary Entropies in Critical XXZ and Ising Chains. *Phys. Rev. B* **82** (2010), 180406.

[50] T.-C. Wei et al. Global Entanglement and Quantum Criticality in Spin Chains. *Phys. Rev. A* **71** (2005), 060305.

[51] OpenAI. *ChatGPT*. `https://chat.openai.com`. Version du modèle GPT-4, consultation du 12/05/2025.

[52] F. Pan et al. First Order Quantum Phase Transitions of the XX Spin-1/2 Chain in a Uniform Transverse Field. *Phys. Lett. A* **367** (2007), 450-453.

[53] M. Henkel. *Conformal Invariance and Critical Phenomena*. Springer Berlin Heidelberg, 1999.

[54] A. Deger et T.-C. Wei. Geometric Entanglement and Quantum Phase Transition in Generalized Cluster-XY Models. *Quantum Inf. Process.* **18** (2019), 326.

[55] K. Shannon, E. Towe et O. K. Tonguz. *On the Use of Quantum Entanglement in Secure Communications: A Survey*. 2020. arXiv : 2003.07907 [cs.CR].

[56] L. Gonçalves et A. Vieira. Random Isotropic One Dimensional XY Model. *J. Magn. Magn. Mater.* **177-181** (1998). International Conference on Magnetism, 79-80.

[57] M. Fujinaga et N. Hatano. The Entanglement of the XY Spin Chain in a Random Magnetic Field. *J. Phys. Soc. Jpn.* **76** (2007), 094001.

[58] M. Campostrini, A. Pelissetto et E. Vicari. Quantum Ising Chains with Boundary Fields. *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* **2015** (2015), 11015.

[59] T.-C. Wei. Relative Entropy of Entanglement for Multipartite Mixed States: Permutation-invariant States and Dür States. *Phys. Rev. A* **78** (2008), 012327.

Annexe A

Diagonalisation de la Chaîne XX Quantique

Dans cette annexe, nous présentons la diagonalisation du modèle XX en champ transversal pour les deux conditions aux bords discutées dans ce mémoire : ouvertes et périodiques. Pour ce faire, nous appliquons au hamiltonien de la chaîne la transformation de Jordan-Wigner. L'état fondamental et les états excités du modèle sont ainsi obtenus.

A.1 Diagonalisation exacte de la chaîne ouverte

Pour rappel, le hamiltonien (2.2) auquel nous nous intéressons s'écrit, avec des conditions aux bords ouvertes,

$$H = -\frac{J}{4}\sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j^x\sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y\sigma_{j+1}^y - \frac{h}{2}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^z, \quad J, h > 0.$$

Comme mentionné dans le chapitre 2, il s'avère que l'absence d'anisotropie ($\gamma = 0$) dans le modèle permet de le diagonaliser facilement. En particulier, il n'est pas nécessaire d'effectuer une transformation de Bogoliubov.

Tout comme c'était le cas pour la chaîne d'Ising, nous le réécrivons en termes des opérateurs d'échelle (2.5) :

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j^+\sigma_{j+1}^- + \sigma_j^-\sigma_{j+1}^- - \frac{h}{2}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^z,$$

puis lui appliquons la transformation de Jordan-Wigner (2.7), afin d'obtenir

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N-1} c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j - h\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_j + \frac{hN}{2}\mathbb{I}. \tag{A.1}$$

Il s'agit d'une forme quadratique en les opérateurs de Jordan-Wigner. Cependant, il n'est pas nécessaire de lui appliquer la méthode Lieb, Schultz et Mattis [5], comme nous allons le montrer ci-après.

