



Quelques aspects du chaos quantique dans les systèmes de N-corps en interaction : chaînes de spins quantiques et matrices aléatoires

Yasar Yilmaz Atas

► To cite this version:

Yasar Yilmaz Atas. Quelques aspects du chaos quantique dans les systèmes de N-corps en interaction : chaînes de spins quantiques et matrices aléatoires. Physique mathématique [math-ph]. Université Paris Sud - Paris XI, 2014. Français. $\langle$ NNT : 2014PA112221 $\rangle$. $\langle$ tel-01083375 $\rangle$

HAL Id: tel-01083375

<https://theses.hal.science/tel-01083375v1>

Submitted on 17 Nov 2014

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

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



HAL Authorization

UNIVERSITÉ PARIS-SUD

ÉCOLE DOCTORALE DE PHYSIQUE DE LA RÉGION PARISIENNE
LABORATOIRE DE PHYSIQUE THÉORIQUE ET MODÈLES STATISTIQUES

DISCIPLINE : PHYSIQUE THÉORIQUE

THÈSE DE DOCTORAT

Soutenue le 24 Septembre 2014 par

Yasar Yilmaz Atas

**Quelques aspects du chaos quantique
dans les systèmes de N-corps en interaction
Chaînes de spins quantiques et matrices aléatoires**

Directeur de thèse : Eugène Bogomolny

Composition du jury :

Rapporteurs :	Jonathan Keating Dima Shepelyansky
Examineurs	Dominique Delande Gilles Montambaux Peter Schlagheck Denis Ullmo

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ
الَّذِي خَلَقَ سَبْعَ سَمَاوَاتٍ طِبَاقًا مَّا تَرَىٰ فِي خَلْقِ الرَّحْمَنِ مِن تَفَوتٍ
فَارْجِعِ الْبَصَرَ هَلْ تَرَىٰ مِن فُطُورٍ
ثُمَّ ارْجِعِ الْبَصَرَ كَرَّتَيْنِ يَنقَلِبْ إِلَيْكَ الْبَصَرُ خَاسِئًا وَهُوَ حَسِيرٌ

Celui qui a créé sept cieux superposés sans que tu voies de disproportion en la création du Tout Miséricordieux. Ramène [sur elle] le regard. Y vois-tu une brèche quelconque ? Puis, retourne ton regard à deux fois : le regard te reviendra humilié et frustré.

LE NOBLE CORAN, Sourate **Al-Mulk**, Ayat 3 – 4

Remerciements

Comme le veut la coutume, je commence ce manuscrit par l'expression de ma gratitude. Je remercie en premier lieu toute personne qui ouvrira cette thèse et qui en profitera pour la lire. Ces trois années ont été pour moi une expérience enrichissante que ce soit du point de vue scientifique ou humain. Je souhaite que les personnes qui ont contribué à l'aboutissement de ce travail trouvent dans ces quelques lignes la reconnaissance qui leur est due.

Eugène Bogomolny a été mon directeur de thèse durant ces trois années, je tiens à le remercier pour sa gentillesse, sa patience ainsi que sa disponibilité. Ce fut un honneur pour moi de pouvoir travailler à ses côtés et de pouvoir profiter de ses conseils.

Une partie du travail effectué durant cette thèse résulte de la collaboration avec certains membres du Laboratoire de Physique Théorique et Modèles Statistiques. Je tiens donc à remercier en premier lieu Olivier Giraud, pour sa disponibilité, son écoute attentive et ses conseils. J'adresse aussi mes remerciements à Guillaume Roux pour les nombreuses discussions que nous avons eu et pour son aide précieuse dans la compréhension et l'utilisation de son algorithme Lanczos. J'adresse aussi mes amitiés à Pierpaolo Vivo dont la bonne humeur a rendu nos collaborations agréables. Je le remercie pour la visite guidée de Londres.

J'aimerais d'autre part témoigner ma reconnaissance à Jonathan Keating et Dima Shepelyansky qui ont accepté de rapporter ce manuscrit de thèse. J'exprime aussi ma gratitude à Dominique Delande, Gilles Montambaux, Denis Ullmo et Peter Schlagheck d'avoir accepté de faire partie de mon jury. Je remercie ce dernier pour son accueil chaleureux lors de ma visite à Liège.

J'adresse ici mes remerciements à tous les membres du Laboratoire de Physique Théorique et Modèles Statistiques pour leur accueil chaleureux. Il règne dans ce laboratoire une atmosphère très agréable et sympathique qui vas me manquer, sans doute plus que je ne le crois. À Claudine Le Vaou ainsi qu'à Géraldine Régis pour leur gentillesse et leur disponibilité. Marie-Thérèse Commault a ici toute sa place et je lui suis extrêmement reconnaissant d'avoir pris le temps de relire et corriger les fautes d'orthographe dans mon manuscrit. Je n'oublie pas mes compagnons de science, thésards et postdocs : Pierre-Elie, mon compagnon de bureau, Paul, pour les parties de tennis, Arthur, pour les randonnées aux Houches, Mathieu, pour les débats philosophiques et ses démonstrations de tai-chi sur les quais du RER B, Simon, pour son humour et sa bonne humeur, François, pour les multiples fois où il m'a aidé et dont la coupe approche celle de BHL à certains moments, Andrey, l'homme capable d'attraper un tigre de Sibérie à main nue mais incapable de battre Emile sur le tatami, Igor et son appréciation des köfte préparé par ma mère, Vincent, pour son aide et les nombreux débats et discussions, Sylvia, Shamik, pour ses conseils, Dario, pour les rencontres faites dans le RER B grâce à son accent "dérangé" et tous les autres . . . J'aimerais d'autres part témoigner ma sympathie à toutes les personnes que j'ai eu l'occasion de rencontrer durant mes voyages en conférences.

Je conclurai ces quelques lignes en remerciant tous les membres de ma famille pour leur soutien inconditionnel : ma mère, mon père, mon petit frère, mes petites soeurs et ma grande soeur.

Table des matières

Introduction	1
Liste des publications, prépublications et articles en cours de rédaction	8
1 Méthodes numériques pour les chaînes de spins quantiques	9
1.1 Introduction	10
1.1.1 Plan du chapitre	11
1.2 Le modèle d'Ising unidimensionnel	11
1.2.1 Introduction	11
1.2.2 Espace des états de la chaîne de N spins	12
1.2.3 Action de H sur un état et énergies propres	12
1.3 Attaque numérique du problème : diagonalisation exacte	13
1.3.1 Codage binaire des états	13
1.3.2 Éléments de matrice de H	13
1.3.3 Limite de la diagonalisation exacte	14
1.4 Utilisation des symétries	15
1.4.1 Symétrie de réflexion	15
1.4.2 Symétrie de translation	16
1.5 Implémentation numérique de la symétrie de translation	18
1.6 Méthodes itératives	23
1.6.1 Méthode des puissances	24
1.6.2 Méthode de Lanczos	24
1.7 Conclusion	26
2 Approximations gaussiennes et multi-gaussiennes pour la densité spectrale du modèle d'Ising	29
2.1 Introduction	30
2.1.1 Physique nucléaire	30
2.1.2 Chaos quantique	32
2.1.3 Théorie des nombres	34
2.1.4 Loi du semi-cercle de Wigner	36
2.1.5 Théorème de la limite centrale et loi gaussienne	37
2.1.6 Plan du chapitre	38
2.2 De Ising classique $2D$ vers Ising quantique $1D$	39
2.3 Le modèle d'Ising quantique unidimensionnel	40
2.3.1 Diagonalisation exacte du modèle quantique	41
2.3.2 Construction des états d'énergies de la chaîne de spins	44
2.3.3 Retour sur le comportement critique	45
2.4 Densité d'états du modèle d'Ising	47
2.4.1 Densité spectrale asymptotique et méthode du col	48
2.4.2 Un résultat de Keating <i>et al.</i> sur les chaînes de spins aléatoires	52
2.5 Apparition de pics dans la densité d'états et échec de l'approximation gaussienne	53
2.5.1 Cas où $\lambda \rightarrow 0$	53
2.5.2 Limite $\lambda \rightarrow \infty$	54
2.5.3 Origine des pics	54
2.6 Approximations multi-gaussiennes	55
2.6.1 Méthode de la fonction génératrice	55

2.6.2	Domaine de visibilité des pics	57
2.6.3	Récapitulatif	58
2.7	Modèle d'Ising non intégrable	58
2.7.1	Limite de champs forts	60
2.7.2	Limite où α est fixe et $\lambda \rightarrow 0$	61
2.8	Conclusion et perspectives	62
Article : <i>Spectral density of the quantum Ising model in two fields : Gaussian and multi-Gaussian approximations</i>		63
3	Analyse spectrale des chaînes de spins quantiques	105
3.1	Introduction et position du problème	106
3.1.1	Plan du chapitre	108
3.2	Classification fondamentale des matrices aléatoires à spectre réel	108
3.2.1	Distribution des valeurs propres	109
3.2.2	Un petit détour sur le calcul de la densité d'états	111
3.3	Méthodes numériques utilisées en théorie des matrices aléatoires	115
3.3.1	Méthode naïve	115
3.3.2	Formulation tridiagonale	115
3.3.3	Algorithme Monte-Carlo	115
3.4	Distribution de l'espacement d'énergie	117
3.4.1	Distribution de l'espacement pour des nombres tirés de manière uniforme dans $[0, 1]$	117
3.4.2	Ansatz de Wigner pour la distribution de l'espacement dans les ensembles gaussiens invariants	118
3.5	Conjectures reliées à la distribution de l'espacement	120
3.5.1	Conjecture de Berry-Tabor pour les systèmes intégrables	120
3.5.2	Conjecture BGS pour les systèmes chaotiques	121
3.6	La procédure d'unfolding	122
3.6.1	Problèmes posés par la procédure d'unfolding	123
3.7	Statistique du rapport de l'espacement entre niveaux d'énergie	124
3.7.1	Cas de variables poissoniennes	124
3.7.2	Ensembles gaussiens invariants	124
3.7.3	Analogie du "surmise" de Wigner	125
3.7.4	Précision de l'approximation	127
3.8	Application aux chaînes de spins quantiques	127
3.9	Zéros de la fonction zêta de Riemann	128
3.10	Choix de la variable sans dimension et distribution du k recouvrement	130
3.10.1	Cas poissonien	131
3.10.2	$k = 1$ recouvrement pour les ensembles gaussiens invariants	132
3.11	Conclusion et perspectives	132
Article : <i>Distribution of the ratio of consecutive level spacings in random matrix ensembles</i>		134
4	Multifractalité dans les chaînes de spins quantiques	141
4.1	Introduction	142
4.1.1	Localisation d'Anderson	142
4.1.2	Localisation à plusieurs corps	144
4.2	Plan du chapitre	145
4.3	Cascade Binomiale	145
4.3.1	Dimension multifractale	146
4.4	Multifractalité dans les chaînes de spins	147
4.4.1	La dimension multifractale : une mesure de la localisation dans l'espace de Hilbert	148
4.4.2	Analogie thermodynamique	149
4.4.3	Approche numérique	150
4.5	Modèle d'Ising en champ transverse	152
4.5.1	Calcul des fonctions de corrélations à deux corps	153
4.5.2	Comportements limites	153

4.5.3	Probabilité ferromagnétique en champ λ quelconque	154
4.5.4	Dimension multifractale asymptotique $D_{+\infty}$	155
4.5.5	Dimension multifractale asymptotique $D_{-\infty}$	157
4.6	Le modèle XY	158
4.6.1	Transformation de Jordan-Wigner	158
4.6.2	Oscillation de parité	159
4.6.3	Probabilité d'une configuration	163
4.6.4	Champ factorisant du modèle XY sur la ligne critique	167
4.7	Le modèle XXZ	170
4.7.1	Conjecture de Razumov-Stroganov	170
4.7.2	Dimensions multifractales asymptotiques	171
4.7.3	Dimension multifractale en $q = 1/2$	172
4.8	Le modèle XYZ	173
4.9	Conclusion et perspectives	173
Article : <i>Multifractality of eigenfunctions in spin chains</i>		
Prépublication : <i>Quantum Ising model in transverse and longitudinal fields : chaotic wave functions</i>		174
Annexe A Notions de théorie des nombres		197
A.1	Nombres premiers entre eux	197
A.2	Fonction d'Euler $\phi(n)$	197
A.3	Fonction de Möbius $\mu(n)$	198
A.4	Et si on comptait des colliers	199
Annexe B Formalisme général pour les densités d'états des modèles intégrables		201
B.1	Méthode du col	201
B.2	Cas du spectre fermionique	202
B.3	Approximation gaussienne dans le bulk	202
B.4	Limite de l'approximation du col	202
Annexe C Diagonalisation exacte du modèle d'Ising en champ transverse		203
C.1	Transformation de Jordan-Wigner ou comment obtenir des fermions à partir de spins $1/2$	203
C.1.1	Décomposition de Fourier	206
C.1.2	Transformation de Bogoliubov	207
C.2	Construction des niveaux d'énergie du modèle d'Ising	209
C.2.1	Structure du vide de Bogoliubov et règles de construction des états d'énergies	211
C.3	Calcul d'observables dans l'état fondamental	212
C.4	Diagonalisation du hamiltonien de la chaîne ouverte	213
C.4.1	Condition de quantification de la chaîne ouverte	216
C.4.2	Valeur moyenne de l'observable σ_j^z	218
Annexe D Méthode de la fonction génératrice pour les moments de la densité d'états		219
Annexe E Méthode de Latta pour les équations intégrales de Fredholm		221
E.1	Équation intégrale avec noyau $K(x, t) = \ln x - t $	221
References		223
Résumé		232

Introduction

Et maintenant, attachez vos ceintures. Non pas que ce soit particulièrement difficile à comprendre, mais tout simplement parce que ça va vous sembler le comble du ridicule. Jugez-en : nous dessinons des petites flèches sur une feuille de papier ! C'est tout.

Richard Feynman

L'étude des propriétés des systèmes **quantiques** à N corps en interaction est l'une des branches les plus actives de la physique théorique actuelle. En raison du grand nombre de degrés de liberté mis en jeu et de la nature des interactions entre particules, les équations du mouvement de ces systèmes ne sont pas intégrables dans la plupart des cas. Il existe cependant des modèles très particuliers, les modèles intégrables, pour lesquels le calcul des énergies propres, des vecteurs propres et de certaines propriétés physiques est possible. Cette intégrabilité est rendue possible par l'existence de symétries dans le modèle. Bethe est le premier à tirer profit de ces symétries en trouvant la solution exacte du problème de la chaîne de spins-1/2 de Heisenberg [Bet31]. Considéré initialement comme des modèles "jouets", sans grand intérêt et application pour notre monde tridimensionnel, ces modèles 1D attirent de nos jours une attention toute particulière en raison de la découverte d'une large variété de systèmes physiques quasi 1D [TPCN93, RZRV94, GMC⁺96, BRA96, San11]. Le caractère unidimensionnel de ces modèles les rend assez simples pour pouvoir appliquer des méthodes exactes et en même temps assez complexes pour pouvoir capturer des comportements physiques extrêmement riches.

Les modèles de spins ont initialement été introduits pour la description du magnétisme dans les matériaux ferromagnétiques. En 1925, Ernst Ising, sous l'impulsion de son directeur de thèse, s'intéresse à la version unidimensionnelle du modèle qui porte aujourd'hui son nom, et obtient le résultat exact (la fonction de partition, ...) en utilisant la méthode de la matrice de transfert. De par sa simplicité et son comportement riche, ce modèle a été largement étudié et généralisé aux dimensions supérieures. En 1944, Lars Onsager obtient la solution exacte du modèle d'Ising bidimensionnel (classique) et montre l'existence d'une transition de phase dans la limite thermodynamique [Ons44] : ce travail est à l'origine du développement de la théorie moderne des phénomènes critiques. Les modèles classiques ont joué un rôle important au début de la théorie du magnétisme 1D mais, de nos jours, l'accent est mis sur les modèles où les phénomènes quantiques sont importants. Les versions quantiques des modèles de spins ont initialement été étudiées par Bethe avec le modèle de Heisenberg 1D. Ce dernier a obtenu le spectre d'excitation de ce modèle en utilisant la méthode qui porte aujourd'hui son nom et qui apparaît de nos jours non seulement en matière condensée, domaine qui l'a vue naître, mais aussi dans d'autres domaines de la physique théorique tels que la physique des particules. Par la suite, plusieurs méthodes théoriques ont été développées, dont des approches de théorie quantique des champs (invariance conforme, bosonisation, modèle σ non linéaire), des approches perturbatives ainsi qu'une large variété de méthodes numériques comme la diagonalisation exacte. Ces techniques théoriques ont permis d'avoir accès aux fonctions de corrélation et aux propriétés thermodynamiques des modèles de spins quantiques.

Une autre approche théorique des modèles quantiques unidimensionnels réside dans le lien qui existe entre ceux-ci et les systèmes classiques 2D de physique statistique [SML64, Bax71, Tak05]. Cette correspondance a amené les physiciens à s'interroger sur le comportement critique des modèles quantiques. Tout comme le modèle d'Ising a servi à comprendre les transitions de phase pilotées par des fluctuations thermiques, les modèles de chaîne de spins quantiques permettent de comprendre les transitions pilotées par les fluctuations quantiques (à température nulle $T = 0$). Ces modèles unidimensionnels fournissent un moyen unique et un cadre théorique pour étudier les états fondamentaux et excités de problèmes quantiques à plusieurs corps. Les chaînes de spins, avec leurs différents types d'états fondamentaux (ordonnés ou désordonnés) et les états excités qui en découlent, offrent aussi la possibilité d'étudier de nouvelles phases de la matière, en particulier les effets quantiques collectifs et l'interaction entre les fluctuations thermiques et quantiques. Une transition de phase quantique est une

transition à température nulle pilotée par un paramètre non thermique comme le champ magnétique et se traduit par un changement de nature de l'état fondamental. Le point critique quantique sépare la phase ordonnée magnétiquement de la phase désordonnée quantique. Les conséquences de ce changement de nature de l'état fondamental peuvent être observées à travers le comportement des fonctions de corrélations [Sac07] ou des valeurs moyennes d'observables tels que l'aimantation pour les chaînes de spins.

Le changement de structure et de nature de la fonction d'onde fondamentale n'est pas sans rappeler le phénomène de localisation d'Anderson. Dans le modèle d'Anderson, des électrons sans interactions évoluent dans un paysage de potentiel désordonné. En dimension 1 et 2, il a été montré qu'un degré infinitésimal de désordre suffit à localiser les fonctions d'ondes : on a alors affaire à un isolant. Par contre, en dimension 3, il existe une valeur d'amplitude de désordre critique W_c en-dessous de laquelle les fonctions d'onde sont délocalisées (phase métallique) et au-dessus de laquelle les fonctions d'onde sont complètement localisées (phase isolante) [And58, DGSP⁺09]. La localisation électronique possède clairement un impact sur les propriétés de transport : l'augmentation du degré de désordre entraîne une diminution du libre parcours moyen de l'électron dans le paysage de potentiel et donc de la conductivité électronique. Évidemment, cette image simpliste ne prend pas en compte les effets d'interférences (constructifs et destructifs) liés à la nature ondulatoire quantique de l'électron mais permet déjà de se faire une idée intuitive du phénomène. Au demeurant, l'étude des opérateurs de Schrödinger aléatoires, dont le modèle d'Anderson n'est qu'un seul exemple, sont à une seule particule et qui plus est, sans interactions. Quel est l'impact des interactions entre électrons sur les propriétés de localisation ? En d'autres termes, est-ce que le phénomène de localisation est un phénomène robuste ? Il est connu depuis Mott que les interactions non élastiques entre phonons et électrons peuvent engendrer le mécanisme dit de saut de conductivité (*hopping conductivity*), entraînant une conductivité finie (qui peut être très petite) à toute température, même quand les états individuels électroniques sont tous localisés [Mot69]. En utilisant une théorie de perturbation, Basko, Aleiner et Altshuler ont récemment montré que l'interaction électron-électron ne peut pas produire d'effet similaire à moins que la température dépasse une certaine valeur critique. Une transition de phase métal-isolant se produit à cette température qui peut être vue comme une transition de phase d'Anderson entre une phase localisée-délocalisée d'états à plusieurs corps dans l'espace de Fock [BAA06]. Ces dernières années, les progrès faits dans la manipulation des gaz atomiques ultra froids ont ouvert la possibilité d'étudier expérimentalement les systèmes quantiques de plusieurs particules en interaction. Comme le potentiel ressenti par les atomes peut être contrôlé facilement en changeant l'intensité des lasers, ces systèmes sont de bons candidats pour l'observation des effets du désordre sur les systèmes de plusieurs particules en interaction [SP06, LCB⁺07, PSP11, PASP12, JBM⁺12].

Alors que le mécanisme de la transition d'Anderson est relativement bien compris, de nouveaux problèmes en relation avec la localisation, non pas dans l'espace direct, mais dans un espace de Hilbert plus compliqué, ont vu le jour ces dernières années [MFD⁺96, FOR09, BRTT12]. Ce domaine effervescent est connu sous le nom de localisation à plusieurs corps (*many-body localization* en anglais) et pose des questions fondamentales sur l'ergodicité et la thermalisation des systèmes quantiques [BAA06, Sre94, Deu91]. La question de savoir comment un système quantique isolé atteint l'équilibre thermique à partir de conditions initiales génériques est une question ouverte. L'une des approches très populaire des systèmes quantiques hors équilibre est celle des trempes quantiques (voir [Rou09, RDO08] et les références dans ces articles). Une trempe quantique (*quantum quench* en anglais) consiste à préparer le système dans l'état propre $|\Psi^{(\lambda_1)}\rangle$ d'un Hamiltonien $H(\lambda_1)$ (où λ_1 est un paramètre apparaissant dans le Hamiltonien, le champ magnétique dans le cas du modèle d'Ising par exemple) et faire évoluer cet état avec le Hamiltonien $H(\lambda_2)$. L'état obtenu au temps t est alors donné par $|\Psi(t)\rangle = e^{iH(\lambda_2)t}|\Psi^{(\lambda_1)}\rangle$. La connaissance des vecteurs propres permet alors d'étudier l'évolution et la thermalisation d'observables $\mathcal{O}(t) = \langle \Psi(t) | \hat{\mathcal{O}} | \Psi(t) \rangle$ au temps t après le "quench" [CEF11, CC06]. La structure des états propres des systèmes quantiques de plusieurs particules en interaction n'est généralement pas connue car trop compliquée et n'est pas très bien comprise. Pour la plupart des systèmes intégrables, seul l'état fondamental est connu et sa structure est déjà très complexe. Pour les états excités dans le centre du spectre, les fonctions d'onde s'étalent de manière très irrégulière dans l'espace de Hilbert.

Une autre approche consiste à étudier l'entropie d'intrication permettant de caractériser les corrélations non classiques entre les différentes parties du système. L'entropie de Rényi $R_n(L)$ dépend d'un paramètre n et de la taille du système L et redonne l'entropie de Von Neumann dans la limite $n \rightarrow 1$. Elle est directement reliée aux probabilités de configurations du système. Par exemple, dans [SMP10], les auteurs s'intéressent à l'entropie de Rényi pour le modèle d'Ising bidimensionnel sur un cylindre infiniment long et étudient les probabilités d'observer une configuration donnée sur une section du cylindre (ie une configuration d'une chaîne de spins). En particulier, en se basant sur une étude numérique, les auteurs montrent que le terme sous-dominant du développement de l'entropie de Rényi avec la taille du système L est une constante universelle. Le terme d'ordre

dominant n'est pas universel mais est relié à la dimension multifractale que nous étudierons plus loin et est reliée aux propriétés de localisation dans l'espace de Hilbert. Alors que le spectre en énergie des modèles de chaînes de spins est relativement bien compris, la structure des états propres reste un domaine où de nombreuses questions restent ouvertes. Il n'existe pas beaucoup d'outils analytiques pour étudier les fonctions d'ondes excitées des modèles quantiques de N corps en interaction et la plupart des travaux sont orientés sur l'aspect numérique. L'approche généralement adoptée par les physiciens pour décrire les systèmes beaucoup trop complexes pour être étudiés exactement est l'approche statistique. C'est cette approche consistant à abandonner le point de vue déterministe qui a notamment mené à l'introduction de la théorie des matrices aléatoires.

La théorie des matrices aléatoires a initialement été introduite par E. P. Wigner dans le contexte de la physique nucléaire [Wig51]. La description exacte des niveaux d'énergies des gros noyaux est une tâche extrêmement difficile : les interactions entre nucléons sont beaucoup trop complexes et ne sont pas connues de manière générale. Pour les énergies dans le bas du spectre, Bethe a réussi à obtenir la densité d'états en utilisant le modèle du gaz de Fermi sans interaction. Dans la limite où l'énergie d'excitation du gaz est plus petite que l'énergie de Fermi ϵ_F , Bethe a montré que le spectre d'excitation consiste à remplir des niveaux d'énergie à une particule [Bet36]. Pour les états excités du noyau, Wigner a suggéré de modéliser le Hamiltonien du gros noyau atomique par une matrice aléatoire, c'est-à-dire une matrice à coefficients aléatoires. Le noyau est représenté ainsi par une "boîte noire" : comme on ne connaît pas les interactions entre nucléons, on suppose que ceux-ci interagissent de façon complètement aléatoire. Cette approche consistant à abandonner le point de vue déterministe est similaire à la démarche employée par Boltzmann dans le cadre de la physique statistique : la vision probabiliste associe une mesure de probabilité (la mesure de Gibbs Boltzmann) à chaque état de configuration d'un gaz constitué d'un grand nombre d'atomes. Les positions et vitesses des particules du gaz sont alors modélisées par des variables aléatoires. Avec cette description, on peut estimer la probabilité de trouver une particule à tel endroit avec telle vitesse mais on ne peut pas suivre la trajectoire d'une particule donnée. De la même manière, l'abandon de l'idée d'une résolution exacte de l'équation de Schrödinger pour les gros noyaux atomiques et la modélisation par une matrice aléatoire du Hamiltonien ne permet pas de calculer la position exacte des niveaux d'énergie du noyau atomique mais permet de donner une description statistique des énergies propres. La théorie des matrices aléatoires s'est révélée être une bonne description locale des niveaux excités des gros noyaux atomiques. En effet, en étudiant plus en détail la structure des données expérimentales provenant de la diffusion de neutrons sur des noyaux atomiques lourds, on s'est rendu compte que la distribution locale des niveaux d'énergie coïncidait avec celle des valeurs propres des matrices à coefficients aléatoires.

Par la suite, la théorie des matrices aléatoires a trouvé de très nombreuses applications dans des contextes aussi divers qu'inattendus tels que la théorie des nombres, le chaos quantique et les systèmes désordonnés. Un des domaines dans lequel la théorie des matrices aléatoires a trouvé de nombreuses applications est le chaos quantique. Un système intégrable présente autant de constantes du mouvement que de degrés de liberté, les équations du mouvement peuvent alors être explicitement résolues et les trajectoires sont régulières quasi-périodiques. À l'opposé, pour un système non-intégrable, ou chaotique, il n'existe pas de constante de mouvement autre que l'énergie et les trajectoires sont extrêmement sensibles aux conditions initiales. Deux trajectoires initialement très proches l'une de l'autre seront très différentes après un laps de temps : la propension qu'ont les trajectoires à diverger l'une de l'autre est mesurée par l'exposant de Lyapunov. Un exemple de système chaotique est le billard de Sinaï dont la dynamique est celle d'une particule libre se déplaçant dans un billard carré de côté a avec un disque diffuseur de rayon $R < a$ en son centre avec chocs élastiques sur les bords. La plupart du temps cependant, les systèmes sont intermédiaires entre les deux situations extrêmes (intégrable et chaotique), leur dynamique est dite mixte ou intermédiaire [Gir02]. Dans les années 1980, de nombreuses études expérimentales et numériques ont amené à penser que les caractéristiques classiques d'intégrabilité ou de chaoticité d'un système se manifestaient dans la nature de la distribution locale des valeurs propres. Alors que la distribution des valeurs propres des systèmes classiquement chaotiques est bien décrite localement par les prédictions des matrices aléatoires (conjecture de Bohigas-Giannoni-Schmit [BGS84]), celle des modèles classiquement intégrables présentent une distribution locale de niveaux d'énergies comparable à celle de variables aléatoires indépendantes (conjecture de Berry-Tabor [BT77b]). Dans le domaine des systèmes quantiques de N corps en interaction, la statistique spectrale permet de distinguer les phases localisée et délocalisée. Dans la phase délocalisée, les niveaux d'énergie sont décrits par la prédiction des matrices aléatoires et la statistique des niveaux correspond généralement au résultat pour l'ensemble gaussien invariant (GOE). La statistique des niveaux est poissonnienne dans la phase localisée puisque les fonctions d'onde correspondant à des énergies très proches l'une de l'autre sont exponentiellement localisées et ont un recouvrement nul. Il semble donc exister une relation générale entre la nature de la statistique des niveaux d'énergie (GOE/Poisson), les propriétés de localisation (délocalisé / localisé) et l'ergodicité (ergodique / peu ergodique) du système à plusieurs particules

en considération bien que certains résultats récents viennent faire part d'un comportement plus riche [BRTT12].

Mon travail de thèse est consacré à l'étude de quelques aspects de la physique quantique des systèmes quantiques à N corps en interaction. Il est orienté sur l'étude des chaînes de spins quantiques. “Nous dessinons donc des petites flèches sur une feuille de papier” (voir citation en début d'introduction), mais ce n'est pas tout ! Je me suis intéressé à plusieurs questions relatives aux chaînes de spins quantiques, du point de vue numérique et analytique à la fois. J'aborde en particulier les différentes thématiques que j'ai discutées plus haut : structure des fonctions d'ondes, forme de la densité d'états et statistiques spectrales. Sur le plan technique, j'ai été amené à utiliser des méthodes de seconde quantification pour la diagonalisation exacte des modèles intégrables. En particulier, j'ai utilisé la transformation de Jordan-Wigner qui permet de passer d'un Hamiltonien de spins à celui de fermions sans interaction pour certains modèles intégrables. Cette technique suivie d'une rotation de Bogoliubov permet d'obtenir les niveaux d'énergie des chaînes de spins intégrables sous forme de remplissage à une particule de niveaux fermioniques. L'obtention des états propres est une tâche beaucoup plus ardue : pour les modèles intégrables par la transformation de Jordan-Wigner, les coefficients du développement de l'état fondamental sur la base des états de configurations de la chaîne de N spins sont donnés par le déterminant d'une matrice $N \times N$. La matrice peut être simple, sans structure particulière ou Toeplitz par bloc suivant le modèle étudié et le calcul du déterminant fait intervenir des outils d'analyse complexe. Du point de vue numérique, j'ai développé mes propres codes de diagonalisation exacte pour les chaînes de spins quantiques. En particulier, j'ai implémenté la symétrie de translation pour les modèles invariants par translation (ce qui ne fut pas tâche facile!).

L'organisation du manuscrit est la suivante.

Le chapitre 1 est consacré aux méthodes numériques que j'ai utilisées tout le long de ma thèse. Il m'a semblé intéressant de commencer l'étude des chaînes de spins quantiques d'un point de vue numérique. Cette approche permet, selon moi, d'introduire de manière assez naturelle les notions utilisées. Elle apporte de plus une compréhension transparente de la “physique” du problème et une vision plus “expérimentale”. Je commence donc par le modèle le plus simple de chaîne de spins, le modèle d'Ising unidimensionnel en champ transverse. J'introduis en particulier l'espace des configurations dans l'espace de Hilbert et leur codage numérique par représentation binaire. Je présente ensuite la méthode de diagonalisation exacte qui repose sur la diagonalisation du Hamiltonien dans la base des états de configurations. Cette méthode nécessite de connaître l'action des différents termes du Hamiltonien sur les états de bases. L'action du Hamiltonien sur un état $|\vec{\sigma}\rangle$ est équivalent à une certaine opération (retournement de spins, multiplication par la valeur du spin à un certain site, ...) sur les bits représentant l'état $|\vec{\sigma}\rangle$. La diagonalisation exacte, qui permet d'avoir accès à l'ensemble du spectre du modèle étudié et de mesurer presque n'importe quelle observable, est cependant limitée par la taille des systèmes accessibles : le temps nécessaire à la diagonalisation d'une matrice de taille N_H est de l'ordre de N_H^3 avec $N_H = 2^N$ la taille de l'espace de Hilbert et N le nombre de spins. Cette limitation m'a conduit à la question des symétries et à l'implémentation numérique de celles-ci. Les symétries permettent de réduire la taille de l'espace de Hilbert et donnent une information physique supplémentaire à travers les nombres quantiques conservés. En particulier, je me suis attardé sur la symétrie de translation et je détaille les étapes nécessaires à l'implémentation d'un code de diagonalisation exacte la prenant en compte. J'ai essayé de ne pas trop rentrer dans les détails formels de théorie des groupes et je donne à chaque fois des exemples simples pour clarifier les notions introduites lorsque cela est nécessaire. Bien que l'implémentation numérique des symétries améliore la situation et repousse un peu plus loin la limitation imposée par la taille du système, il est parfois difficile de conclure sur la nature du système dans la limite thermodynamique. Ceci m'a alors amené à envisager l'étude de techniques numériques itératives permettant d'atteindre des chaînes de spins plus grandes. Les méthodes itératives ne permettent pas d'avoir accès à l'ensemble du spectre. En particulier, je discute la méthode de Lanczos qui est basée sur la méthode des puissances et qui permet d'avoir accès au spectre de basse (ou haute) énergie du système. Ce chapitre introductif a pour but de familiariser le lecteur avec les notions d'états de configurations dans l'espace de Hilbert, l'action des différents opérateurs de Pauli sur ces états et les symétries de la chaîne de spins.

Au chapitre 2, j'étudie les densités spectrales des modèles de chaînes de spins quantiques [AB14b]. Les densités d'états sont des caractéristiques importantes des systèmes quantiques : de par leur définition, elles permettent d'avoir accès aux quantités thermodynamiques puisqu'elles sont données par les transformées de Laplace inverse de la fonction de partition du système. Je commence par donner quelques exemples de densités spectrales connues qui apparaissent dans divers problèmes de physique tels que le modèle du gaz de Fermi en physique nucléaire, les billards quantiques ou encore les matrices aléatoires. Ces exemples permettent de présenter l'éventail des techniques à disposition pour le calcul de la densité d'états. Lorsque l'expression analytique exacte des niveaux d'énergie est connue, ce qui est généralement le cas pour les modèles intégrables, la stratégie

habituelle pour calculer la densité d'états consiste à d'abord calculer la fonction de partition du système, puis à prendre la transformée de Laplace inverse. La transformée de Laplace peut toujours être mise sous la forme d'une intégrale de l'exponentielle d'une certaine fonction et peut être évaluée par la méthode du col dans la limite thermodynamique. En développant la solution du col dans le centre du spectre, je montre que la densité d'états de la plupart des modèles intégrables se réduit à une gaussienne. Pour les modèles intégrables dont le spectre consiste en le remplissage de niveaux fermioniques, ce résultat peut être compris assez facilement en utilisant le théorème de la limite centrale. En effet, les niveaux d'énergies s'obtiennent par une somme sur la présence ou non de fermions avec une certaine énergie (de manière basique une somme de 0 et 1) et peuvent donc être vus comme les réalisations d'un processus aléatoire. Pour le modèle d'Ising en champ transverse, je montre que dans certaines limites de couplage au champ magnétique, ce processus aléatoire est une marche aléatoire brownienne.

Le modèle d'Ising en champ transverse est intégrable et se diagonalise par la transformation de Jordan-Wigner, qui envoie les opérateurs de spins sur des opérateurs fermioniques. Le spectre de ce modèle se réduit donc au remplissage de niveaux fermioniques avec des règles de sélection sur le nombre d'excitations provenant de la structure du vide de Bogoliubov et de la loi de conservation de la parité. En calculant la fonction de partition de ce modèle, je montre que dans la limite thermodynamique, la méthode du col redonne la loi gaussienne dans le centre du spectre. En étudiant les limites de couplages faible et fort au champ extérieur, j'ai observé l'apparition de pics dans la densité d'états dont l'origine est liée aux fortes dégénérescences apparaissant dans ces limites de couplage. Dans la limite thermodynamique, les pics se recouvrent et on retrouve l'approximation gaussienne. Cependant, comme la limite thermodynamique n'est pas atteignable en pratique, il m'a semblé important de trouver des approximations des densités d'états afin de décrire les pics dans cette limite. L'hypothèse principale pour la description des pics suppose un étalement gaussien des pics autour de leur positions dégénérées classiques. Cette hypothèse est à la base de l'approximation multi-gaussienne que j'ai développée. Comme la distribution gaussienne est caractérisée par ces deux premiers moments uniquement, la connaissance des deux premiers moments du Hamiltonien dans le sous-espace dégénéré associé à chaque pic, correspondant au sous-espace avec un nombre de spins up fixe, donne une bonne approximation de la densité d'états. Les formules trouvées sont simples et s'écrivent comme des sommes de gaussiennes centrées sur les pics et dont la variance est donnée par le moment d'ordre 2 du Hamiltonien dans le sous-espace dégénéré associé au pic. Ces formules m'ont permis de décrire et reproduire les comportements observés numériquement.

Dans un deuxième temps, j'entame l'étude d'un modèle non intégrable. En ajoutant un champ longitudinal au modèle d'Ising intégrable, l'intégrabilité du système est brisée et les niveaux d'énergies ne peuvent pas être obtenus exactement dans ce nouveau modèle. Néanmoins, en utilisant les premiers moments du Hamiltonien, je montre que dans la limite thermodynamique, la densité d'états est bien décrite par une loi normale avec des corrections en $1/N$ où N est le nombre de spins. Le résultat que j'ai obtenu est en accord avec le terme correctif trouvé pour des chaînes de spins aléatoires dans [KLW14a]. L'approximation peut être améliorée en prenant en compte les termes correctifs d'ordre supérieur, en puissance de $1/N$, calculables au moyen des moments d'ordre supérieur du Hamiltonien. Pour les mêmes raisons que dans le cadre du modèle d'Ising intégrable, ce modèle présente des pics dans la densité d'états dans certaines limites de constantes de couplage. Ces pics ne peuvent être décrits par les corrections à la loi normale et sont reliés aux dégénérescences des niveaux d'énergies qui apparaissent dans ces limites. Pour de petites déviations de ces limites, les pics acquièrent une certaine largeur et je montre que les pics peuvent être décrits par une superposition de gaussiennes dont les paramètres sont obtenus en calculant les deux premiers moments du Hamiltonien projeté dans un certain sous-espace (celui des états dégénérés). Ce modèle permet de mettre en avant le lien intéressant qui existe entre la théorie des nombres et la dégénérescence des états d'énergie dans la limite de faible champ transverse. Je compare finalement les résultats théoriques aux résultats numériques obtenus par diagonalisation exacte. En guise de question d'ouverture et de perspective future, je montre comment mes résultats peuvent être étendus à d'autres modèles quantiques de N corps en interaction. Je discute en particulier le modèle de Bose-Hubbard pour lequel des pics peuvent apparaître dans certaines limites de couplage. L'ensemble de nos résultats sur les densités spectrales peuvent être retrouvés dans [AB14b].

Le chapitre 3 est consacré à l'étude de la statistique spectrale dans les problèmes quantiques de N corps en interaction. Dans ce chapitre je m'intéresse à une nouvelle quantité permettant de distinguer les statistiques spectrales de manière naturelle et sans une quelconque opération préliminaire sur le spectre. La nature intégrable ou chaotique d'un système classique se manifeste au niveau quantique par une différenciation dans la statistique des niveaux d'énergie. La distribution de l'espacement d'énergie est la mesure de référence utilisée pour distinguer les statistiques spectrales. Cependant, afin d'obtenir des résultats sur cette quantité, le spectre du Hamiltonien doit préalablement être "unfolded" (déployé en français) en raison de la non uniformité de la densité d'états.

Cet “unfolding” est facile à implémenter pour les modèles dont la densité d’états est connue exactement (ce qui est le cas pour la plupart des modèles intégrables) et pour les modèles où une approximation de la densité d’états est connue. Les résultats que j’ai obtenus au chapitre 2 sur les approximations multi-gaussiennes de la densité d’états des chaînes de spins quantiques peuvent être utilisés pour effectuer l’unfolding. Dans le cas où aucune approximation de la densité d’états n’est connue, on effectue alors un lissage numérique de la densité d’états. Cependant, suivant la méthode de lissage utilisée, ceci peut introduire des effets non-physiques et non contrôlables dans l’analyse statistique du spectre. De plus, dans les problèmes quantiques de N corps, la taille de l’espace de Hilbert croît généralement exponentiellement avec le nombre de particules, entraînant un manque de données pour pouvoir faire une statistique. Ces limitations ont récemment amené à l’introduction d’une nouvelle mesure se passant de la procédure d’unfolding basée sur le rapport d’espacements successifs plutôt que les espacements [OH07]. Cette mesure est indépendante de la densité d’états locale et a été utilisée à maintes reprises ces dernières années dans l’étude des propriétés des systèmes quantiques de N corps en interaction [KRBL10, OPH09, OH07, CFIM12, SR10, CARK12]. Cependant, il n’existait jusqu’à présent aucune prédiction théorique pour cette mesure dans les ensembles de matrices aléatoires et les résultats étaient comparés aux données obtenues par simulations de larges matrices aléatoires. En suivant l’idée du surmise de Wigner pour le calcul de la distribution de l’espacement, j’ai calculé une approximation de la distribution du rapport d’espacements pour des matrices 3×3 . Les résultats obtenus pour les différents ensembles de matrices aléatoires se sont révélés être de bonnes approximations du résultat asymptotique pour des matrices de tailles $N \gg 1$! Ce travail a été accompli avec mon directeur de thèse et en collaboration avec Olivier Giraud et Guillaume Roux [ABGR13].