Le hamiltonien (A.1) peut s'écrire sous la forme plus compacte :

$$H = \sum_{i,j=1}^{N} \Lambda_{ij} c_i^\dagger c_j,$$

où $\Lambda \in \mathbb{R}^{N,N}$ est une matrice symétrique (et donc, diagonalisable) donnée par

$$\Lambda = \begin{pmatrix} -h & -J/2 & 0 & \dots & 0 \\ -J/2 & -h & -J/2 & \dots & 0 \\ 0 & -J/2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -J/2 \\ 0 & 0 & 0 & -J/2 & -h \end{pmatrix}.$$

Or, le théorème spectral [38] stipule qu'il existe une matrice orthogonale $U \in \mathbb{R}^{N,N}$ telle que $D = U^\intercal \Lambda U$, avec $D \in \mathbb{R}^{N,N}$ une matrice diagonale. Soient $(v_k)_j$, $j,k \in \{1,\dots,N\}$, la $j^{\text{ème}}$ composante du $k^{\text{ème}}$ vecteur propre de Λ et λ_k la valeur propre correspondante à ce vecteur propre. Il nous faut résoudre le problème aux valeurs propres

$$-\frac{J}{2}\Big((v_k)_{j-1} + (v_k)_{j+1}\Big) - h(v_k)_j = \lambda_k (v_k)_j, \quad j = \{2,\dots,N-1\},$$

avec les conditions aux bords

$$-\frac{J}{2}(v_k)_2 - h(v_k)_1 = \lambda_k (v_k)_1, \quad -\frac{J}{2}(v_k)_{N-1} - h(v_k)_N = \lambda_k (v_k)_N.$$

Si l'on fait l'ansatz

$$(v_k)_j = Az^j + Bz^{-j}, \quad A, B \in \mathbb{R}_0 \text{ et } z \in \mathbb{C},$$

nous trouvons

$$\lambda_k = -J\cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) - h, \quad (v_k)_j = \sqrt{\frac{2}{N+1}}\sin\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right). \tag{A.2}$$

De ce fait, en définissant les opérateurs

$$d_k = \sum_{j=1}^{N} (v_k)_j c_j = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{j=1}^{N} \sin\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right) c_j, \tag{A.3}$$

nous obtenons le hamiltonien diagonal suivant :

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i,j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} \lambda_k (v_k)_j (v_k)_i c_i^\dagger c_j \\ &= \sum_{k=1}^{N} \lambda_k d_k^\dagger d_k. \end{aligned} \tag{A.4}$$

Il n'est pas difficile de vérifier, grâce à l'orthogonalité de U, que les opérateurs (A.3) satisfont les relations d'anticommutation canoniques.

Pour rappel, l'état de vide $|0\rangle = |{\downarrow}\rangle^{\otimes N}$ des fermions de Jordan-Wigner satisfait, pour tous $j, k \in \{1, \dots, N\}$,

$$c_j|0\rangle = 0 \quad \text{et} \quad d_k|0\rangle = 0.$$

Clairement, il s'agit d'un état propre du hamiltonien (A.4) d'énergie identiquement nulle, mais puisque les énergies λ_k ne sont pas nécessairement toutes négatives, il n'est pas l'état fondamental du système. Pour le déterminer, observons qu'un état propre à m fermions est donné par

$$|\psi\rangle = \prod_{j=1}^{m} d_{k_j}^\dagger |0\rangle.$$

En effet, on montre sans peine que

$$H|\psi\rangle = \left(\sum_{j=1}^{m} \lambda_{k_j}\right)|\psi\rangle,$$

avec $k_i \neq k_j$ pour tout $i \neq j$. L'état fondamental de la chaîne est alors obtenu en choisissant m et $k_1, \dots, k_m$ de sorte à minimiser $\sum_{j=1}^m \lambda_{k_j}$.

Deux scénarios se présentent à nous. Tout d'abord, si $J - h \leq 0$, alors $\lambda_{k_j} \leq 0$ pour tout $j \in \{1, \dots, m\}$. Dans ce cas, nous prenons $m = N$ et l'état fondamental correspond à

$$|\psi_0\rangle = \prod_{j=1}^{N} d_{k_j}^\dagger |0\rangle = |{\uparrow\uparrow} \dots {\uparrow}\rangle, \quad E_0 = \sum_{j=1}^{N} \lambda_{k_j}.$$

Mais si $J - h > 0$, alors certaines valeurs propres λ_k sont positives. Dans ce cas, on définit $q \in \mathbb{N}_0$ par

$$\lambda_{k_q} \leq 0, \quad \lambda_{k_{q+1}} > 0,$$

de telle sorte que l'état fondamental s'écrive

$$|\psi_0\rangle = \prod_{j=1}^{q} d_{k_j}^\dagger |0\rangle, \quad E_0 = \sum_{j=1}^{q} \lambda_{k_j}. \tag{A.5}$$

À titre d'illustration, le spectre du hamiltonien (A.4) est représenté pour $N = 4$ et $J = 1$ sur la Fig. A.1.