Afin de tester nos résultats, je compare les statistiques du rapport d’espacements successifs pour un modèle de chaîne de spins intégrable et non intégrable et je vérifie que l’on observe bien une transition entre une description par une loi poissonnienne (conjecture de Berry-Tabor) vers une description par les matrices aléatoires (conjecture Bohigas-Giannoni-Schmit). Un autre exemple d’application de nos résultats concerne les zéros de la fonction zêta de Riemann. Il est bien connu et vérifié numériquement que les zéros de la fonction zêta de Riemann se comportent comme les valeurs propres de matrices aléatoires de l’ensemble GUE [Ber86, BK96, Bog07]. Nous avons donc vérifié ce fait en calculant la densité du rapport d’espacements et comparé à la prédiction pour l’ensemble GUE. Bien que l’unfolding soit facile à implémenter pour les zéros de la fonction zêta de Riemann en raison du fait que la densité de zéros est connue, la mesure du rapport d’espacements ne nécessite pas d’unfolding et permet une analyse plus transparente et plus directe de la statistique des zéros. Dans un autre travail en collaboration avec mon directeur de thèse, Olivier Giraud, Pierpaolo Vivo et Eduardo Vivo, j’ai étudié la distribution jointe de rapports d’espacements successifs dans les différents ensembles gaussiens invariants et dans l’ensemble de Laguerre [ABG⁺13]. J’ai aussi introduit une généralisation de la mesure du rapport d’espacements successifs consistant à choisir le rapport d’espacements partageant une partie en commun. Je dérive en particulier des approximations pour la distribution de cette quantité dans les différents ensembles gaussiens invariants et compare mes prédictions aux résultats numériques pour une chaîne de spins et un billard rectangulaire. Finalement, je conclus en donnant les références de quelques articles dans lesquels ces résultats ont été utilisés et/ou généralisés [KH13, HCC⁺14, CDK14, Ric14, CK13, Kot14, DR14].

Au chapitre 4, je m’intéresse à la structure des fonctions d’ondes **fondamentales** des modèles de chaînes de spins quantiques. Les fonctions d’onde constituent, avec le spectre en énergie, les objets fondamentaux des systèmes quantiques : leur structure est assez compliquée et n’est pas très bien comprise pour la plupart des systèmes à N corps. En raison de la croissance exponentielle de la taille de l’espace de Hilbert avec le nombre de particules, l’étude des vecteurs propres est une tâche très difficile, non seulement du point de vue analytique mais aussi du point de vue numérique. Je démontre que l’état fondamental de tous les modèles que nous avons étudiés est multifractal dans la base naturelle des états propres des σ^z avec en général une dimension fractale non triviale [AB12, AB14a].

En traçant les coefficients du développement de la fonction d’onde fondamentale sur la base des états de configurations en fonction du codage binaire des configurations, on peut observer des comportements irréguliers et très complexes. Afin d’analyser ces comportements irréguliers, je commence par introduire le formalisme multifractal et je montre qu’il s’agit du formalisme adéquat pour la description du comportement des fonctions d’onde fondamentales des chaînes de spins [AB12, AB14a]. Afin de prendre en main les différentes notions qui apparaissent dans la suite de ce chapitre, je donne l’exemple le plus simple de processus générant une mesure multifractale : la cascade binomiale. La dimension multifractale est l’objet central dans le formalisme multifractal et correspond au facteur devant le terme dominant dans le développement de l’entropie de Rényi avec la taille de la chaîne. Bien que la dimension multifractale ne soit pas une quantité universelle (contrairement au terme sous dominant dans le développement de l’entropie de Rényi [SMP10]) et dépende de la base dans

laquelle on se place, elle est un bon indicateur du degré de localisation de la fonction d'onde dans l'espace de Hilbert. Afin de donner une idée plus intuitive de la dimension multifractale, je présente ensuite l'analogie avec le formalisme thermodynamique pour des pseudo-énergies associées aux composantes de l'état fondamental. Dans ce formalisme, la dimension multifractale D_q est reliée à l'énergie libre à la pseudo-température $1/q$.

Je montre comment les dimensions multifractales peuvent permettre de détecter une transition de phase quantique. Je me tourne ensuite vers le modèle XY qui est aussi diagonalisable par la transformation de Jordan-Wigner. Il existe pour ce modèle un ensemble de valeurs de paramètres, ie sur la ligne critique, pour lesquels les coefficients du développement de l'état fondamental peuvent s'obtenir en utilisant la cascade binomiale. Ce résultat constitue une preuve rigoureuse de la nature multifractale de l'état fondamental. D'autres modèles tels que le modèle XYZ ou encore le modèle XXZ sont intégrables par l'ansatz de Bethe mais la forme des coefficients du développement de la fonction d'onde fondamentale est très compliquée et n'est pas exploitable en pratique [Bet31, Bax07, YY66, Orb58]. Cependant, il existe des valeurs de paramètres dans ces modèles pour lesquels les coefficients du développement du fondamental prennent une forme relativement simple en relation avec des problèmes combinatoires [RS01, Str01]. J'utilise donc ces résultats pour trouver les dimensions multifractales et je les compare aux résultats numériques obtenus par la méthode de Lanczos. Finalement, je discute en guise de question future, les travaux récents que j'ai effectués sur les états excités des chaînes de spins mais qui n'ont pas encore été publiés. La nature chaotique du modèle d'Ising en champ transverse et longitudinal impose une étude des propriétés statistiques des fonctions d'onde. J'étudie donc comment les coefficients du développement des fonctions d'onde sont distribués. En particulier, je montre que dans la limite thermodynamique, les coefficients du développement des fonctions d'onde sont distribués suivant une loi gaussienne et je calcule les paramètres de cette gaussienne en utilisant les premiers moments du Hamiltonien. Comme la limite thermodynamique n'est pas atteignable en pratique, du fait de la croissance exponentielle de la taille de l'espace de Hilbert, il devient nécessaire de calculer les corrections à la loi gaussienne. Ces corrections sont de deux sortes : le premier type de corrections s'obtient en prenant en compte des moments d'ordre plus élevés du Hamiltonien menant à des corrections en puissance de $1/\sqrt{N}$ à la loi normale et le deuxième type de corrections provient de la structure des sous-espaces associés à la symétrie de translation. Les détails de ces calculs peuvent être retrouvés dans l'article que j'ai reproduit à la fin du chapitre.

Liste des publications, prépublications et articles en cours de rédaction

1. Yasar Yilmaz Atas and Eugene Bogomolny
Painlevé solution of an integral equation, *J. Phys. A : Math. Theor.* **45**, 135205 (2012)
L'article peut être trouvé sur ArXiv <http://arxiv.org/abs/1109.4787>.
2. Yasar Yilmaz Atas and Eugene Bogomolny
Multifractality of eigenfunctions in spin chains, *Phys. Rev. E* **86**, 021104 (2012)
Les résultats de cet article sont présentés au chapitre 4. L'article est reproduit à la fin du chapitre.
3. Yasar Yilmaz Atas and Eugene Bogomolny
Calculation of multifractal dimensions in spin chains, *Phil. Trans. R. Soc. A* 20120520 (2013)
Un descriptif calculatoire de ce travail est aussi donné au chapitre 4. Cette article peut être retrouvé sur ArXiv <http://arxiv.org/abs/1307.6016>.
4. Yasar Yilmaz Atas, Eugene Bogomolny, Olivier Giraud and Guillaume Roux
The distribution of the ratio of consecutive level spacings in random matrix ensembles, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 084101 (2013)
On trouvera une discussion relative à ce projet au chapitre 3. L'article est reproduit en fin de chapitre.
5. Yasar Yilmaz Atas, Eugene Bogomolny, Olivier Giraud, Pierpaolo Vivo and Edoardo Vivo
Joint probability densities of level spacing ratios in random matrices, *J. Phys. A : Math. Theor.* **46** 355204 (2013)
La synthèse de cet article est présenté en fin de chapitre 3 et peut être retrouvé sur ArXiv <http://arxiv.org/abs/1305.7156>.
6. Yasar Yilmaz Atas and Eugene Bogomolny
Gaussian and multi-Gaussian approximations for spectral density of the quantum Ising model in transverse and longitudinal fields
Accepted for publication in J. Phys. A : Math. Theor. (2014), arXiv : 1402.6858
Le détail des calculs fait l'objet du chapitre 2 et l'article correspondant figure en fin de chapitre.
7. Yasar Yilmaz Atas and Eugene Bogomolny
Quantum Ising model in transverse and longitudinal fields : chaotic wave functions
En cours de rédaction (2014)
Ce travail constitue la suite naturelle du travail présenté au chapitre 4 et est inclus en fin de chapitre.

MÉTHODES NUMÉRIQUES POUR LES CHAÎNES DE SPINS QUANTIQUES

Jette le chanceux dans la rivière, il en ressortira avec un poisson dans la bouche.

Proverbe arabe

Sommaire

1.1	Introduction	10
1.1.1	Plan du chapitre	11
1.2	Le modèle d'Ising unidimensionnel	11
1.2.1	Introduction	11
1.2.2	Espace des états de la chaîne de N spins	12
1.2.3	Action de H sur un état et énergies propres	12
1.3	Attaque numérique du problème : diagonalisation exacte	13
1.3.1	Codage binaire des états	13
1.3.2	Éléments de matrice de H	13
	Éléments non-diagonaux	14
	Éléments diagonaux	14
	Exemple pour $N = 2$	14
1.3.3	Limite de la diagonalisation exacte	14
1.4	Utilisation des symétries	15
1.4.1	Symétrie de réflexion	15
1.4.2	Symétrie de translation	16
	Réduction de la dimension de l'espace de Hilbert	17
	Exemple pour $N = 3$	17
1.5	Implémentation numérique de la symétrie de translation	18
	Construction de la fonction de translation des états	18
	Classe d'équivalence	18
	Compter le nombre de classes d'équivalence	19
	Vecteurs propres de l'opérateur de translation	20
	Construction du Hamiltonien dans la base symétrique	21
	Récapitulatif	23
1.6	Méthodes itératives	23
1.6.1	Méthode des puissances	24
1.6.2	Méthode de Lanczos	24
	La base de Lanczos	25
	Forme tridiagonale du Hamiltonien dans la base de Lanczos	25
	Perte d'orthogonalité	26
1.7	Conclusion	26

1.1 Introduction

Les chaînes de spins quantiques font partie des systèmes à N corps en interaction et font l’objet d’études intensives. Au même titre que l’oscillateur harmonique, les chaînes de spins constituent des paradigmes des modèles de la mécanique quantique. Introduits au début du siècle pour expliquer le magnétisme, ces modèles s’expriment en des termes très simples et permettent de capturer l’essence des phénomènes physiques complexes tels que les transitions de phase et les phénomènes critiques [Bet31]-[Hei28]. L’étude des chaînes de spins a été initiée par Bethe en 1931 [Bet31]. En utilisant la technique qui porte aujourd’hui son nom, Bethe a réussi à résoudre exactement le modèle d’Heisenberg pour une chaîne de spins $S = 1/2$. La méthode est assez complexe et nécessite un travail numérique important qui consiste généralement à trouver les racines d’équations non-linéaires. Le lecteur intéressé trouvera de plus amples détails sur l’ansatz de Bethe dans la série d’articles [KM98, KHM98, KHM00]. La plupart des propriétés de la chaîne de Heisenberg ont été obtenues bien plus tard avec le développement de techniques complémentaires tel que l’approche du groupe de renormalisation des théories de champs effectifs à basse énergie [Hal83, SFS89, GS89]. Haldane a conjecturé que la chaîne de Heisenberg présente des propriétés complètement différentes suivant que le spin est entier $S = 1, 2, \dots$ ou demi-entier $S = 1/2, 3/2, \dots$. Il était connu depuis Bethe que les corrélations de spins décroissaient en loi de puissance pour la chaîne de spin $S = 1/2$. Une des conséquences de ce comportement est que le spectre d’excitation est sans gap. Haldane a suggéré que pour la chaîne de spins $S = 1$, les corrélations spin-spin dans l’état fondamental décroissaient non pas en loi de puissance mais en loi exponentielle entraînant un spectre d’excitation “gappé”. Ce résultat est contre-intuitif puisque l’on s’attend (par exemple en se basant sur la théorie des ondes de spins) à ce que l’augmentation du spin S entraîne une tendance à avoir une phase ordonnée. La conjecture de Haldane a été vérifiée par de nombreuses études numériques [Nom89, Lia90, SGJ96]. Du point de vue expérimental, il existe des composés quasi-unidimensionnels avec $S = 1/2$ [TPCN93] et $S = 1$ [RZRV94] (et aussi pour des valeurs de S supérieures [GMC⁺96]) dans lesquels les différences prévues dans le spectre d’excitation ont été observées.

De nos jours, il est possible d’obtenir expérimentalement de nombreux composés avec différentes géométries de réseau ou d’interactions entre spins. Ces composés constituent ainsi une excellente opportunité de tester les modèles théoriques et les prédictions obtenues analytiquement ou numériquement. En physique du solide, les Hamiltoniens de spins quantiques décrivent l’interaction magnétique effective entre le spin des électrons dont les mouvements sont gelés dans des phases d’isolant de Mott. La forme de ces Hamiltoniens peut être obtenue en partant directement du problème des électrons en interaction [And59, Mat65]. Les détails microscopiques du réseau ainsi que des constantes de couplages entre spins donnent accès à toute une zoologie de systèmes dont les comportements ne sont pas très bien compris et font l’objet de recherches actives.

Les modèles étudiés par les physiciens doivent être assez simples pour pouvoir être abordés de manière analytique et dans le même temps, rester assez complexes pour capturer des propriétés physiques non-triviales. Bien que les équations régissant le comportement de ces systèmes soient connues, elles sont pour la plupart du temps trop compliquées pour être résolues exactement comme le notait déjà Dirac dans son article sur les systèmes d’électrons en interaction [Dir29]

The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations much too complicated to be soluble. It therefore becomes desirable that approximate practical methods of applying quantum mechanics should be developed, which can lead to an explanation of the main features of complex atomic systems without too much computation.

Aujourd’hui, la puissance des ordinateurs permet de simuler des systèmes avec des nombres de particules de l’ordre de la dizaine permettant ainsi d’explorer et exploiter des propriétés physiques riches. Les simulations numériques apportent des informations complémentaires aux outils théoriques et elles sont parfois les seuls moyens d’étudier ces systèmes. Il existe de nombreux algorithmes permettant d’aborder les problèmes quantiques à N corps, chacun possédant ses avantages et inconvénients. De manière assez simple (et réductionniste), cette thèse a été articulée autour de la résolution et l’exploitation de l’équation de Schrödinger

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (1.1)$$

avec des Hamiltoniens de spins H définis sur réseau. Bien que la formulation du problème soit extrêmement simple, on se heurte en pratique à un problème majeur. Généralement, la taille de l’espace de Hilbert de ces modèles de spins sur réseau croît exponentiellement avec le nombre de spins ! Si N_H est la taille de l’espace de Hilbert, le temps nécessaire aux programmes pour la diagonalisation est de l’ordre de N_H^3 . Par exemple, pour les modèles de spins $1/2$, l’espace de Hilbert est constitué par le produit tensoriel des bases individuelles $|\uparrow\downarrow\rangle$, de sorte que la taille croît comme $N_H = 2^N$ avec N le nombre de spins. Il est donc clair que la diagonalisation exacte de ces modèles devient une tâche extrêmement difficile pour un nombre de spins dépassant la dizaine.

C'est cette contrainte qui a amené au développement de méthodes numériques plus efficaces basées d'une part sur l'utilisation des symétries pour la diagonalisation exacte, et d'autre part sur la résolution variationnelle de l'équation de Schrödinger pour les méthodes approximatives telles que le groupe de renormalisation de la matrice-densité (abrégié en anglais DMRG).

1.1.1 Plan du chapitre

Ce chapitre a pour but d'introduire les modèles de chaînes de spins du point de vue numérique. En particulier, nous nous attacherons à présenter de manière détaillée les étapes nécessaires à l'implémentation d'un code numérique pour la diagonalisation exacte et l'utilisation des symétries. Nous nous intéresserons au modèle le plus simple de chaîne de spins : le modèle d'Ising en champ transverse. Son étude nous permettra d'introduire les notions de bases sur les chaînes de spins. La méthode de la diagonalisation exacte permet d'avoir accès à pratiquement toutes les observables (statiques et dynamiques) mais est limitée par la taille des systèmes. Nous montrerons donc la nécessité d'introduire des méthodes approximatives tels que l'algorithme de Lanczos permettant d'avoir accès aux états de basse énergies dans le spectre. Les résultats obtenus durant cette thèse sont pour la plupart tirés de ces deux techniques et seront présentés le moment venu.

1.2 Le modèle d'Ising unidimensionnel

1.2.1 Introduction

Le Hamiltonien du modèle d'Ising pour N spins $1/2$ est donné par

$$\hat{H} = - \sum_{j=0}^{N-1} \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x - \lambda \sum_{j=0}^{N-1} \hat{\sigma}_j^z. \quad (1.2)$$

Les $\hat{\sigma}_j^{(x,z)}$ sont les opérateurs de Pauli habituels agissant sur le spin au site numéro j . La forme de ces matrices dans la base des états propres de $\hat{\sigma}^z$ est donnée par

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

Le premier terme représente le couplage ferromagnétique au plus proche voisin tandis que le second terme donne le couplage au champ magnétique transverse. Le champ magnétique favorise l'alignement des spins tandis que le couplage ferromagnétique tend à retourner les spins (et donc créer du désordre). Dans la limite $\lambda \rightarrow \infty$, le Hamiltonien (1.2) est diagonal dans la base des états propres de $\hat{\sigma}^z$. A valeur finie de λ , le premier terme apparaissant dans (1.2) relie des configurations dans l'espace de Hilbert par effet tunnel ou autrement dit, par retournement de spins au site j .



FIGURE 1.1 – Réseau unidimensionnel de N spins quantiques. À chaque site, on définit un ensemble d'opérateur de Pauli. La dynamique du système est gouvernée par le Hamiltonien (1.2). La chaîne peut être fermée (conditions aux bords périodiques) ou ouverte (conditions aux bords libres).

Dans [BRA96], il a été montré que les ions Ho dans l'isolant LiHoF₄ peuvent occuper des états de spins parallèle ou anti-parallèles à un certain axe cristallin pouvant être représentés par une variable d'Ising. Le Hamiltonien effectif décrivant ce système est donné par le modèle d'Ising avec interaction à longue portée et permet d'avoir un accord avec l'expérience de l'ordre de 1%. Si l'on oublie la nature dipolaire à longue portée de l'interaction entre spins (qui décroît en $1/r_{ij}^3$ pour $|i - j| \gg 1$) et que l'on se restreint aux plus proches voisins, ce modèle se réduit au Hamiltonien (1.2).

Le modèle d'Ising constitue le paradigme des transitions de phase quantiques. Les transitions de phase classiques sont généralement conduites par fluctuations thermiques et le système classique gèle dans un état

fondamental sans fluctuations à $T = 0$. Les transitions de phase quantiques peuvent quant à elles se produire à température nulle en raison du principe d'incertitude de Heisenberg. À température nulle, les fluctuations quantiques existent aussi pour l'état fondamental. L'état fondamental de (1.2) dépend clairement de la valeur prise par la constante de couplage λ . Nous reviendrons plus tard sur la nature de l'état fondamental lorsque nous étudierons les propriétés d'échelles et de multifractalité de l'état fondamental des modèles de spins (voir Chapitre 4). Focalisons-nous pour l'instant sur notre problème qui consiste à chercher les énergies, et éventuellement les fonctions propres, du Hamiltonien (1.2) données par les solutions de l'équation de Schrödinger

$$H|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle. \quad (1.3)$$

1.2.2 Espace des états de la chaîne de N spins

L'espace des états de la chaîne quantique est le produit tensoriel des espaces d'états individuels de spins

$$\mathcal{E}_{\text{chaîne}} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{E}_N. \quad (1.4)$$

On obtient donc une base de $\mathcal{E}_{\text{chaîne}}$ en multipliant tensoriellement les bases de $\mathcal{E}_j$, que nous choisissons comme les bases de kets propres de $S_j^z = \sigma_j^z/2$, c'est-à-dire

$$\hat{\sigma}_j^z|\sigma_j\rangle = \sigma_j|\sigma_j\rangle, \quad \hat{\sigma}_j^x|\sigma_j\rangle = |-\sigma_j\rangle. \quad (1.5)$$

Ainsi l'état de la chaîne sera noté :

$$|\sigma_0\sigma_1\cdots\sigma_{N-1}\rangle = |\sigma_0\rangle \otimes |\sigma_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\sigma_{N-1}\rangle. \quad (1.6)$$

Les σ_i sont quantifiés et ne peuvent valoir que ± 1 . La valeur propre $+1$ est associée à l'état propre $|\uparrow\rangle$ tandis que la valeur propre -1 est associée à $|\downarrow\rangle$. L'espace des états est de dimension 2^N puisque chaque espace d'état individuel de spin est de dimension 2. De plus, comme les bases individuelles de spins $\{|\sigma_j\rangle\}$ sont orthonormées dans $\mathcal{E}_j$ (i.e. $\langle\sigma'_j|\sigma_j\rangle = \delta_{\sigma'_j\sigma_j}$), il vient que la base (1.6) est orthonormée dans $\mathcal{E}_{\text{chaîne}}$:

$$\langle\sigma'_0\sigma'_1\cdots\sigma'_{N-1}|\sigma_0\sigma_1\cdots\sigma_{N-1}\rangle = \delta_{\sigma'_0\sigma_0}\delta_{\sigma'_1\sigma_1}\cdots\delta_{\sigma'_{N-1}\sigma_{N-1}}. \quad (1.7)$$

1.2.3 Action de H sur un état et énergies propres

Regardons maintenant l'action des différents termes du Hamiltonien (1.2) sur une configuration de la chaîne $|\sigma_0\sigma_1\cdots\sigma_{N-1}\rangle$. Nous recherchons des états propres de H sous la forme

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_0,\dots,\sigma_{N-1}} C_{\sigma_0,\sigma_1,\dots,\sigma_{N-1}} |\sigma_0\cdots\sigma_{N-1}\rangle. \quad (1.8)$$

En utilisant la relation d'orthonormalisation (1.7), on trouve que les coefficients $C_{\sigma_0,\sigma_1,\dots,\sigma_{N-1}}$ satisfont à la condition de normalisation

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1 \rightarrow \sum_{\sigma_0,\dots,\sigma_{N-1}} |C_{\sigma_0,\sigma_1,\dots,\sigma_{N-1}}|^2 = 1. \quad (1.9)$$

En appliquant le Hamiltonien à $|\Psi\rangle$ et en utilisant le fait que

$$\hat{\sigma}_j^x\hat{\sigma}_{j+1}^x|\sigma_0\cdots\sigma_j\sigma_{j+1}\cdots\sigma_{N-1}\rangle = |\sigma_0\cdots-\sigma_j-\sigma_{j+1}\cdots\sigma_{N-1}\rangle, \quad (1.10)$$

$$\hat{\sigma}_j^z|\sigma_0\cdots\sigma_j\cdots\sigma_{N-1}\rangle = \sigma_j|\sigma_0\cdots\sigma_j\cdots\sigma_{N-1}\rangle, \quad (1.11)$$

on trouve que l'équation de Schrödinger $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ se transforme en un ensemble de 2^N équations algébriques de la forme :

$$\left(E + \lambda \sum_{j=0}^{N-1} \sigma_j\right) C_{\sigma_0,\sigma_1,\dots,\sigma_{N-1}} + (C_{-\sigma_0,-\sigma_1,\dots,\sigma_{N-1}} + \cdots + C_{\sigma_0,\sigma_1,\dots,-\sigma_{N-2},-\sigma_{N-1}}) = 0, \quad (1.12)$$

où les σ_k prennent les valeurs ± 1 . Résoudre ce système d'équations permet de trouver les 2^N énergies propres de l'Hamiltonien. Cependant, il est clair que pour un nombre de spins dépassant $N=2$, il devient déjà pénible de résoudre « à la main » ce genre de système. L'approche naïve de ce problème mène donc à une impasse pour $N > 2$. Même si la résolution exacte est possible, le temps humain nécessaire est gigantesque.

Fort heureusement, il existe une alternative : on peut transformer le problème en un système de fermions sans interaction et utiliser des méthodes de seconde quantification. Nous y reviendrons plus loin mais intéressons-nous avant tout aux méthodes numériques et à la diagonalisation exacte de notre Hamiltonien par l'outil numérique.

1.3 Attaque numérique du problème : diagonalisation exacte

1.3.1 Codage binaire des états

Nous avons vu que l'approche directe consistant à essayer de résoudre l'équation de Schrödinger mène à un problème numérique de taille. Une approche numérique du problème est donc nécessaire. Dans cette section nous nous intéressons à la manière dont on s'attaque à ce genre de problème du point de vue numérique. L'implémentation d'un code numérique efficace permet d'avoir une meilleure compréhension de la physique du problème. Pour trouver les énergies propres de notre Hamiltonien nous devons diagonaliser la matrice représentant notre opérateur H dans la base $|\sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_N\rangle$ où n'importe quelle autre base. Nous verrons par la suite comment réduire la taille de l'espace de Hilbert en travaillant dans la base des états symétriques ce qui permettra d'obtenir une amélioration sensible du temps de calcul [San11, Rou07]. Dans tous les cas, ceci est équivalent à résoudre le système (1.12).

Pour représenter notre Hamiltonien dans la base citée plus haut, il faut d'abord choisir une manière de classer une fois pour toutes nos vecteurs de base. Par exemple on peut spécifier :

$$\left\{ \begin{array}{l} |-1-1-1\cdots-1\rangle = |1\rangle, \\ |-1+1-1\cdots-1\rangle = |2\rangle, \\ \vdots \\ |+1+1+1\cdots+1\rangle = |2^N\rangle. \end{array} \right. \quad (1.13)$$

Cette méthode de classification est assez lourde à implémenter numériquement : on fixe le premier spin, soit à $+1$, soit à -1 , puis on passe au deuxième spin que l'on fixe soit à $+1$ soit -1 , et ainsi de suite. Lorsqu'on arrive en bout de chaîne on affecte une valeur à la configuration créée. Ensuite on revient au premier spin et on recommence en faisant attention à ne pas refaire la même configuration ! Il est évident que cette méthode, quelque peu naïve, fait perdre un temps incroyable. De plus l'affectation est quelque peu arbitraire : il y a $(2^N)!$ classifications différentes possibles et rien n'assure que la classification choisie donnera une forme symétrique pour le Hamiltonien.

Une autre manière de faire affecte de manière naturelle une valeur à une configuration donnée. L'idée est toute simple : quand un spin vaut -1 on le remplace par 0, et si il vaut $+1$ on le laisse à $+1$. Par exemple on fera la correspondance :

$$|1-11-111-1-111\rangle \equiv |1010110011\rangle. \quad (1.14)$$

La suite de 0 et 1 est la représentation binaire d'un nombre décimal ! Mieux que cela : il suffit d'écrire tous les nombres décimaux de 0 à $2^N - 1$ pour obtenir toutes les configurations possibles. Prenons $N = 2$ par exemple, les différents états s'écriront :

$$\left\{ \begin{array}{l} |0\rangle \equiv |00\rangle, \\ |1\rangle \equiv |01\rangle, \\ |2\rangle \equiv |10\rangle, \\ |3\rangle \equiv |11\rangle. \end{array} \right. \quad (1.15)$$

Notons que l'affectation des états commence à partir de 0. L'énorme avantage ici est que l'on utilise des nombres binaires : le code machine ! Tout nombre décimal entre 0 et $2^N - 1$ représente une configuration de la chaîne de spin

$$|a\rangle = |a_0a_1\cdots a_{N-1}\rangle, \quad a_k = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}, \quad 0 \leq k \leq N-1. \quad (1.16)$$

Les représentations binaires et décimales de a sont reliées par

$$a \equiv (a)_{10} = \sum_{j=0}^{N-1} a_j 2^{N-1-j}, \quad (a)_2 = a_0a_1\cdots a_{N-1}. \quad (1.17)$$

1.3.2 Éléments de matrice de H

Maintenant que nous avons bien défini nos vecteurs de base, les éléments matriciels de H s'écrivent comme

$$H_{ij} \equiv \langle i|H|j\rangle, \quad i, j = 0, 1, 2, \dots, 2^N - 1. \quad (1.18)$$

La matrice représentant notre Hamiltonien est une matrice creuse : le nombre d'éléments non-nuls est typiquement de l'ordre du nombre de spins N , qui est évidemment bien inférieur à la taille de l'espace de Hilbert qui lui croît exponentiellement avec le nombre de spins $N_H = 2^N$. Regardons l'action des différents éléments du Hamiltonien (1.2) sur les états de base.

Éléments non-diagonaux

Le terme de retournement de spins $\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x$ dans H couple des spins qui se trouvent sur des sites différents et conduit de ce fait aux éléments non-diagonaux. Numériquement, ce terme du Hamiltonien se traduit par une fonction qui retourne les bits (respectivement spins) aux sites j et $j + 1$ du nombre k (de la configuration $|k\rangle$ respectivement). En pratique, le programme marche comme ceci :

1. on propose une configuration initiale $|a\rangle$,
2. on parcourt la chaîne (les bits) en faisant une boucle sur les paires de sites voisins $j \in [0, N - 2]$,
3. à chaque fois que l'on retourne deux spins voisins, ceci nous donne un élément matriciel non-nul $\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x |a\rangle = |b\rangle \rightarrow H_{ab} = -1$,
4. on incrémente la configuration initiale $|a\rangle \rightarrow |a + 1\rangle$ et on retourne à l'étape 2 et ainsi de suite jusqu'à atteindre la configuration $|2^N - 1\rangle$.

Éléments diagonaux

Le couplage au champ magnétique donne les éléments diagonaux :

$$-\lambda \sum_{j=0}^{N-1} \sigma_j^z |a\rangle = f(a) |a\rangle, \quad (1.19)$$

où $f(a) = -\lambda(2\text{Countbit}(a) - N)$ et $\text{Countbit}(a)$ est le nombre de bits 1 (respectivement le nombre de spins up) dans la représentation binaire de a (dans la configuration $|a\rangle$ respectivement).

Exemple pour $N = 2$

Appliquons $H = -\sigma_0^x \sigma_1^x - \lambda(\sigma_0^z + \sigma_1^z)$ aux états (1.15), en utilisant les formules précédentes, on trouve facilement :

$$\begin{cases} H|0\rangle &= -|3\rangle + 2\lambda|0\rangle, \\ H|1\rangle &= -|2\rangle, \\ H|2\rangle &= -|1\rangle, \\ H|3\rangle &= -|0\rangle - 2\lambda|1\rangle. \end{cases} \quad (1.20)$$

Une fois que la matrice H est bien définie, on utilise soit la routine `gsl_eigen_symm` de la *GNU Scientific Library*, soit les programmes de la bibliothèque *LAPACK* qui, basiquement, prennent en argument la matrice H et renvoient les valeurs propres et éventuellement les vecteurs propres. Nous présenterons plus loin les résultats numériques.

1.3.3 Limite de la diagonalisation exacte

L'avantage de la diagonalisation exacte est qu'elle donne accès à l'ensemble du spectre (valeurs et vecteurs propres). Il est ainsi possible d'étudier et calculer des valeurs moyennes d'observables physiques telles que l'aimantation, ou encore obtenir des résultats sur les fonctions de corrélations. La plupart du temps, les physiciens s'intéressent à la limite thermodynamique de ces systèmes correspondant à un nombre infini de degré de liberté en interaction. Bien évidemment, cette limite n'est pas atteignable en pratique. Si on appelle N_H la dimension de l'espace de Hilbert, croissant exponentiellement avec la taille de la chaîne de spins N , les algorithmes de diagonalisation prennent un temps proportionnel à N_H^3 . De plus, l'espace nécessaire au stockage de la matrice H croît lui aussi exponentiellement avec le nombre de spins N . En pratique on ne peut donc atteindre que des chaînes avec un nombre de spins $N = 16$ au maximum (correspondant à un espace de Hilbert de taille $N_H = 65536$, la mémoire vive requise étant alors de l'ordre de 20Go). Une grande attention doit donc être portée aux conclusions faites sur la limite thermodynamique à partir des tailles finies accessibles¹.

1. Ceci sera particulièrement le cas lorsque nous étudierons les dimensions multifractales des états fondamentaux des chaînes de spins au Chapitre 4.

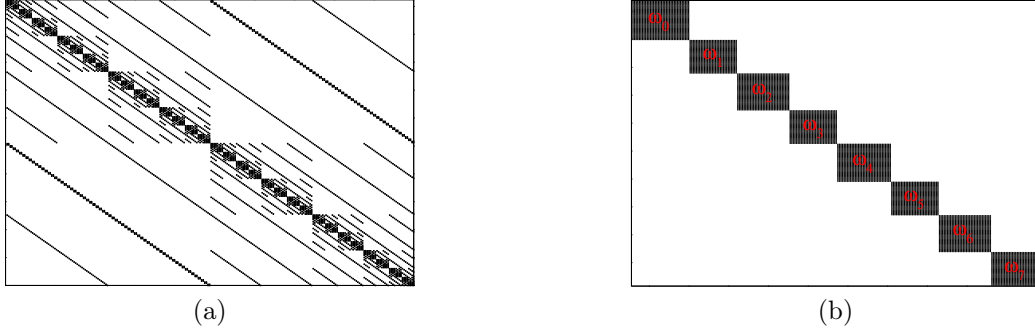


FIGURE 1.2 – Structure de la matrice représentant le Hamiltonien (1.2) dans différentes bases : (a) base des états propres de $\hat{\sigma}^z$, (b) base des états propres de l'opérateur de translation $\hat{T}$. Chaque point noir correspond à un élément non-nul dans la matrice. La matrice prend une forme diagonale par bloc dans la base des états propres de l'opérateur de translation. Chaque bloc est indexé par un nombre quantique associé aux valeurs propres ω_k de $\hat{T}$.

1.4 Utilisation des symétries

La limitation imposée par la mémoire physique accessible et le temps de calcul nécessaire aux programmes de diagonalisation demande de trouver des méthodes permettant d'améliorer quantitativement la taille des chaînes de spins accessibles. Une solution consiste à tirer profit de l'exploitation des symétries de la chaîne de spins afin de réduire la taille de l'espace de Hilbert. L'idée générale consiste à exprimer le Hamiltonien $\hat{H}$ dans la base des états propres d'un opérateur de symétrie $\hat{S}$ commutant avec le Hamiltonien $[\hat{H}, \hat{S}] = 0$. Le Hamiltonien prend alors une forme par bloc dans cette base, la taille des blocs étant typiquement de l'ordre de N_H/N_B où N_B représente le nombre de blocs de symétrie (égal au nombre de valeurs propres de l'opérateur de symétrie). Chaque bloc correspond à un nombre quantique conservé relié à une des valeurs propres de l'opérateur $\hat{S}$ et le Hamiltonien est diagonalisable indépendamment dans chacun des blocs (voir figure 1.2). Le temps nécessaire à la diagonalisation de tous les blocs est alors de l'ordre de N_H^3/N_B^2 ce qui est une amélioration nette par rapport à la diagonalisation directe².

Bien qu'en théorie la notion de symétrie soit extrêmement simple, il est néanmoins assez difficile de les implémenter numériquement. Les symétries apportent au travers des nombres quantiques associés une information physique supplémentaire. A titre d'exemple, nous présenterons en détail la symétrie de translation pour des chaînes fermées et verrons que les nombres quantiques conservés sont reliés à l'impulsion k des états. Nous essayerons de garder un langage simple et tenterons de ne pas entrer dans des considérations formelles de théorie des groupes [LP04]. Il n'est en effet pas nécessaire de rentrer dans ce formalisme qui peut parfois prêter à confusion alors que les idées sous-jacentes sont extrêmement simples. Nous donnerons ensuite les étapes importantes permettant l'implémentation d'un code numérique prenant en compte la symétrie de translation.

1.4.1 Symétrie de réflexion

La symétrie de réflexion est une symétrie discrète du réseau. Définissons l'opérateur de réflexion $\hat{P}$, aussi appelé parité, au travers de son action sur une configuration de la chaîne de spins

$$\hat{P}|\sigma_0\sigma_1\cdots\sigma_{N-2}\sigma_{N-1}\rangle = |\sigma_{N-1}\sigma_{N-2}\cdots\sigma_1\sigma_0\rangle. \quad (1.21)$$

L'opérateur $\hat{P}$ change donc les indices des spins de la façon suivante $i \rightarrow N - i - 1$. Comme $\hat{P}^2 = \mathbb{I}$, il vient que les valeurs propres de l'opérateur de parité sont données par $p = \pm 1$. Il est facile de voir que l'état

$$|\Psi\rangle = |\vec{\sigma}\rangle + p\hat{P}|\vec{\sigma}\rangle, \quad (1.22)$$

est un état propre de l'opérateur de parité $\hat{P}$ avec valeur propre p . Le Hamiltonien d'Ising (1.2) $\hat{H}$ commute avec $\hat{P}$, $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$. Il s'ensuit que la matrice représentant le Hamiltonien $\hat{H}$ prend une forme bloc diagonale dans la base des états propres de l'opérateur $\hat{P}$. Chacun des deux blocs est associé à une des valeurs propres p .

². Le temps nécessaires à la construction des différents blocs de symétries n'est pas pris en compte ici pour l'approximation du temps de calcul.

1.4.2 Symétrie de translation

La symétrie de translation apparaît dans tous les systèmes homogènes présentant des conditions aux bords périodiques³. C'est une symétrie du réseau discrète. Considérons l'opérateur de translation $\hat{T}$ agissant ainsi sur une configuration de la chaîne de spins

$$\hat{T}|\sigma_0\sigma_1\cdots\sigma_{N-2}\sigma_{N-1}\rangle = |\sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_{N-1}\sigma_0\rangle. \quad (1.23)$$

L'action de $\hat{T}$ sur une configuration de la chaîne de spins consiste donc à remplacer toutes les valeurs de la variable de spin au site n par celle au site $n + 1$. En appliquant N fois l'opérateur de translation à une configuration, on retombe sur la même configuration :

$$\hat{T}^N|\sigma_0\sigma_1\cdots\sigma_{N-2}\sigma_{N-1}\rangle = |\sigma_0\sigma_1\cdots\sigma_{N-2}\sigma_{N-1}\rangle, \quad (1.24)$$

il s'ensuit que les valeurs propres de $\hat{T}$ sont données par les N racines de l'unité :

$$\omega_k = \exp\left(2i\pi \frac{k}{N}\right), \quad k = 0, 1, \dots, N-1. \quad (1.25)$$

L'entier k est appelé impulsion et constitue le nombre quantique associé à chaque secteur de symétrie. Dans la suite, nous dirons que nous travaillons dans le secteur d'impulsion k si un opérateur quelconque (généralement le Hamiltonien) est exprimé dans la base des états propres de $\hat{T}$ de valeur propre ω_k . Le groupe des translations est constitué de l'ensemble des opérations $\{\mathbb{I}, \hat{T}, \hat{T}^2, \dots, \hat{T}^{N-1}\}$. Il s'agit d'un groupe abélien, tous les éléments du groupe commutent entre eux

$$\hat{T}^n \hat{T}^m |\sigma\rangle = \hat{T}^{n+m} |\sigma\rangle = \hat{T}^m \hat{T}^n |\sigma\rangle. \quad (1.26)$$

Si nous choisissons des conditions aux bords périodiques pour notre Hamiltonien, on a

$$[\hat{H}, \hat{T}^n] = 0, \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (1.27)$$

Le Hamiltonien est invariant par translation, il s'ensuit que si $|\Psi\rangle$ est un état propre de $\hat{H}$ **non-dégénéré**, alors $\hat{T}^n |\Psi\rangle$ est aussi un état propre de $\hat{H}$ avec la même valeur propre. Autrement dit, les coefficients apparaissant dans le développement :

$$|\Psi\rangle = \sum_l \Psi_l |l\rangle, \quad (1.28)$$

vérifient

$$\Psi_l = \Psi_{T(l)} = \Psi_{T^2(l)} = \dots, \quad (1.29)$$

où $l' = T(l)$ est le codage décimal de la configuration translatée $|l'\rangle = \hat{T}|l\rangle$ (voir Table 1.1).

Vecteurs de base	Valeur composante
$ 0\rangle$	0
$ 1\rangle$	-0.408248
$T 1\rangle = 2\rangle$	-0.408248
$ 3\rangle$	-8.54928e-17
$T^2 1\rangle = 4\rangle$	-0.408248
$T^2 3\rangle = 5\rangle$	1.10733e-16
$T 3\rangle = 6\rangle$	1.10733e-16
$ 7\rangle$	-0.707107

TABLE 1.1 – Composantes du vecteur propre fondamental du modèle d'Ising avec un champ $\lambda = 0.5$ pour une chaîne de $N = 3$ spins. Le vecteur propre fondamental n'est pas dégénéré. Il vient que les composantes sont égales pour les vecteurs de base qui se déduisent les uns des autres par une translation (voir formules ci-dessous).

Cette propriété n'est évidemment pas vraie dans le cas où l'état $|\Psi\rangle$ est dégénéré. En effet si $|\Psi_{1,2}\rangle$ sont deux états propres du Hamiltonien avec la même valeur propre (i.e. $\hat{H}|\Psi_{1,2}\rangle = E|\Psi_{1,2}\rangle$) alors les états $\hat{T}|\Psi_{1,2}\rangle$

3. L'invariance par translation du système peut être brisée pour des chaînes fermées lorsque les constantes d'interactions entre les différents spins où les champs magnétiques appliqués dépendent du site par exemple. Ceci est le cas pour le modèle $H = -\sum_n J_n \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x - \sum_n \lambda_n \sigma_n^z$ avec $\{\vec{J}, \lambda\}$ étant des variables aléatoires.

sont aussi états propre du Hamiltonien avec la même valeur propre et peuvent s'écrire comme des combinaisons linéaires du type

$$\begin{aligned}\hat{T}|\Psi_1\rangle &= a_1|\Psi_1\rangle + b_1|\Psi_2\rangle, \\ \hat{T}|\Psi_2\rangle &= a_2|\Psi_1\rangle + b_2|\Psi_2\rangle.\end{aligned}$$

Il est clair que la relation (1.29) ne tient plus en raison du mélange des composantes des vecteurs $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$.

Réduction de la dimension de l'espace de Hilbert

Le Hamiltonien prend une forme diagonale par bloc si on l'écrit dans la base des états propres de l'opérateur de translation (ou tout autre opérateur de symétrie). Chaque bloc est associé à une des valeurs propres de l'opérateur de symétrie, en l'occurrence ω_k ici⁴. La diagonalisation indépendante des différents blocs permet ainsi d'obtenir tous les états d'énergies avec une impulsion k donnée. Dans ce qui suit, nous faisons le calcul détaillé pour une chaîne de $N = 3$ spins. Dans un premier temps, nous construisons explicitement les états propres de l'opérateur de translation. Nous exprimons ensuite le Hamiltonien (1.2) dans cette base et vérifions qu'il prend bien une forme diagonale par bloc. Nous nous intéressons ensuite à l'implémentation numérique de la symétrie de translation.