A.2 Diagonalisation exacte de la chaîne périodique

On considère désormais le hamiltonien de la chaîne XX avec conditions aux bords périodiques :

$$H = -\frac{J}{4} \sum_{j=1}^{N} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y - \frac{h}{2} \sum_{j=1}^{N} \sigma_j^z, \quad J, h > 0.$$

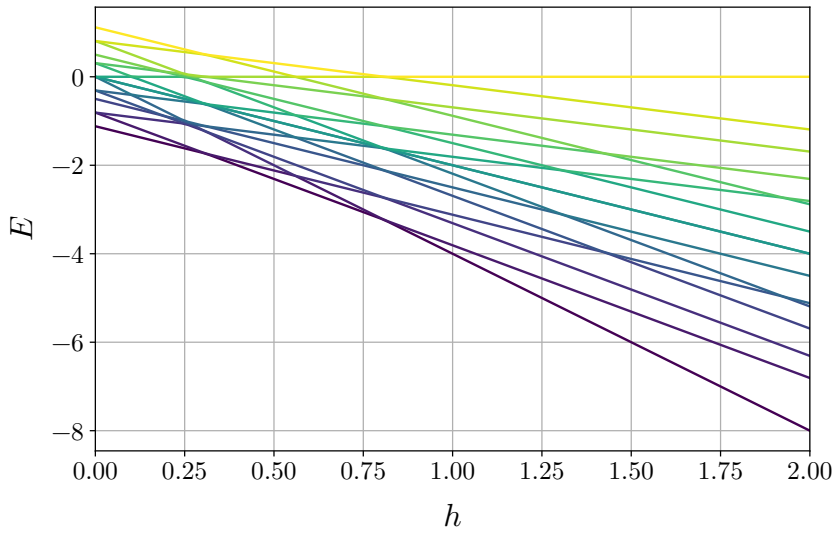


FIGURE A.1 – Spectre d'énergie $E = E(J, h)$ de la chaîne XX ouverte, à $N = 4$ et $J = 1$ fixés

La méthode de diagonalisation est essentiellement la même que celle discutée précédemment pour la chaîne ouverte. En termes des opérateurs de Jordan-Wigner, nous avons en effet

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N-1} c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j + (-1)^F \frac{J}{2}\left(c_N^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_N\right) - h\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_j + \frac{hN}{2}\mathbb{I}.$$

À nouveau, nous pouvons traiter séparément les deux secteurs de parité (Neveu-Schwarz et Ramond) de sorte à obtenir pour chacun d'entre eux

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j - h\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_j + \frac{hN}{2}\mathbb{I}. \tag{A.6}$$

Le hamiltonien (A.6) peut s'écrire

$$H = \sum_{i,j=1}^{N} \Lambda_{ij} c_i^\dagger c_j,$$

avec à présent

$$\Lambda = \begin{pmatrix} -h & -J/2 & 0 & \dots & \pm J/2 \\ -J/2 & -h & -J/2 & \dots & 0 \\ 0 & -J/2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -J/2 \\ \pm J/2 & 0 & 0 & -J/2 & -h \end{pmatrix}.$$

En adoptant les mêmes notations que dans la section précédente, il vient le problème aux valeurs propres

$$-\frac{J}{2}\Big((v_k)_{j-1}+(v_k)_{j+1}\Big)-h(v_k)_j=\lambda_k(v_k)_j,$$

avec la condition aux bords $(v_k)_{N+1}=-(v_k)_1$ pour le secteur de Neveu-Schwarz et $(v_k)_{N+1}=(v_k)_1$ pour le secteur de Ramond. L'ansatz

$$(v_k)_j=z^j,\quad z\in\mathbb{C}$$

nous conduit, pour le secteur de Neveu-Schwarz, à

$$\lambda_k=-J\cos\left(\frac{2\pi(k+1/2)}{N}\right)-h,\quad (v_k)_j=\frac{1}{\sqrt{N}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}jk}.$$