Exemple pour $N = 3$ Les valeurs propres de l'opérateur de translation sont données par :

$$\omega_k = \exp\left(2i\pi\frac{k}{3}\right), \quad k = 0, 1, 2. \quad (1.30)$$

La dimension de l'espace de Hilbert complet est $2^3 = 8$. Dans la représentation de spin $\hat{\sigma}^z$, les vecteurs de base sont donnés par :

$$\begin{aligned}|0\rangle &= |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle, & \hat{T}|0\rangle &= |0\rangle, \\ |1\rangle &= |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, & \hat{T}|1\rangle &= |2\rangle, \\ |2\rangle &= |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, & \hat{T}|2\rangle &= |4\rangle, \\ |3\rangle &= |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, & \hat{T}|3\rangle &= |6\rangle, \\ |4\rangle &= |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, & \hat{T}|4\rangle &= |1\rangle, \\ |5\rangle &= |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, & \hat{T}|5\rangle &= |3\rangle, \\ |6\rangle &= |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle, & \hat{T}|6\rangle &= |5\rangle, \\ |7\rangle &= |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, & \hat{T}|7\rangle &= |7\rangle.\end{aligned}$$

A droite, nous avons écrit l'action de l'opérateur de translation sur ces états. Les états qui se déduisent les uns des autres par une translation appartiennent à une même famille, en langage de théorie des groupes on dit qu'ils appartiennent à la même classes d'équivalence. Par exemple, ici nous avons 4 classes d'équivalence

$$0 = \{|0\rangle\}, \quad (1.31)$$

$$1 = \{|1\rangle, |2\rangle, |4\rangle\}, \quad (1.32)$$

$$2 = \{|3\rangle, |5\rangle, |6\rangle\}, \quad (1.33)$$

$$3 = \{|7\rangle\}. \quad (1.34)$$

Notons $a(N)$ le nombre de classe d'équivalence du groupe des translations de N éléments ($a(3) = 4$ par exemple). La formule générale pour $a(N)$ sera donnée plus loin. Cette décomposition en classes d'équivalence est très importante du point de vue numérique. Au lieu de garder en mémoire les 2^N états de bases, il suffit d'en garder uniquement un seul par classe. Les états propres de $\hat{T}$, que nous noterons $\{|\phi_i\rangle\}_{0 \leq i \leq 2^N - 1}$, sont donnés dans la Table 1.2 ci-dessous.

Dans cette nouvelle base, le Hamiltonien (1.2) prend la forme suivante :

$$H' = \begin{pmatrix} H_0 & & 0 \\ & H_1 & \\ 0 & & H_2 \end{pmatrix}.$$

4. Chaque bloc est indexé par son impulsion k . Dans la suite nous utiliserons de manière équivalente les deux terminologies. On dira par exemple que l'on travaille dans le bloc k ou bien le bloc w_k .

ω_0	ω_1	ω_2
$ \phi_0\rangle = 0\rangle$	$ \phi_4\rangle = 1\rangle + \omega_1 4\rangle + \omega_2 2\rangle$	$ \phi_6\rangle = 1\rangle + \omega_1 2\rangle + \omega_2 4\rangle$
$ \phi_1\rangle = 7\rangle$	$ \phi_5\rangle = 3\rangle + \omega_1 5\rangle + \omega_2 6\rangle$	$ \phi_7\rangle = 3\rangle + \omega_1 6\rangle + \omega_2 5\rangle$
$ \phi_2\rangle = 1\rangle + 2\rangle + 4\rangle$		
$ \phi_3\rangle = 3\rangle + 5\rangle + 6\rangle$		

TABLE 1.2 – Vecteurs propres de l’opérateur de translation $\hat{T}$ pour $N = 3$ spins (non normalisés). Les vecteurs dans une même colonne sont associés à la même valeur propre w_k .

Les blocs H_k sont indexés par le nombre quantique k et sont donnés par

$$H_0 = \begin{pmatrix} 3\lambda & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -3\lambda & -1 & 0 \\ 0 & -3 & -2 + \lambda & 0 \\ -3 & 0 & 0 & -2 - \lambda \end{pmatrix},$$

$$H_1 = H_2 = \begin{pmatrix} 1 + \lambda & 0 \\ 0 & 1 - \lambda \end{pmatrix}.$$

Le problème initial qui consistait à diagonaliser une matrice 8×8 s’est donc réduit à la diagonalisation d’un bloc de taille 4×4 (dans le secteur associé à ω_0) et de deux blocs de tailles 2×2 (dans les secteurs ω_1 et ω_2).

1.5 Implémentation numérique de la symétrie de translation

Tirer profit des symétries du réseau (ici l’invariance par translation) permet d’améliorer le temps de calcul des niveaux d’énergies et des vecteurs propres associés. Cependant, l’implémentation du code qui permet de prendre en compte les symétries n’est pas une tâche facile. Comme nous l’avons vu précédemment, l’idée de base consiste à écrire le Hamiltonien dans la base des états propres de l’opérateur de translation. Ceci permet entre autre de passer d’un problème de diagonalisation de matrice $2^N \times 2^N$ à la diagonalisation de N matrices de taille inférieure à 2^N (typiquement $2^N/N$). Nous présentons dans ce qui suit les étapes les plus importantes permettant l’implémentation d’un code qui prend en compte la symétrie de translation. Afin de bien comprendre les formules utilisées pour compter les différents objets apparaissant dans la suite de ce mémoire, nous aurons besoin de quelques notions provenant de la théorie des nombres. Celles-ci sont présentées dans l’Annexe A.

Construction de la fonction de translation des états La première étape consiste à créer une fonction $\text{Translate}(i)$ qui prend en argument une configuration $|i\rangle$ de la chaîne de spin et renvoie la configuration translatée.

Classe d’équivalence Il faut ensuite identifier les états $\{|i\rangle\}_{0 \leq i \leq 2^N - 1}$ qui appartiennent à la même classe d’équivalence. On propose ici un algorithme de génération des représentants des classes d’équivalence assez intuitif qui prend typiquement un temps proportionnel à $Na(N)$. Les représentants des classes d’équivalence sont en bijection avec les mots de Lyndon [Lyn54] de taille N dans un alphabet à $p = 2$ symboles $\{0, 1\}$. Des algorithmes plus efficaces ont été implémentés dans ce contexte [FJK86] et permettent de faire le travail en des temps de l’ordre de $a(N)$.

Soit le vecteur $\vec{V}$ de taille 2^N et de composantes $\vec{V}[i] = i$ avec $i = 0, 1, \dots, 2^N - 1$, correspondant aux configurations de la chaîne de spins. L’idée consiste à choisir une configuration $|k\rangle$ (respectivement composante k du vecteur $\vec{V}$) et à produire toutes les configurations appartenant à la même classe d’équivalence en appliquant successivement la fonction Translate à k . Si au bout de d itérations de l’opérateur de translation on retombe sur la configuration k , on dit que l’on a fermé l’orbite et que l’on a obtenu tous les éléments de la classe d’équivalence : $F_k = \{|k\rangle, \hat{T}|k\rangle, \dots, \hat{T}^{d-1}|k\rangle\}$. Remarquons dès à présent que le nombre d’éléments dans la classe d’équivalence d ne peut être égal qu’à un diviseur de N . Il n’est pas nécessaire de garder tous les éléments d’une famille en mémoire. Il suffit de garder un représentant de cette famille, généralement on choisit l’élément de la famille dont la représentation décimale est minimale $\min(F_k)$, et la taille de la famille $d = \text{card}(F_k)$. Il faut ensuite répéter la même opération pour $|l\rangle \notin F_k$ et ainsi de suite. Pour éviter les redondances, une technique consiste à éliminer toutes les composantes du vecteur $\vec{V}$ apparaissant dans F_k (en les mettant égales à zéro par exemple).

On appelle $a(N)$ le nombre de classes d'équivalence du groupe des translations à N éléments. Les représentants des classes d'équivalence doivent donc être enregistrés dans un vecteur de taille $a(N)$. Par exemple, dans le cas $N = 3$ que nous avons vu plus haut, les représentants des classes d'équivalence sont donnés par $\{0, 1, 3, 7\}$ (voir formules (1.31)-(1.34)) et $a(3) = 4$. Comme la définition numérique d'un vecteur nécessite généralement de connaître sa taille à l'avance, il est nécessaire de compter le nombre de classes d'équivalence pour N donné.

Compter le nombre de classes d'équivalence Afin de trouver la formule donnant le nombre de classes d'équivalence $a(N)$, nous passerons d'abord par la fonction $r(n)$ donnant le nombre de classes d'équivalence constituées de n éléments (le nombre de séquences binaires de période primitive n). Comme le nombre d'éléments dans une classe d'équivalence ne peut être égal qu'à un diviseur du nombre de spins N , on a de manière triviale

$$\sum_{d|N} dr(d) = 2^N, \quad (1.35)$$

où la somme est faite sur les diviseurs de N . Les états $|0\rangle$ et $|2^N - 1\rangle$ sont les seuls à constituer des classes d'équivalence à un élément. Il s'ensuit que $r(1) = 2$. Dans le cas où N est un nombre premier (uniquement divisible par 1 et lui-même), l'équation (1.35) donne

$$2^N = r(1) + Nr(N) = 2 + Nr(N), \quad (1.36)$$

qui est un cas particulier du petit théorème de Fermat stipulant que « si N est un nombre premier et si a est un entier quelconque, alors $a^N - a$ est un multiple de N ». On peut donc trouver la suite $r(d)$ par récurrence dont les premiers éléments sont donnés dans la Table 1.3.

n	1	2	3	4	5	6	7
$r(n)$	2	1	2	3	6	9	18

TABLE 1.3 – Nombre de classe d'équivalence constitué de n éléments. Séquence A001037 de OEIS.

En utilisant la formule d'inversion de Möbius [HWS07] sur l'équation (1.35), on trouve que

$$r(n) = \frac{1}{n} \sum_{d|n} \mu(d) 2^{n/d}, \quad (1.37)$$

où la fonction de Möbius μ est définie de $\mathbb{N}^*$ dans $\{-1, 0, 1\}$. La définition de la fonction de Möbius ainsi que la démonstration de la formule d'inversion sont données en Annexe A.

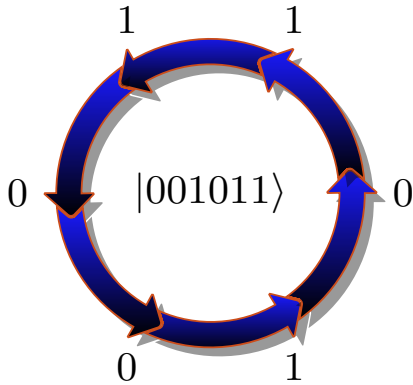


FIGURE 1.3 – Collier primitif à $p = 2$ symboles de longueur 6 où de manière équivalente un représentant d'une classe d'équivalence de taille 6.

La formule (1.37) est un cas particulier d'une formule apparaissant dans un article de MacMahon de 1892 sur le nombre de « colliers » primitifs de longueur n constitué de p symboles [Mac91]

$$M(n, p) = \frac{1}{n} \sum_{d|n} \mu(d) p^{n/d}. \quad (1.38)$$

Dans notre cas on a $r(n) = M(n, 2)$. Un exemple de collier primitif à 2 symboles est donné dans la figure 1.3 ci-contre. La formule (1.37) est aussi appelée formule de Witt [MKS04] et a été trouvée par ce dernier en 1937 en connexion avec un théorème sur les algèbres de Lie maintenant connu sous le nom de théorème de Poincaré-Birkhoff-Witt [Wit53].

Il a aussi été prouvé par Gauss [Gau00] que le nombre de polynômes de degré n sur un corps fini à p éléments avec p premier est donné par la formule (1.38). Le nombre de classes d'équivalence $a(N)$ du groupe des translations à N éléments est égal à

$$a(N) = \sum_{d|N} r(d) = \frac{1}{N} \sum_{d|N} \phi(d) 2^{N/d}, \quad (1.39)$$

où $\phi(d)$ est l'indicatrice d'Euler (voir Annexe A pour la définition de la fonction d'Euler). Afin de prouver ce résultat, nous partons du membre de droite de (1.39) et utilisons la relation (A.13) de l'Annexe A. On a

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{d|N} \phi(d) 2^{N/d} &= \frac{1}{N} \sum_{d|N} 2^{N/d} \sum_{p|d} \mu(p) \frac{d}{p}, \\ &= \sum_{d|N} \sum_{p|d} 2^{N/d} \frac{\mu(p)}{Np/d}. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Comme pour $d|N$ et $p|d$, on peut poser $q = Np/d$, entier positif de sorte que

$$\frac{1}{N} \sum_{d|N} \phi(d) 2^{N/d} = \sum_{q|N} \sum_{p|q} 2^{p/q} \mu(p) \frac{1}{q} = \sum_{q|N} r(q), \quad (1.41)$$

ce qu'il fallait montrer. Une approche plus directe permettant de retrouver ce résultat et consistant à compter les colliers primitifs est donnée en section A.4 de l'Annexe A.

Les premières valeurs de $a(N)$ sont données par $a(3) = 4$, $a(4) = 6$, $a(5) = 8$, $a(6) = 14, \dots$. On enregistre donc les représentants de la classe d'équivalences dans un vecteur de taille $a(N) < 2^N$.

Vecteurs propres de l'opérateur de translation Comme nous l'avons vu pour le cas $N = 3$, l'étape suivante consiste à construire les états propres de l'opérateur de translation $\hat{T}$. Considérons une classe d'équivalences constituée de d éléments $\{|r_0\rangle, |r_1\rangle, \dots, |r_{d-1}\rangle\}$. On rappelle que $d|N$ et que les éléments de la classe d'équivalences sont reliés les uns aux autres par une certaine translation

$$|r_p\rangle = \hat{T}^p |r_0\rangle = \hat{T}^{p-j} |r_j\rangle. \quad (1.42)$$

$|r_0\rangle$ est le représentant de la classe d'équivalences ou autrement dit $\hat{T}^d |r_0\rangle = |r_0\rangle$. Nous souhaitons construire à partir de ces éléments tous les états propres possibles de l'opérateur $\hat{T}$. Définissons tout d'abord l'opérateur⁵

$$\hat{L}_k = \frac{\sqrt{d}}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \omega_k^i \hat{T}^i, \quad (1.43)$$

et regardons son action sur le représentant $|r_0\rangle$. On a

$$\begin{aligned} \hat{L}_k |r_0\rangle &= \frac{\sqrt{d}}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \omega_k^i \hat{T}^i |r_0\rangle, \\ &= \frac{\sqrt{d}}{N} \left(\sum_{i=0}^{d-1} \omega_k^i \hat{T}^i |r_0\rangle + \sum_{i=d}^{2d-1} \omega_k^i \hat{T}^i |r_0\rangle + \dots + \sum_{i=(m-1)d}^{md-1} \omega_k^i \hat{T}^i |r_0\rangle \right) \end{aligned} \quad (1.44)$$

avec $N = md$. En utilisant maintenant (1.42) et en regroupant les termes, on arrive à

$$\hat{L}_k |r_0\rangle = \frac{\sqrt{d}}{N} \left(\sum_{i=0}^{d-1} \omega_k^i |r_i\rangle \right) \times \left(1 + \omega_k^d + \omega_k^{2d} + \dots + \omega_k^{(m-1)d} \right). \quad (1.45)$$

Il est facile de montrer que

$$\sum_{i=0}^{m-1} \omega_k^{id} = \begin{cases} m & \text{si } k \text{ est un multiple de } m, k = p \times m, \\ 0 & \text{dans le cas contraire.} \end{cases}$$

Il s'ensuit que si k n'est pas un multiple de $m = N/d$, alors $\hat{L}_k |r_0\rangle = 0$ et on ne peut construire l'état propre de $\hat{T}$ d'impulsion k . Montrons maintenant que, si k est un multiple de m , $k = mp = Np/d$ avec $p = 0, 1, \dots, d-1$, alors l'état $|\zeta_k\rangle = \hat{L}_k |r_0\rangle$ est un état propre de l'opérateur de translation. On a dans ce cas

$$\hat{L}_k |r_0\rangle = |\zeta_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{i=0}^{d-1} \omega_k^i |r_i\rangle. \quad (1.46)$$

5. L'opérateur de projection $\hat{L}_k$ dépend de la cardinalité de la classe d'équivalence que l'on regarde au travers du facteur de normalisation et des valeurs de k permises. Les états propres de $\hat{T}$ ainsi engendrés sont normés.

Appliquons l'opérateur de translation à $|\zeta_k\rangle$ et faisons usage des relations (1.42) et de l'identité $\omega_k^d = 1$, on obtient

$$\hat{T}|\zeta_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} (|r_1\rangle + \omega_k|r_2\rangle + \cdots + \omega_k^{d-1}|r_0\rangle) = \omega_k^{-1}|\zeta_k\rangle, \quad (1.47)$$

ce qui prouve que $|\zeta_k\rangle$ est un état propre de $\hat{T}$ avec pour valeur propre $\omega_k^* = \omega_k^{-1}$. On peut donc construire d vecteurs propres d'impulsion $k = \{0, N/d, 2N/d, \dots, N(d-1)/d\}$ pour une classe d'équivalences constituée de d éléments⁶.

En résumé, pour construire les états propres de $\hat{T}$, il faut appliquer l'opérateur $\hat{L}_k$ à tous les représentants des classes d'équivalence en faisant attention à la cardinalité de la classe d'équivalences et aux valeurs permises de k . On peut ainsi construire les 2^N vecteurs :

$$|\varphi_i^{(k)}\rangle = \hat{L}_k|r_0^{(i)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{d_i}} \sum_{l=0}^{d_i-1} \omega_k^l \hat{T}^l |r_0^{(i)}\rangle, \quad i = 0, 1, \dots, a(N) - 1 \quad (1.48)$$

où $|r_0^{(i)}\rangle$ est le représentant de la classe d'équivalence numéro i constituée de d_i éléments. Ce sont les états propres de $\hat{T}$ avec valeur propre ω_k^* .

Construction du Hamiltonien dans la base symétrique Il faut maintenant écrire le Hamiltonien dans la base des états propres de $\hat{T}$. Une approche quelque peu naïve consiste à enregistrer en mémoire la matrice de changement de base $\{|\sigma\rangle\} \rightarrow \{|\varphi_i^{(k)}\rangle\}$ que l'on note B . Le Hamiltonien H' s'exprime dans la nouvelle base $\{|\varphi_i^{(k)}\rangle\}$ en utilisant la matrice de passage B

$$H' = B^{-1}HB. \quad (1.49)$$

La matrice H' est diagonal par bloc. Il suffit ensuite d'effectuer une diagonalisation indépendante des blocs pour obtenir les différents niveaux d'énergies dans un secteur de symétrie donné. Une telle approche est désastreuse du point de vue numérique. En effet, non seulement la matrice de passage B est de taille $2^N \times 2^N$ mais il faut encore l'inverser et calculer le produit (1.49) (ce qui nécessite d'avoir la matrice $\hat{H}$ exprimée dans la base initiale en mémoire). Une telle approche n'est pas très astucieuse.

Nous voulons écrire notre Hamiltonien dans la base des états propres de $\hat{T}$ mais uniquement dans un secteur d'impulsion k donné. Autrement dit, nous voulons écrire uniquement un bloc

$$\langle \varphi_i^{(k)} | \hat{H} | \varphi_j^{(k)} \rangle. \quad (1.50)$$

Par construction, le vecteur propre $|\varphi_i^{(k)}\rangle$ est obtenu à partir d'un représentant d'une classe d'équivalence constituée de d_i éléments, les valeurs de k sont contraintes d'être égales à un multiple de N/d_i . Supposons donc que $k = Nu/d_i$ avec u un entier compris entre 0 et $d_i - 1$. Cherchons maintenant les états engendrés par l'action du Hamiltonien $\hat{H}$ sur un état propre de $\hat{T}$ donné par (1.46). Comme $[\hat{H}, \hat{T}] = 0$, nous pouvons écrire

$$\hat{H}|\varphi_i^{(k)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{d_i}} \sum_{l=0}^{d_i-1} \omega_k^l \hat{T}^l \hat{H}|r_0^{(i)}\rangle. \quad (1.51)$$

L'action du Hamiltonien $\hat{H}$ sur le représentant $|r_0^{(i)}\rangle$ produit une certaine combinaison linéaire d'états qui ne sont pas forcément des représentants et ne font pas forcément partie de la même classe d'équivalence que $|r_0^{(i)}\rangle$

$$\hat{H}|r_0^{(i)}\rangle = \sum_q c_q |q\rangle. \quad (1.52)$$

Par exemple, le Hamiltonien de Ising (1.2) amène N états lorsqu'il est appliqué à une configuration. Isolons la composante $|p\rangle$ de la somme (1.52). Deux cas sont alors à différencier.

1. Le premier cas correspond au cas où la configuration engendrée $|p\rangle$ appartient à une classe d'équivalences avec le même nombre d'éléments que celle de $|r_0^{(i)}\rangle$. En d'autres termes $d_{f(p)} = d_i$ où la fonction $f(p)$

6. Comme il existe $r(d)$ classes d'équivalences à d éléments et que chaque classe apporte d vecteurs propres, on retrouve le bon nombre de vecteurs propres total donné par la formule (1.35). De plus, on montre assez facilement que les vecteurs ainsi créés sont orthogonaux entre eux : nous sommes donc assuré d'avoir ainsi construit tous les états propres de l'opérateur de translation.

renvoie l'indice de la classe d'équivalence à laquelle appartient $|p\rangle$. Appelons $t_p < d_{f(p)}$ le nombre de translations nécessaires pour porter la configuration $|p\rangle$ sur le représentant de sa famille⁷ $|r_0^{f(p)}\rangle$

$$|r_0^{f(p)}\rangle = \hat{T}^{t_p} |p\rangle, \quad (1.53)$$

Il s'ensuit que

$$\begin{aligned} \hat{H}|\varphi_i^{(k)}\rangle &= c_p \hat{T}^{-t_p} \frac{1}{\sqrt{d_i}} \sum_{l=0}^{d_i-1} \omega_k^l \hat{T}^l |r_0^{f(p)}\rangle, \\ &= c_p \hat{T}^{-t_p} |\varphi_{f(p)}^{(k)}\rangle, \\ &= c_p \omega_k^{t_p} |\varphi_{f(p)}^{(k)}\rangle \end{aligned} \quad (1.54)$$

où la dernière égalité découle du fait que $|\varphi_{f(p)}^{(k)}\rangle$ est un état propre de l'opérateur de translation $\hat{T}$ avec valeur propre ω_k^* . L'élément de matrice est donc donné par

$$\langle \varphi_{f(p)}^{(k)} | \hat{H} | \varphi_i^{(k)} \rangle = c_p \omega_k^{t_p}. \quad (1.55)$$

Le facteur $\omega_k^{t_p}$ traduit la « distance » t_p de la configuration $|p\rangle$ au représentant de sa classe d'équivalences.

- La deuxième possibilité est que la configuration engendrée $|p\rangle$ appartienne à une classe d'équivalences de cardinalité différente de celle de $|r_0^{(i)}\rangle$, $d_{f(p)} \neq d_i$. Par définition, il existe un entier u tels que $k = Nu/d_i$. S'il existe un entier v entre 0 et $d_{f(p)} - 1$ tel que $k = Nv/d_{f(p)}$ alors le vecteur propre d'impulsion k est constructible à partir du représentant de la classe à laquelle appartient $|p\rangle$. Dans le cas contraire, la configuration $|p\rangle$ n'apporte pas de contribution dans le secteur k en question. Considérons donc le cas où il est possible de construire un état propre d'impulsion k de l'opérateur $\hat{T}$ à partir du représentant $|r_0^{f(p)}\rangle$ de la classe d'équivalences à laquelle appartient $|p\rangle$ (voir relation (1.53)). Par définition la taille des classes d'équivalences est un diviseur de N , $d_i = N/m_i$ et $d_{f(p)} = N/m_{f(p)}$. Il vient

$$\begin{aligned} \hat{H}|\varphi_i^{(k)}\rangle &= c_p \hat{T}^{-t_p} \frac{1}{\sqrt{d_i}} \sum_{l=0}^{d_i-1} \omega_k^l \hat{T}^l |r_0^{f(p)}\rangle, \\ &= c_p \hat{T}^{-t_p} \sqrt{\frac{d_{f(p)}}{d_i}} \left(\frac{1}{\sqrt{d_{f(p)}}} \sum_{l=0}^{d_{f(p)}-1} \omega_k^l \hat{T}^l |r_0^{f(p)}\rangle + \frac{1}{\sqrt{d_{f(p)}}} \sum_{l=d_{f(p)}}^{\frac{m_{f(p)}}{m_i} d_{f(p)}-1} \omega_k^l \hat{T}^l |r_0^{f(p)}\rangle \right). \end{aligned} \quad (1.56)$$

La première somme de (1.56) correspond à l'état propre $|\varphi_{f(p)}^{(k)}\rangle$ et il est assez facile de montrer que la seconde somme est donnée par $\left(\frac{m_{f(p)}}{m_i} - 1\right) |\varphi_{f(p)}^{(k)}\rangle = \left(\frac{d_i}{d_{f(p)}} - 1\right) |\varphi_{f(p)}^{(k)}\rangle$. Finalement, on obtient que

$$\hat{H}|\varphi_i^{(k)}\rangle = c_p \sqrt{\frac{d_i}{d_{f(p)}}} \hat{T}^{-t_p} |\varphi_{f(p)}^{(k)}\rangle = c_p \sqrt{\frac{d_i}{d_{f(p)}}} \omega_k^{t_p} |\varphi_{f(p)}^{(k)}\rangle. \quad (1.57)$$

L'élément de matrice est alors donné par

$$\langle \varphi_{f(p)}^{(k)} | \hat{H} | \varphi_i^{(k)} \rangle = c_p \sqrt{\frac{d_i}{d_{f(p)}}} \omega_k^{t_p}. \quad (1.58)$$

Notons l'apparition du facteur $\sqrt{\frac{d_i}{d_{f(p)}}}$ lié au fait que les configurations engendrées par l'application du Hamiltonien sur le représentant ne possèdent pas forcément la même période primitive que celle du représentant auquel a été appliqué le Hamiltonien.

7. Deux remarques importantes. Le représentant de la classe d'équivalence à laquelle appartient $|p\rangle$ n'est pas forcément le représentant numéro p . Il n'est pas non plus forcément égal à $|r_0^{(i)}\rangle$.

Récapitulatif En pratique, le programme permettant d'écrire le Hamiltonien dans un secteur d'impulsion k donné marche comme ceci. On fixe tout d'abord le secteur d'impulsion k dans lequel on souhaite travailler. On parcourt ensuite les représentants des classes d'équivalences qui ont été préalablement enregistrés dans un vecteur de taille $a(N)$. Il faut aussi attribuer à chaque représentant un indice qui va permettre de l'identifier. On peut par exemple associer à chaque représentant son numéro de composante dans le vecteur de taille $a(N)$. Comme nous l'avons vu précédemment, il existe une condition de compatibilité permettant de dire si un représentant permet de construire un état propre de l'opérateur de translation d'impulsion k . Cette condition de compatibilité résulte du fait que les classes d'équivalence possèdent des périodes primitives (le nombre d'éléments dans la classe) qui sont des diviseurs de N et sont par conséquent plus petit ou égal à N . Si le représentant choisi appartient à une classe de taille d_i (on rappelle que $d_i|N$), alors la condition de compatibilité avec le secteur d'impulsion k se traduit par l'existence d'un entier u entre 0 et $d_i - 1$ tel que ⁸

$$k = \frac{Nu}{d_i}. \quad (1.59)$$

Le bloc d'impulsion $k = 0$ est toujours le plus grand car tous les représentants sont compatibles avec cette impulsion. Si le représentant d'indice a choisi est compatible avec le secteur en question, on peut lui appliquer le Hamiltonien. Ceci engendre un ensemble de configurations (avec un certain poids donné par (1.52)) qui ne sont pas forcément des représentants de classe d'équivalences. Il n'y a pas non plus de raisons pour que ces configurations appartiennent à la même classe d'équivalences que le représentant auquel nous avons appliqué le Hamiltonien. Il est donc nécessaire de trouver à quelles classes d'équivalence appartiennent les configurations engendrées ainsi que le nombre de translations nécessaires pour les porter sur leurs représentants. Ceci peut être fait au préalable en créant un tableau *Class_Dictionary* de taille $2^N \times 4$ contenant en première colonne l'ensemble des configurations possibles de la chaîne de spins $|i\rangle$, en deuxième colonne la taille de la classe d'équivalences à laquelle appartient $|i\rangle$, en troisième colonne le nombre d'éléments dans la classe de $|i\rangle$ et en quatrième colonne l'indice de la famille de la configuration $|i\rangle$. Nous avons maintenant tous les ingrédients nécessaires pour construire le Hamiltonien dans le secteur k . Si la configuration engendrée est compatible avec le secteur en question et appartient à la famille b , il suffit alors de lire le tableau *Class_Dictionary* et appliquer la formule (1.58). On obtient ainsi une contribution à l'élément de matrice H_{ba} . On passe ensuite à un autre représentant compatible avec le secteur k et ainsi de suite jusqu'à épuisement des représentants.

Une fois que le bloc de symétrie est construit, il suffit juste de le diagonaliser en utilisant les routines de la bibliothèque LAPACK par exemple, pour obtenir les énergies et vecteurs propres dans le secteur en question. Comme nous le verrons au Chapitre 3, la séparation dans les différents secteurs de symétries est importante pour l'analyse des propriétés spectrales.

1.6 Méthodes itératives

Bien que l'implémentation numérique des symétries permet d'améliorer le temps de calcul des valeurs et vecteurs propres, l'obtention du spectre du Hamiltonien devient vite inabordable pour des chaînes de spins $S = 1/2$ avec $N > 20$. La situation est pire pour des valeurs de spins S supérieures. La plupart du temps les physiciens ne s'intéressent pas au spectre total mais aux états de plus basse énergie. Il existe dans ce cas des méthodes itératives qui permettent d'avoir accès à l'état fondamental et quelques états excités pour des tailles de chaînes de spins bien plus grandes (typiquement nous pouvons gagner un facteur deux). Dans ce qui suit, nous présentons la méthode de Lanczos basée sur l'utilisation astucieuse des états de l'espace de Krylov engendrés par application successive du Hamiltonien sur un état aléatoire. L'origine de la méthode de Lanczos se trouve dans la méthode des puissances que nous allons détailler en premier. Cette dernière technique permet de trouver la valeur propre de plus grande amplitude d'une matrice en appliquant le Hamiltonien de façon répétée à un vecteur aléatoire. On peut alors montrer que le vecteur engendré à chaque itération converge vers l'état fondamental (ou l'état le plus excité) du Hamiltonien. Plus le nombre d'itérations k est grand, meilleur est l'approximation. La méthode de Lanczos consiste quant à elle à construire une certaine base d'états à partir des états engendrés par l'application successive du Hamiltonien sur un état aléatoire. Dans cette nouvelle base, le Hamiltonien prend une forme tridiagonale relativement simple à diagonaliser. L'intérêt réside dans le fait que la taille de ce sous espace est égal au nombre d'itérations k et est beaucoup plus petit que la taille de l'espace de Hilbert total. De plus, au lieu de donner uniquement une approximation de l'état fondamental, cette technique permet d'avoir accès aux premiers états excités avec une bonne précision.

8. Ceci est facile à vérifier numériquement. Il suffit de regarder si $k \equiv 0 \pmod{N/d_i}$.

1.6.1 Méthode des puissances

Soit $\{E_0, E_1, \dots, E_{M-1}\}$ les valeurs propres d'une matrice $\hat{H}$ de taille $M \times M$. E_0 est appelée valeur propre dominante de la matrice $\hat{H}$ si

$$|E_0| > |E_i|, \quad i = 1, 2, \dots, M-1. \quad (1.60)$$

Le vecteur propre associé à la valeur propre E_0 est appelé vecteur propre dominant. Toute matrice ne possède pas forcément une valeur propre dominante. La matrice

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ne possède pas de valeur propre dominante par exemple. Considérons une matrice $\hat{H}$ possédant une valeur propre dominante. Soit $|u_0\rangle$ un vecteur aléatoire non-nul de l'espace de Hilbert. Construisons la séquence

$$\begin{aligned} |u_1\rangle &= \hat{H}|u_0\rangle, \\ |u_2\rangle &= \hat{H}|u_1\rangle = \hat{H}^2|u_0\rangle, \\ &\vdots \\ |u_k\rangle &= \hat{H}|u_{k-1}\rangle = \dots = \hat{H}^k|u_0\rangle. \end{aligned}$$

Nous allons montrer que pour les valeurs de $k \gg 1$, cette séquence tend vers un vecteur dominant de la matrice $\hat{H}$ à un facteur de normalisation près. Décomposons le vecteur $|u_0\rangle$ sur la base des états propres $\{|\Psi_n\rangle\}_{n=0, \dots, M-1}$ de $\hat{H}$ de valeurs propres $\{E_n\}_{n=0, \dots, M-1}$

$$|u_0\rangle = \sum_{n=0}^{M-1} c_n |\Psi_n\rangle. \quad (1.61)$$

En appliquant k fois le Hamiltonien à cette combinaison nous trouvons

$$\begin{aligned} \hat{H}^k |u_0\rangle &= \sum_{n=0}^{M-1} c_n E_n^k |\Psi_n\rangle, \\ &= E_0^k \left(c_0 |\Psi_0\rangle + \sum_{n=1}^{M-1} c_n \left(\frac{E_n}{E_0} \right)^k |\Psi_n\rangle \right). \end{aligned} \quad (1.62)$$

Par hypothèse, E_0 est une valeur propre dominante. Il s'ensuit que les facteurs $\left(\frac{E_n}{E_0} \right)^k$ tendent vers 0 lorsque $k \gg 1$. Le vecteur

$$|u_k\rangle = \hat{H}^k |u_0\rangle \simeq c_0 E_0^k |\Psi_0\rangle, \quad c_0 \neq 0 \quad (1.63)$$

tend vers un multiple du vecteur dominant $|\Psi_0\rangle$. Une approximation de la valeur propre et du vecteur propre dominant sont données par

$$E_0 = \sqrt{\frac{\langle u_{k+1} | u_{k+1} \rangle}{\langle u_k | u_k \rangle}}, \quad |\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle u_k | u_k \rangle}} |u_k\rangle. \quad (1.64)$$

L'application successive du Hamiltonien sur un état aléatoire projette donc celui-ci sur un état approximant l'état fondamental. Dans la limite $k \rightarrow \infty$, on retrouve exactement l'état fondamental $|\Psi_0\rangle$. Pour être sûr d'obtenir le fondamental et non pas l'état le plus excité, on peut appliquer $(\hat{H} - a)^k$ au lieu de $\hat{H}^k$, avec a un entier positif assurant que $|E_0 - a| > |E_{M-1} - a|$.

1.6.2 Méthode de Lanczos

La méthode des puissances nous assure de trouver l'état fondamental lorsque le nombre d'itération $k \rightarrow \infty$. Cependant, on peut montrer que le sous-ensemble des états de l'espace de Hilbert générés par l'application successive du Hamiltonien $\{H^m |u_0\rangle\}$, $m = 0, 1, \dots, k-1$ permet d'obtenir de meilleures approximations, non seulement de l'état fondamental mais aussi des premiers états excités [Lan52, Dag94]. Le sous-espace ainsi

construit est de taille k et est appelé espace de Krylov. Le bas du spectre s'obtient en diagonalisant le Hamiltonien dans une base construite à partir des états de l'espace de Krylov. Le grand intérêt de la technique de Lanczos réside dans le fait que la taille de ce sous-espace peut généralement être choisie des ordres de grandeurs plus petite que la taille de l'espace de Hilbert. En pratique, $k \simeq 100$ itérations sont nécessaires pour obtenir les premiers états excités avec une bonne précision. La convergence vers le fondamental est exponentielle avec le nombre d'itérations k [CW02]. La matrice représentant le Hamiltonien dans l'espace de Hilbert total est une matrice extrêmement creuse : chaque ligne et colonne contient $K \sim N \ll M = 2^N$ éléments non-nuls. Il s'ensuit que l'espace de Krylov peut être construit assez rapidement pour ce genre de matrice.

La base de Lanczos

L'algorithme de Lanczos consiste à créer une base orthogonale $\{|f_n\rangle\}$ en utilisant une combinaison linéaire des états de la base de Krylov $\{|u_0\rangle, \hat{H}|u_0\rangle, \dots, \hat{H}^k|u_0\rangle\}$ de telle sorte que le Hamiltonien prend une forme tridiagonale dans cette base. L'algorithme de génération de la base est initialisé avec un vecteur normé $|f_0\rangle$ de l'espace de Hilbert du modèle étudié. Généralement, ce vecteur est choisi aléatoirement afin de ne pas être orthogonal à l'état fondamental de $\hat{H}$. Si certaines symétries de l'état fondamental sont connues, il est alors préférable de choisir $|f_0\rangle$ dans le sous-espace possédant les nombres quantiques associés à ces symétries. On crée ensuite un nouveau vecteur

$$|f_1\rangle = \hat{H}|f_0\rangle - a_0|f_0\rangle \quad (1.65)$$

où a_0 va être choisi de manière à ce que $|f_1\rangle$ soit orthogonal à $|f_0\rangle$. En calculant la projection sur $|f_0\rangle$ on a

$$\langle f_0|f_1\rangle = \langle f_0|\hat{H}|f_0\rangle - a_0\langle f_0|f_0\rangle = H_{00} - a_0L_0, \quad (1.66)$$

où nous avons introduit la notation

$$L_i = \langle f_i|f_i\rangle, \quad H_{ii} = \langle f_i|\hat{H}|f_i\rangle. \quad (1.67)$$

Le recouvrement entre $|f_0\rangle$ et $|f_1\rangle$ est nul si $a_0 = H_{00}/L_0$. Faisons la même chose pour $n = 2$ et construisons l'état

$$|f_2\rangle = \hat{H}|f_1\rangle - a_1|f_1\rangle - b_0|f_0\rangle, \quad (1.68)$$

où a_1 et b_0 vont être choisis de telle sorte que $|f_2\rangle$ soit orthogonal aux deux vecteurs précédents $|f_0\rangle$ et $|f_1\rangle$. On trouve que $a_1 = H_{11}/L_1$ et $b_0 = L_1/L_0$ permettent de satisfaire cette condition. À l'étape n , on a

$$|f_{n+1}\rangle = \hat{H}|f_n\rangle - a_n|f_n\rangle - b_{n-1}|f_{n-1}\rangle, \quad (1.69)$$

où les coefficients qui rendent cet état orthogonal à $|f_n\rangle$ et $|f_{n-1}\rangle$ sont donnés par

$$a_n = \frac{H_{nn}}{L_n} = \frac{\langle f_n|\hat{H}|f_n\rangle}{\langle f_n|f_n\rangle}, \quad b_{n-1} = \frac{L_n}{L_{n-1}} = \frac{\langle f_n|f_n\rangle}{\langle f_{n-1}|f_{n-1}\rangle}, \quad n = 0, 1, \dots, k-1 \quad (1.70)$$

avec la condition initiale $b_{-1} = 0$. Par construction, l'état $|f_{n+1}\rangle$ est aussi orthogonal à tous les états $|f_p\rangle$ avec $p < n+1$. La récurrence (1.69) s'arrête lorsque $n = k$ où k est choisi arbitrairement selon un critère de convergence sur une quantité mesurée comme l'énergie du fondamental par exemple. Généralement, il suffit de prendre $k \simeq 100$ pour obtenir l'énergie fondamentale à la précision de la machine.

Forme tridiagonale du Hamiltonien dans la base de Lanczos

Une fois que la base $\{|f_n\rangle\}$ avec $n = 0, 1, \dots, k$ a été construite, nous pouvons exprimer le Hamiltonien dans cette nouvelle base. En utilisant l'équation de récurrence (1.69), on trouve que

$$\hat{H}|f_n\rangle = |f_{n+1}\rangle + a_n|f_n\rangle + b_{n-1}|f_{n-1}\rangle. \quad (1.71)$$

Par conséquent, les seuls éléments non-nuls du Hamiltonien sont

$$\begin{aligned} \langle f_n|\hat{H}|f_n\rangle &= a_n\langle f_n|f_n\rangle = a_nL_n, \\ \langle f_{n-1}|\hat{H}|f_n\rangle &= b_{n-1}L_{n-1} = L_n, \\ \langle f_{n+1}|\hat{H}|f_n\rangle &= L_{n+1}. \end{aligned}$$

Les vecteurs $\{|f_n\rangle\}$ ne sont pas normés⁹. Définissons les vecteurs normés

$$|\phi_n\rangle = \frac{|f_n\rangle}{\sqrt{\langle f_n|f_n\rangle}} = \frac{|f_n\rangle}{\sqrt{L_n}}, \quad n = 0, 1, \dots, k-1. \quad (1.72)$$

Les éléments non-nuls du Hamiltonien s'écrivent donc

$$\langle \phi_n | \hat{H} | \phi_n \rangle = a_n, \quad (1.73)$$

$$\langle \phi_{n-1} | \hat{H} | \phi_n \rangle = \sqrt{b_{n-1}}, \quad (1.74)$$

$$\langle \phi_{n+1} | \hat{H} | \phi_n \rangle = \sqrt{b_n}. \quad (1.75)$$

La matrice représentant le Hamiltonien après k itérations prend donc une forme tridiagonale dans la base $\{|\phi_n\rangle\}_{0 \leq n < k-1}$

$$T_k = \begin{pmatrix} a_0 & \sqrt{b_0} & 0 & \cdots & 0 \\ \sqrt{b_0} & a_1 & \sqrt{b_1} & \ddots & \vdots \\ 0 & \sqrt{b_1} & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{k-2} & \sqrt{b_{k-2}} \\ 0 & \cdots & 0 & \sqrt{b_{k-2}} & a_{k-1} \end{pmatrix}.$$

Une fois sous cette forme, la matrice peut être diagonalisée facilement avec des algorithmes spécialisés plus efficaces que les algorithmes génériques de diagonalisation. Ces algorithmes sont disponibles dans la plupart des bibliothèques d'algèbre linéaire¹⁰. Si la matrice $\hat{H}$ est creuse, il suffit de garder en mémoire les éléments non-nuls et la matrice tridiagonale T_k peut alors être construite très rapidement. La forme tridiagonale de T_k est aussi très pratique pour le calcul des fonctions spectrales telles que les corrélations dynamiques, où la relation de récurrence à trois termes (1.69) permet d'écrire les résultats sous forme de fractions continues [Rou07],[Dag94]. La diagonalisation de T_k permet d'avoir accès aux valeurs propres du bas du spectre du Hamiltonien $\hat{H}$. Les vecteurs propres peuvent aussi être obtenus durant la diagonalisation mais ils seront exprimés dans la base $\{|\phi_n\rangle\}_{0 \leq n < k-1}$.