En définissant les opérateurs [1]

$$d_k=\sum_{j=1}^{N}(v_k)_j c_j=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}jk}c_j,$$

nous obtenons

$$H=\sum_{k=0}^{N-1}\lambda_k d_k^\dagger d_k. \tag{A.7}$$

Un calcul tout à fait similaire pour le secteur de Ramond livre le même hamiltonien diagonal (A.7), avec cette fois

$$\lambda_k=-J\cos\left(\frac{2\pi k}{N}\right)-h.$$

L'état fondamental et les états propres de la chaîne périodique sont construits de la même façon que pour la chaîne ouverte ; seuls les opérateurs fermioniques d_k et les valeurs propres λ_k changent. Le spectre du hamiltonien (A.7) est à nouveau illustré pour $N=4$ et $J=1$ sur la Fig. A.2, et est à comparer avec celui de la Fig. A.1. On note une dégénérescence des niveaux d'énergie plus importante que dans le cas de la chaîne ouverte.

Tout comme c'est le cas de la chaîne d'Ising, le choix des conditions aux bords de la chaîne XX n'a pas d'influence, dans la limite thermodynamique, sur l'ordre dominant de quantités d'intérêt physique. Par ailleurs, il a été démontré qu'une bonne approximation de la limite $N\to\infty$ est rapidement atteinte, c'est-à-dire pour un nombre de spins N relativement modeste [16].

Forts de ces constats, et grâce au résultat (A.5) établi tant pour les conditions aux bords ouvertes que périodiques, nous pouvons évaluer numériquement la densité d'intrication $\mathcal{E}$ dans la limite thermodynamique, ainsi que sa dérivée $\partial_h\mathcal{E}$ (voir les Figs. 4.12 et 4.13).

1. On remarque qu'il s'agit de la transformation de Fourier discrète des opérateurs de Jordan-Wigner.

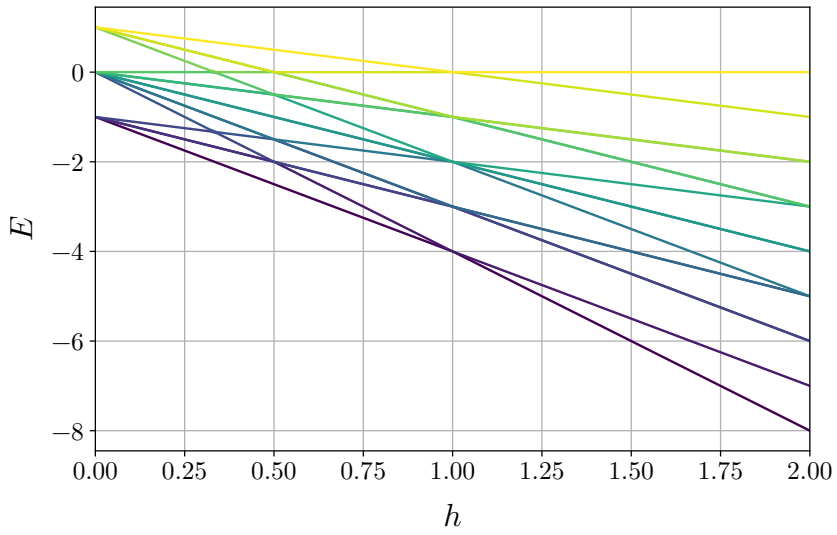


FIGURE A.2 – Spectre d'énergie $E = E(J, h)$ de la chaîne XX périodique, à $N = 4$ et $J = 1$ fixés

UNIVERSITÉ CATHOLIQUE DE LOUVAIN

Faculté des Sciences

Place des Sciences, 2 bte L6.06.01, 1348 Louvain-la-Neuve, Belgique | **www.uclouvain.be/sc**