Perte d'orthogonalité

En raison des erreurs d'arrondis numériques, les vecteurs $|\phi_n\rangle$ peuvent perdre leur orthogonalité lorsque le nombre d'itérations k devient grand. Ces erreurs numériques peuvent entraîner l'apparition de dégénérescences non-physiques dans le spectre de basse énergie. Cela ne pose pas de problèmes lorsqu'on s'intéresse uniquement au fondamental mais peut compliquer le calcul des premiers états excités. Afin de remédier à ce problème, il faut ajouter une étape de réorthogonalisation dans la construction de la base de Lanczos : les vecteurs créés sont systématiquement réorthogonalisés toutes les $p < k$ itérations.

1.7 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les différentes méthodes numériques utilisées au cours de cette thèse et qui seront illustrées par les différents modèles et questions abordés dans les chapitres qui suivent. Pour les chaînes de spins $S = 1/2$, le codage binaire des états permet de représenter facilement les états de l'espace de Hilbert. L'action du Hamiltonien sur un état est alors équivalent à une certaine opération sur les bits. La diagonalisation exacte, comme son nom l'indique, consiste à écrire le Hamiltonien dans une certaine base puis à le diagonaliser. C'est une méthode extrêmement puissante qui permet d'avoir accès à l'ensemble du spectre du modèle étudié et de mesurer presque n'importe quelle observable. Nous l'utiliserons intensivement au Chapitre 2 dans un premier temps pour l'étude des densités spectrales des modèles de chaînes de spins, puis au Chapitre

9. On peut rencontrer des problèmes numériques si on ne travaille pas directement avec des vecteurs normalisés en raison du fait que les constantes de normalisation L_n peuvent devenir très grandes. Ceci est le cas si le Hamiltonien possède des valeurs propres de grandes amplitudes. En pratique, il est donc préférable de travailler directement avec les vecteurs normalisés $|\phi_n\rangle$. La normalisation s'effectue à chaque itération de la récurrence (1.69) en évaluant le produit scalaire de l'état engendré avec lui-même.

10. La librairie LAPACK propose la routine *dsteu* qui prend en argument les éléments non-nul d'une matrice tridiagonale symétrique et renvoi ces valeurs propres et éventuellement ces vecteurs propres si on le souhaite.

3, lors de l'étude des propriétés spectrales du modèle d'Ising en champs transverse et longitudinal. La croissance exponentielle de la taille de l'espace de Hilbert avec le nombre de spins est l'une des seules limitations de la diagonalisation exacte. Ceci nous a conduit à la question des symétries et à l'implémentation numérique de celles-ci. Les symétries permettent de réduire la taille de l'espace de Hilbert et donnent une information physique supplémentaire. En particulier, nous nous sommes attardé sur la symétrie de translation et avons détaillé les étapes nécessaires à l'implémentation d'un code de diagonalisation exacte la prenant en compte. Bien que l'implémentation numérique des symétries améliore le problème et repousse un peu plus loin la limitation imposée par la taille du système, il est parfois difficile de conclure sur la nature du système dans la limite thermodynamique. Ceci nous a alors amené à envisager l'étude de techniques numériques itératives. En particulier, nous avons discuté la méthode de Lanczos qui est basée sur la méthode des puissances et qui permet d'avoir accès au spectre de basse (ou haute) énergie du système. Cette technique nous sera très utile lors de l'étude des propriétés multifractales de l'état fondamental des chaînes de spins au Chapitre 4. Nous renvoyons le lecteur intéressé à l'excellente revue par Sandvik [San11] pour les détails concernant l'implémentation numérique de l'algorithme de Lanczos.

En récapitulatif, nous pouvons dire que l'approche numérique d'un système de spins se décompose en trois branches principales

1. une méthode de représentation de l'espace de Hilbert et des états propres d'un certain opérateur de symétrie.
2. la connaissance de la manière dont agit un opérateur, en particulier le Hamiltonien, sur un état de l'espace de Hilbert.
3. une implémentation des algorithmes utilisant les structures précédentes : algorithme de Lanczos,...

APPROXIMATIONS GAUSSIENNES ET MULTI-GAUSSIENNES POUR LA DENSITÉ SPECTRALE DU MODÈLE D'ISING

En science, la phrase la plus excitante que l'on peut entendre, celle qui annonce des nouvelles découvertes, ce n'est pas "Eureka" mais c'est "drôle".

Isaac Asimov

Sommaire

2.1	Introduction	30
2.1.1	Physique nucléaire	30
2.1.2	Chaos quantique	32
2.1.3	Théorie des nombres	34
2.1.4	Loi du semi-cercle de Wigner	36
2.1.5	Théorème de la limite centrale et loi gaussienne	37
2.1.6	Plan du chapitre	38
2.2	De Ising classique 2D vers Ising quantique 1D	39
2.3	Le modèle d'Ising quantique unidimensionnel	40
2.3.1	Diagonalisation exacte du modèle quantique	41
2.3.2	Construction des états d'énergies de la chaîne de spins	44
2.3.3	Retour sur le comportement critique	45
2.4	Densité d'états du modèle d'Ising	47
2.4.1	Densité spectrale asymptotique et méthode du col	48
	Approximation gaussienne dans le "bulk" pour $\beta_0 \ll 1$	49
	Comportement de la densité près de l'état fondamental	49
	Comportement au point critique $\lambda = 1$	49
	Retour sur l'approximation gaussienne	50
	Résultats numériques	52
2.4.2	Un résultat de Keating <i>et al.</i> sur les chaînes de spins aléatoires	52
2.5	Apparition de pics dans la densité d'états et échec de l'approximation gaussienne	53
2.5.1	Cas où $\lambda \rightarrow 0$	53
	Analogie avec les marches aléatoires	54
2.5.2	Limite $\lambda \rightarrow \infty$	54
2.5.3	Origine des pics	54
2.6	Approximations multi-gaussiennes	55
2.6.1	Méthode de la fonction génératrice	55
2.6.2	Domaine de visibilité des pics	57

2.6.3	Récapitulatif	58
2.7	Modèle d'Ising non intégrable	58
2.7.1	Limite de champs forts	60
2.7.2	Limite où α est fixe et $\lambda \rightarrow 0$	61
	Équations diophantiennes et taille des sous-espaces dégénérés	61
2.8	Conclusion et perspectives	62

2.1 Introduction

La densité spectrale constitue l'une des caractéristiques les plus simples et les plus fondamentales des systèmes quantiques. C'est une quantité naturelle liée aux propriétés statistiques des niveaux d'énergies. Le nombre de niveaux d'énergies contenus dans un petit intervalle d'énergie dE autour de l'énergie E est donné par $\rho(E)dE$ où $\rho(E)$ est la densité de niveaux d'énergies. Les densités d'états dépendent évidemment du système étudié. Le nombre d'états d'énergies compris dans un intervalle Δ est donné par

$$N_\Delta = \int_\Delta \rho(E) dE. \quad (2.1)$$

Par définition, la densité d'états pour un ensemble discret d'énergies propres $\{E_n\}_{0 \leq n < M}$ s'exprime comme

$$\rho(E) = \frac{1}{M} \sum_{n=0}^{M-1} \delta(E - E_n). \quad (2.2)$$

Nous détaillerons plus loin les techniques générales permettant de calculer cette quantité pour différents modèles de chaînes de spins. Avant cela, nous commencerons par quelques exemples de modèles connus pour lesquels la densité d'états a été explicitement calculée. Cette partie introductive nous donnera un éventail des différentes techniques existantes pour évaluer les densités d'états.

2.1.1 Physique nucléaire

La détermination de la densité d'états des noyaux lourds en physique nucléaire est un problème ancien. Bethe a apporté une contribution importante en physique nucléaire dans l'étude des propriétés des niveaux excités des noyaux atomiques [Bet36]. L'un des premiers modèles pour la description de la densité d'états est le modèle du gaz de Fermi. Dans la limite où l'énergie d'excitation du gaz est plus petite que l'énergie de Fermi ϵ_F , Bethe a montré que le spectre d'excitation consiste à remplir des niveaux d'énergie à une particule. En particulier, pour un système de A fermions sans interactions, le nombre de niveaux excités contenus dans une petite fenêtre d'énergie dQ autour de Q , $\rho(Q, A)dQ$ est donné par

$$\rho(Q, A) = \frac{1}{\sqrt{48Q}} \exp\left(2\sqrt{aQ}\right), \quad a = \frac{\pi^2}{6} \bar{\rho}, \quad (2.3)$$

où $\bar{\rho}$ est la densité individuelle moyenne¹ et Q est mesurée par rapport à l'énergie du fondamental. La densité moyenne $\bar{\rho}$ dépend évidemment de A et du potentiel dans lequel baignent les fermions. La formule de Bethe est vraie uniquement pour des énergies d'excitation Q très grande devant l'espacement moyen entre niveaux d'énergies individuelles $\delta = \bar{\rho}^{-1}$. Le paramètre a est appelé paramètre de densité de niveau et se comporte linéairement avec le nombre de nucléons A (voir Figure 2.1). La pente de la droite prédite par le modèle du gaz de Fermi vaut $\frac{3}{2\epsilon_F} \approx \frac{1}{15} \text{ MeV}^{-1}$ alors que les expériences de résonances neutroniques prévoient une pente de $1/8 \text{ MeV}^{-1}$. Le désaccord observé avec l'expérience vient principalement du fait que le modèle du gaz de Fermi est un modèle qui ne prend pas en compte les interactions entre nucléons. Le modèle peut être amélioré en prenant en compte les effets d'appariement entre nucléons [DGM⁺68], de vibration et de rotation du noyau atomique [BM98].

Considérons le modèle le plus simple possible des états individuels équidistants dont les énergies sont données par $\epsilon_n = n\delta$ avec n entier et δ la distance entre deux niveaux d'énergies. Le modèle de gaz de Fermi pour A

1. L'énergie de Fermi est donnée par $\epsilon_F = \left(\frac{9\pi}{8}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}$ avec m et r_0 les masse et rayon du nucléon au repos. La densité moyenne d'états à une particule s'écrit $\bar{\rho} = \frac{3A}{2\epsilon_F}$ dans le modèle du gaz de Fermi.

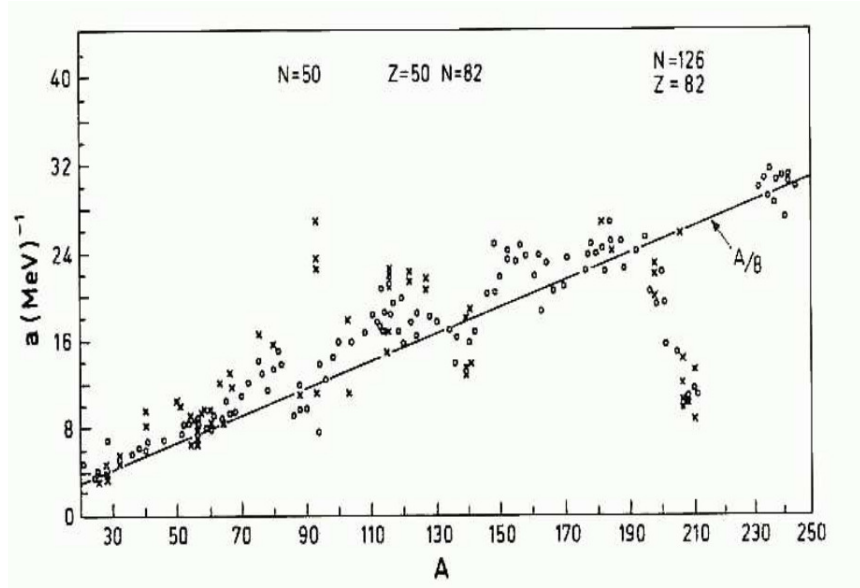


FIGURE 2.1 – Évolution du paramètre de densité de niveau a du modèle du gaz de Fermi en fonction du nombre de nucléon A obtenue par résonance de neutrons (figure tirée de [BM98]).

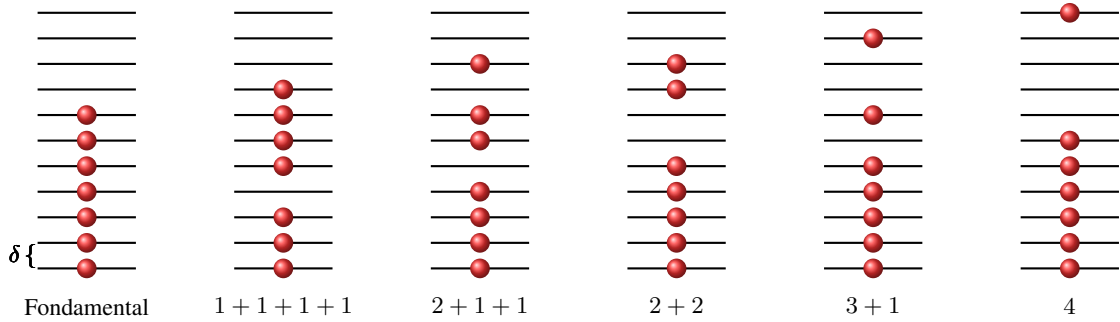


FIGURE 2.2 – Spectre d'excitation d'un gaz de fermions sans interaction. Les niveaux individuels sont séparés d'une énergie δ . L'état fondamental correspond au remplissage des $A = 7$ niveaux les plus bas (à gauche). Les 5 états excités représentés possèdent la même énergie $Q/\delta = 4$ et correspondent au nombre de décomposition de l'entier 4 en somme d'entiers positifs.

fermions sans interaction consiste à remplir les états individuels avec des taux d'occupation 0 ou 1. L'état fondamental est obtenu en remplissant les A premiers niveaux les plus bas. Les états excités s'obtiennent quant à eux par occupation des états individuels d'énergies supérieures à l'énergie de Fermi créant ainsi des trous dans la mer de Fermi. Il n'est pas très difficile de voir que l'énergie de tels états excités, mesurés par rapport à l'énergie de l'état fondamental, sont simplement donnés par $Q = m\delta$ où m est un entier positif. Le nombre de configurations qui donnent une énergie d'excitation $Q = m\delta$ est égal au nombre de partitions $p(m)$ de l'entier m , c'est-à-dire le nombre de manières d'écrire l'entier m comme une somme d'entiers positifs. Dans la figure 2.2, nous illustrons en suivant [LR06], l'équivalence entre le calcul du nombre de configurations donnant la même énergie $Q = m\delta$ et le nombre de partition $p(m)$ de l'entier m dans le cas $m = 4$. Il existe 5 manières d'écrire l'entier 4 comme une somme d'entiers positifs : $1 + 1 + 1 + 1$, $2 + 1 + 1$, $2 + 2$, $3 + 1$ et 4 . Il s'ensuit que $p(4) = 5$. Chacune de ces décompositions est en bijection directe avec une configuration excitée d'énergie $Q = 4\delta$ du gaz de Fermi comme indiquée sur la figure 2.2. Le fondamental est indiqué à gauche sur cette figure. La deuxième figure à partir de la gauche correspond à la partition $1 + 1 + 1 + 1$ qui a consisté à monter les quatre fermions dans les états les plus hauts d'un niveau. La troisième figure a été obtenue en faisant grimper le fermion de plus haut de deux niveaux et les deux qui le précédaient d'un niveau. Et ainsi de suite pour les autres partitions. Il

vient que la densité d'états de fermions dans un spectre d'oscillateur harmonique est donnée par

$$\rho^{\text{OH}}(Q) = \sum_{m=1}^{\infty} p(m) \delta(Q - m\delta) \quad (2.4)$$

où $p(m)$ est le nombre de partition de l'entier m . La fonction génératrice des $p(m)$ a été trouvée par Euler en 1753 et vaut

$$1 + \sum_{m=1}^{\infty} p(m)x^m = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(1-x^n)}. \quad (2.5)$$

Le comportement asymptotique de $p(m)$ a été obtenu par Hardy et Ramanujan en 1918 [HR18] et une preuve rigoureuse a été apportée plus tard par Rademacher [Rad38]. En utilisant la méthode du col que nous détaillerons plus loin dans le cas des chaînes de spins, les premiers termes du développement de la densité en fonction de la variable $z = \bar{\rho}Q = Q/\delta$ s'écrivent

$$\log(\rho^{\text{OH}}/\bar{\rho}) = \sqrt{\frac{2}{3}}\pi^2 z - \log(\sqrt{48}z) - \frac{\pi^2 + 72}{24\sqrt{6}\pi} z^{-1/2} - \left(\frac{3}{4\pi^2} - \frac{1}{24}\right) z^{-1} + O(z^{-3/2}). \quad (2.6)$$

Les deux premiers termes de ce développement redonnent la formule de Bethe (2.3). Bien qu'elle donne des résultats quantitatifs, l'hypothèse d'un spectre d'oscillateur harmonique pour des systèmes réels n'est pas vraie de manière générale. La formule de Bethe ne prend pas en compte, par exemple, les fluctuations qui peuvent exister dans le spectre d'excitation comme on peut le voir sur la figure 2.1. La description des fluctuations spectrales se fait à travers la théorie des orbites périodiques et la formule de trace de Gutzwiller [LR06, LMR05]. De manière générale, il a été montré que les fluctuations de l'espacement des énergies δ sont universelles pour une grande classe de systèmes [Meh04]. En particulier, il existe deux conjectures reliées à la nature des propriétés statistiques des espacements de niveaux selon que le système étudié est intégrable ou chaotique. La conjecture de Berry-Tabor stipule que les énergies propres des systèmes quantiques dont la version classique est intégrable sont distribuées comme des variables aléatoires non-corrélées [BT77b]. La deuxième conjecture concerne les propriétés spectrales des systèmes quantiques dont la contre-partie classique est chaotique. Les propriétés statistiques des niveaux d'énergies de ces systèmes sont décrits par les ensembles de matrices aléatoires selon la conjecture de Bohigas-Giannoni-Schmit [BGS84] (BGS en abrégé). Nous y reviendrons plus en détail lors de l'étude des propriétés spectrales des chaînes de spins quantiques au Chapitre 3.

2.1.2 Chaos quantique

Le chaos quantique désigne l'étude quantique des systèmes dont le comportement classique est chaotique. Un système classique est dit chaotique si deux trajectoires infiniment proches l'une de l'autre au temps $t = 0$ divergent au temps long. La propension qu'ont des trajectoires avec conditions initiales voisines à diverger est caractérisée par l'exposant de Lyapunov λ défini par

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \lim_{\|\delta q_0\| \rightarrow 0} \ln \frac{\|\delta q_t\|}{\|\delta q_0\|} \quad (2.7)$$

où $\|\delta q_0\|$ est la distance initiale entre les deux trajectoires. En mécanique quantique, il n'est pas possible de définir exactement la position d'une particule, et encore moins sa trajectoire², en raison du principe d'incertitude de Heisenberg. Le terme de chaos quantique est utilisé pour décrire les systèmes quantiques dont la contrepartie classique présente un comportement chaotique. Le régime, appelé semiclassique, dans lequel les théories classique et quantique se recouvrent, correspond à des systèmes dont les actions mises en jeu sont beaucoup plus grandes que la constante de Planck $\hbar$. Une approche statistique peut être utilisée pour décrire le comportement des systèmes quantiques chaotiques comme nous le verrons au Chapitre 3. Une autre approche développée par Kramers, Brillouin et Wentzel porte le nom de méthode WKB [Bri26, Kra26, Wen26]. De la même manière que l'on obtient l'optique géométrique à partir de l'optique ondulatoire pour les petites longueurs d'onde, la méthode WKB permet d'obtenir la mécanique classique ($\hbar \rightarrow 0$) comme approximation de la mécanique quantique pour les longueurs d'onde de De Broglie petites devant l'échelle caractéristique du problème. En écrivant la fonction d'onde sous la forme

$$\psi(x, t) = A(x, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x, t)\right) \quad (2.8)$$

2. La formulation de Feynman permet de renouer avec la notion de trajectoire et, comme nous le verrons plus loin celle-ci sera très utile dans l'approche semi-classique et mènera entre autres à la formule de trace de Gutzwiller.

avec $A(x, t)$ et $S(x, t)$ des fonctions lisses lentement variables, on peut montrer que S vérifie l'équation de Hamilton-Jacobi du problème classique associé lorsque $\hbar \rightarrow 0$. La fonction d'onde ψ décrit un fluide de particules classiques indépendantes dont la densité de particules en chaque point de l'espace est liée à la densité de probabilité de la particule quantique associée.

La détermination du spectre d'un opérateur différentiel est un problème qui apparaît dans plusieurs domaines de la physique [BH76]. Une quantité importante qui permet de caractériser ces spectres est donnée par la densité d'états (2.2). De manière générale, à l'ordre le plus élevé dans le développement semiclassique, la partie lisse de la densité d'états $\bar{\rho}(E)$ s'obtient en divisant le volume dans l'espace des phases de la couche d'énergie E par le volume minimal occupé par un quanta d'action autorisé par les relations d'Heisenberg. Cette approximation est aussi connu sous le nom d'approximation de Thomas-Fermi. Pour un système classique à D degrés de liberté décrit par un Hamiltonien $H(p, q)$, on a

$$\bar{\rho}(E) \simeq \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int \delta(H(p, q) - E) dp dq. \quad (2.9)$$

La même approximation s'écrit

$$\bar{N}(E) \simeq \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int \Theta(H(p, q) - E) dp dq \quad (2.10)$$

pour la densité intégrée lissée. Supposons que le Hamiltonien soit de la forme $H(p, q) = p^2/2m + V(q)$. On obtient après intégration sur p

$$\bar{N}(E) \simeq \frac{1}{\Gamma(D/2 + 1)} \left(\frac{m}{2\pi\hbar} \right)^{D/2} \int_{V(q) < E} (E - V(q))^{D/2} dq. \quad (2.11)$$

Le spectre du Laplacien dans un domaine compact a été étudié par Weyl. Le système quantique associé à l'opérateur Laplacien dans un domaine compact correspond à une particule libre se déplaçant dans ce domaine et rebondissant sur les rebords du domaine. Ces systèmes portent le nom de billards quantiques à $D = 2$ dimensions et ont été largement étudiés [BH76]. Le potentiel $V(q)$ auquel est soumis la particule est nul à l'intérieur du domaine et infini à l'extérieur (la particule ne peut s'échapper du billard). On obtient dans ce cas

$$\bar{N}(E) \simeq \frac{\mathcal{V}}{\Gamma(D/2 + 1)} \left(\frac{m}{2\pi\hbar} \right)^{D/2} E^{D/2} \quad (2.12)$$

qui est le premier terme du développement de Weyl de $\bar{N}(E)$. $\mathcal{V}$ est le volume du domaine dans lequel se déplace la particule. À $D = 2$ dimensions, ce terme donne (on a posé $\hbar = 1$ et $m = 1/2$)

$$\bar{N}(E) \simeq \frac{\mathcal{A}}{4\pi} E, \quad (2.13)$$

où $\mathcal{A}$ est l'aire du billard bidimensionnel. Les ordres suivants du développement asymptotique semiclassique de $\bar{N}(E)$ dépendent essentiellement de la forme du billard bidimensionnel (longueur du périmètre, frontière, ...). En dérivant la densité intégrée, on obtient

$$\bar{\rho}(E) = \frac{\mathcal{A}}{4\pi}. \quad (2.14)$$

Afin de prendre en compte les fluctuations $\rho^{osc}(E) = \rho(E) - \bar{\rho}(E)$, une connaissance des trajectoires classiques à l'intérieur du billard est nécessaire. Or, le comportement de la dynamique classique d'un système dépend avant tout du nombre de constantes du mouvement impliquées. Dans le cas intégrable, il existe autant d'intégrales du mouvement que de degrés de liberté dans le système et les trajectoires se répartissent sur des tores invariants [Bos86]. On sait depuis Poincaré que ces structures régulières sont généralement absentes, en particulier pour les modèles chaotiques [Poi81]. On comprend alors pourquoi la nature intégrable ou chaotique de la dynamique classique associée au problème quantique initial joue un rôle prépondérant dans le calcul des fluctuations de $\rho^{osc}(E)$.

Afin d'illustrer comment la notion de trajectoire classique intervient dans le calcul d'une quantité quantique, on se propose de faire le calcul de la densité $\rho(E)$ pour un billard rectangulaire de longueur a et largeur b . L'équation de Schrödinger pour une particule libre s'écrit

$$(\Delta + E)\Psi(x, y) = 0, \quad 0 \leq x \leq a, \quad 0 \leq y \leq b, \quad (2.15)$$

avec Δ le Laplacien en coordonnées cartésiennes 2D. On peut montrer que pour des conditions aux bords périodiques, le spectre de cet opérateur différentiel est indexé par deux entiers et est donné par

$$E_{n,m} = \left(\frac{2n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{2m\pi}{b}\right)^2. \quad (2.16)$$

Par définition, nous avons

$$\rho(E) = \sum_{n_1, n_2 \in \mathbb{Z}} \delta(E - E_{n_1, n_2}). \quad (2.17)$$

L'évaluation de cette somme se fait par l'utilisation de la formule sommatoire de Poisson³ et le passage aux coordonnées polaires [AS64], on obtient

$$\rho(E) = \frac{ab}{4\pi} \sum_{m_1, m_2} J_0\left(Q\sqrt{(m_1a)^2 + (m_2b)^2}\right), \quad (2.18)$$

ou $J_0(z)$ est la fonction de Bessel d'ordre zero et $Q = \sqrt{E}$. Il est facile de montrer que

$$L_p = \sqrt{(m_1a)^2 + (m_2b)^2}, \quad (2.19)$$

est la longueur d'une orbite périodique dans le rectangle avec des conditions aux bords périodiques. On peut ainsi réécrire la somme (2.18) comme une somme sur les orbites périodiques de longueur L_p dans le rectangle. La densité se réécrit donc :

$$\rho(E) = \bar{\rho}(E) + \rho^{osc}(E), \quad (2.20)$$

avec le terme de Weyl, $\bar{\rho}(E) = \frac{ab}{4\pi} = \frac{A}{4\pi}$ venant de la contribution $m_1 = m_2 = 0$ et

$$\rho^{osc}(E) = \frac{ab}{4\pi} \sum_{op} J_0\left(L_p \sqrt{E}\right), \quad (2.21)$$

où la somme est faite sur les orbites périodiques de longueur L_p dans le rectangle. Il est facile de se convaincre que cette forme est effectivement oscillante puisque pour les grandes valeurs de son argument, i.e. la limite semiclassique, la fonction de Bessel se comporte comme $J_0(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{\pi}{4}\right)$ et on trouve que

$$\rho^{osc}(E) = \frac{ab}{\sqrt{8\pi Q}} \sum_{op} \frac{1}{\sqrt{L_p}} \cos\left(QL_p - \frac{\pi}{4}\right), \quad Q = \sqrt{E}. \quad (2.22)$$

Cette formule est une illustration d'un résultat sur les modèles intégrables obtenu par Berry et Tabor [BT76, BT77a]. La formule pour les modèles chaotiques a été trouvée par Gutzwiller [Gut03] et s'écrit

$$\rho^{osc}(E) = \sum_{op} \frac{T_p}{\pi \hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{|\det(M_p^n - \mathbb{I})|^{1/2}} \cos\left(n \frac{S_p}{\hbar} - n \frac{\pi}{2} \mu_p\right) \quad (2.23)$$

où S_p est l'action classique le long d'une trajectoire périodique, T_p est la période de l'orbite p , M_p la matrice de monodromie et μ_p l'indice de Maslov [Gut90]. Noter que toutes ces quantités sont classiques : la formule des traces de Gutzwiller exprime une quantité quantique comme une somme sur les orbites classiques périodiques et les coefficients qui apparaissent sont purement classiques.

2.1.3 Théorie des nombres

Le premier théorème concernant les nombres premiers remonte à Euclide et concerne le fait qu'il en existe une infinité. Quelques deux mille ans plus tard, Euler a montré que la somme des inverses des nombres premiers divergeait. Appelons $\{p_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ la suite ordonnée des nombres premiers et $\pi(x)$ le nombre de nombres premiers plus petits ou égaux à x

$$\pi(x) = \sum_n \Theta(x - p_n). \quad (2.24)$$

3. La formule sommatoire de Poisson s'écrit $\sum_n f(n) = \sum_m \int e^{2i\pi m k} f(k) dk$.

Legendre a conjecturé en 1798 que $\pi(x)$ satisfaisait la condition

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\pi(x)}{x/\log x} = 1. \quad (2.25)$$

Ce résultat est connu sous le nom de théorème des nombres premiers. Plus tard, Gauss remarque que la fonction $\pi(x)$ est bien approximée par la fonction

$$\text{Li}(x) = \int_2^x \frac{dt}{\log t} \quad (2.26)$$

qui est évidemment en accord avec la conjecture de Legendre puisque $\text{Li}(x) \approx \frac{x}{\log x}$. Bien que quelques résultats théoriques soient obtenus après Gauss, notamment par Chebychev, il faut attendre Riemann et l'étude de la fonction qui porte aujourd'hui son nom, pour obtenir des résultats plus avancés. La fonction zeta de Riemann $\zeta(s)$ est définie par

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}. \quad (2.27)$$

Cette série a été étudiée par Euler pour des valeurs entières de l'argument s ⁴. Riemann l'a étudiée pour des valeurs complexes de la variable s . Il s'agit d'une fonction extrêmement importante en théorie des nombres où elle attire l'attention des mathématiciens (et aussi des physiciens!) depuis plus d'un siècle en raison de la fameuse hypothèse qui lui est rattachée [Tit86]. Comme tout entier peut se décomposer en produit de nombres premiers, $n = p_1^{m_1} p_2^{m_2} \cdots p_k^{m_k}$, il est possible d'écrire

$$\zeta(s) = \prod_{\substack{p \\ \text{premier}}} \frac{1}{1 - p^{-s}}. \quad (2.28)$$

La fonction zeta de Riemann ne converge que pour $\text{Re}(s) > 1$ mais peut être prolongée analytiquement au plan complexe entier en utilisant l'équation fonctionnelle [Tit86]

$$\zeta(s) = 2^s \pi^{s-1} \sin\left(\frac{\pi s}{2}\right) \Gamma(1-s) \zeta(1-s). \quad (2.29)$$

À partir de la relation fonctionnelle, il apparaît clairement que la fonction zeta s'annule pour les valeurs $s = -2k$ avec $k > 0$ en raison du facteur $\sin(\pi s/2)$, mais pas en $s = 0$ par suite du facteur $\Gamma(1-s)$. Ces zéros sont appelés les zéros triviaux. L'hypothèse de Riemann stipule que les zéros non-triviaux de la fonction zeta de Riemann se trouvent sur la droite de partie réelle $1/2$ dans le plan complexe [Rie92]. Autrement dit, les seuls zéros non-triviaux de la fonction zeta de Riemann sont de la forme

$$s_n = \frac{1}{2} + it_n. \quad (2.30)$$

Les zéros non-triviaux de la fonction zeta de Riemann sont intimement liés à la distribution des nombres premiers. En particulier la fonction entière $\xi(s)$ définie par

$$\xi(s) = \frac{1}{2} s(s-1) \pi^{-s/2} \Gamma\left(\frac{s}{2}\right) \zeta(s), \quad (2.31)$$

admet le développement en produit suivant

$$\xi(s) = e^{A+Bs} \prod_n \left(1 - \frac{s}{s_n}\right) e^{-s/s_n} \quad (2.32)$$

où le produit court sur les zéros non triviaux (2.30). De manière équivalente, il existe une formule explicite exprimant la fonction de comptage des nombres premiers $\pi(x)$ comme une série sur les zéros non-triviaux de $\zeta(s)$ [Rie92]. Il est possible d'écrire une formule de trace pour la densité de zéros de la fonction zeta de Riemann [Ber86, BK96, Bog07]

$$\rho(E) = \sum_{n=0}^{\infty} \delta(E - s_n) = \bar{\rho}(E) + \rho^{osc}(E). \quad (2.33)$$

4. En 1735, Euler a réussi à résoudre le problème de Bâle posé 91 ans auparavant par Mengoli. Le problème consistait à trouver la valeur de la série $\zeta(2) = 1 + 1/2^2 + 1/3^2 + \cdots$. Euler a montré en utilisant le développement de $\sin(x)/x$ en produit de ses racines que la somme cherchée valait $\pi^2/6$. Il a ensuite généralisé le résultat et trouvé la formule générale pour $\zeta(2n)$.

La densité lissée est donnée par

$$\bar{\rho}(E) = \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{E}{2\pi} \right), \quad (2.34)$$

tandis que la partie oscillante s'exprime comme

$$\rho^{osc}(E) = -\frac{1}{\pi} \sum_{p \text{ premier}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\ln p}{p^{n/2}} \cos(E n \ln p) = -\frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n}} \Lambda(n) \cos(E \ln n) \quad (2.35)$$

où la fonction de Von Mangoldt $\Lambda(n)$ est donnée par

$$\Lambda(n) = \begin{cases} \ln p & \text{si } n = p^k \text{ avec } p \text{ premier et } k \geq 1, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

En comparant à la formule des traces (2.23) trouvée par Gutzwiller dans le cas des systèmes chaotiques, on peut faire les correspondances suivantes [Ber86, SN86, H⁺76]

1. la somme sur les orbites périodiques se traduit par une somme sur les nombres premiers dans le cas de la fonction zeta de Riemann,
2. la période des orbites périodiques est donnée par $\ln p$,
3. l'action le long de la trajectoire est donnée par $E \ln p$.

Les zéros de la fonction zeta de Riemann peuvent aussi être étudiés par une approche statistique. Dans les années 70, Montgomery a noté que la fonction de corrélation à deux points des zéros de la fonction zeta était exactement la même que celle obtenue dans l'ensemble gaussien unitaire (GUE) des matrices aléatoires [Mon73]. Plus tard, Odlyzko a montré que la distribution de l'espacement des zéros était en accord parfait avec la conjecture ("surmise") de Wigner pour l'ensemble GUE [Odl87]. En utilisant la distribution du rapport d'espacements successifs des zéros, nous montrerons au Chapitre 3 qu'effectivement, les zéros de la fonction zeta de Riemann se comportent (statistiquement) comme les valeurs propres d'une matrice GUE. La correspondance entre les zéros de la fonction zeta et les valeurs propres des matrices GUE a été utilisée par Keating et Snaith [KS00] pour prédire des résultats sur les moments de la fonction zeta

$$M_n = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T \left| \zeta \left(\frac{1}{2} + it \right) \right|^{2n} dt. \quad (2.36)$$

Leur idée a consisté à chercher une fonction jouant le rôle de $\zeta(1/2 + it)$ dans le cas GUE. Cette fonction doit s'annuler aux valeurs propres de la matrice H de l'ensemble GUE. Il est bien connu que le polynôme caractéristique d'une matrice s'annule aux valeurs propres de celle-ci. Ils ont donc fait le calcul de la valeur moyenne de $|\det(H - \mathbb{I}z)|^{2n}$ avec H distribué suivant l'ensemble GUE, ce qui leur a permis d'obtenir une formule générale pour M_n pour tout n . Cette approche fructueuse a permis d'obtenir des résultats nouveaux sur la fonction zeta de Riemann en passant par le formalisme des matrices aléatoires [HK⁺00, CFZ07]. De plus, la formule de trace trouvée pour la densité d'états (2.35) a poussé les physiciens à penser qu'il existerait un système chaotique dont les valeurs propres seraient données par les zéros de la fonction zeta de Riemann [BK99, Sre11]!

2.1.4 Loi du semi-cercle de Wigner

Wigner a introduit les matrices aléatoires dans les années 50 afin d'expliquer le spectre d'excitation des noyaux lourds [Wig58]. Les niveaux excités des noyaux atomiques sont très denses et corrélés entre eux. Le Hamiltonien régissant les interactions entre nucléons n'est pas connu exactement et des approximations telles que celle faites par Bethe (voir sous-section 2.1.1) permettent d'obtenir des résultats en assez bon accord avec l'expérience. Wigner s'est intéressé aux propriétés statistiques des niveaux excités des noyaux. S'appuyant sur une démarche similaire à celle employée par Boltzmann et Gibbs en physique statistique, Wigner propose de modéliser le Hamiltonien d'un noyau atomique par un Hamiltonien aléatoire, c'est-à-dire une matrice à coefficients aléatoires. Comme nous le verrons au Chapitre 3, la distribution de probabilité des entrées de la matrice ainsi que sa structure doivent être choisies minutieusement en fonction des symétries du problème étudié. Ces contraintes amèneront à la classification fondamentale des ensembles gaussiens invariants que nous étudierons plus en détail au Chapitre 3. La modélisation du Hamiltonien d'un noyau atomique par une matrice aléatoire ne permet pas de calculer la position exacte des niveaux d'énergie de tel ou tel noyau, mais apporte

une description statistique des noyaux atomiques. La théorie des matrices aléatoires s'est rapidement révélée être une bonne description locale des niveaux excités des gros noyaux atomiques. En effet, on observe dans ces noyaux une répulsion entre les niveaux d'énergie voisins. Au demeurant, il s'avère que les valeurs propres λ_i d'une matrice aléatoire à coefficients indépendants se repoussent : la densité de probabilité $P(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$ s'annule quand $\lambda_i = \lambda_j$ pour un couple (i, j) tel que $i = j$.

Soit $\{\lambda_n\}_{1 \leq n \leq N}$ les valeurs propres d'une matrice aléatoire H_N de taille $N \times N$. Le calcul de la densité d'états moyenne

$$\rho_N(\lambda) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{n=1}^N \delta(\lambda - \lambda_n) \right\rangle, \quad (2.37)$$

où $\langle \dots \rangle$ signifie la moyenne sur les différentes réalisations de matrices aléatoires, a été effectué par Wigner pour les grandes valeurs de N . En calculant les différents moments de la densité [Wig93]

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda^k \rho_N(\lambda) d\lambda = \frac{1}{N} \text{Tr} (H_N)^k, \quad (2.38)$$

Wigner a induit la forme de la densité

$$\rho_N(\lambda) = \begin{cases} \frac{1}{\pi N \beta} \sqrt{2N\beta - \lambda^2}, & |E| < \sqrt{2N\beta} \\ 0, & |E| \geq \sqrt{2N\beta} \end{cases} \quad (2.39)$$

où β est l'indice de Dyson dépendant des symétries de la matrice aléatoire. Ce résultat est connu sous le nom de loi du semicercle de Wigner. C'est une loi universelle dans le sens où une remise à l'échelle convenable des valeurs propres $\lambda_n \rightarrow \lambda_n / \sqrt{2N\beta}$ donne une fonction indépendante des détails des entrées de la matrice. Plus tard, d'autres techniques indépendantes ont été développées telles que l'approche du gaz de Coulomb où la méthode de la transformée de Stieltjes et ont permis d'obtenir la densité d'états [Meh04]. Nous détaillerons quelques-unes de ces méthodes aux Chapitre 3.

2.1.5 Théorème de la limite centrale et loi gaussienne

Dans le même ordre d'idée, une autre loi universelle souvent rencontrée en physique est la loi normale ou gaussienne. La présence de cette loi dans un bon nombre de problèmes physiques provient en majeure partie du théorème de la limite centrale. Appelons $\{X_k\}_{1 \leq k \leq N}$ un ensemble de variables aléatoires réelles indépendantes, de même loi et de carré intégrable. Considérons la variable aléatoire

$$S_N = \sum_{k=1}^N X_k. \quad (2.40)$$

Notons $\mu = \mathbf{E}X = \langle X \rangle$ et $\sigma^2 = \text{Var}(X) = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$. Le théorème de la limite centrale stipule que la variable aléatoire

$$\tilde{S}_N \equiv \frac{S_N - \mu N}{\sigma \sqrt{N}} \quad (2.41)$$

est distribuée suivant une loi normale⁵ $N(0, 1)$ dans la limite $N \rightarrow \infty$. La première démonstration de ce théorème, publiée en 1809, est due à Pierre-Simon de Laplace [mdL10].

Généralement, la densité d'états d'une large classe de modèles intégrables tend vers une loi normale lorsque le nombre de degrés de liberté du système tend vers l'infini, qu'il soit à courte portée [FW71, Ger72, BFF⁺81, TL11] ou à longue portée [FGL05, BMB06]. Il y a plusieurs manières de « prouver » cette assertion : nous en détaillerons certaines dans la suite. L'une d'entre elles consiste à faire usage du théorème limite central. Supposons qu'un Hamiltonien H intégrable ait été mis sous sa forme diagonale

$$\hat{H} = \sum_k \Lambda_k \left(\eta_k^\dagger \eta_k - \frac{1}{2} \right), \quad (2.42)$$

5. On rappelle que la distribution de probabilité de la loi normale $N(\mu, \sigma)$ est donnée par $\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}$.

avec Λ_k le spectre d'excitation à une particule du Hamiltonien, $\eta_k^\dagger$ et η_k des opérateurs de création et annihilation en seconde quantification respectivement⁶. Les énergies propres du Hamiltonien sont données par

$$E_{\vec{n}} = \sum_{k=0}^{N-1} \Lambda_k \left(n_k - \frac{1}{2} \right), \quad \vec{n} = |n_0, n_1, \dots, n_{N-1}\rangle \quad (2.43)$$

avec n_k le nombre de particules dans l'orbitale d'énergie Λ_k . Pour des fermions, $n_k = 0, 1$ tandis que pour des bosons $n_k = 0, 1, 2, \dots$ avec la contrainte $\sum_k n_k = N$. Comme nous le verrons par la suite, le modèle d'Ising en champ transverse se réduit à un modèle fermionique. Nous ne nous intéresserons donc dans la suite qu'au cas fermionique. L'énergie de l'état fondamental correspond alors à $\vec{n} = \vec{0}$

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda_k. \quad (2.44)$$

Les états d'énergies des modèles intégrables se comportent comme des variables indépendantes non-corrélées. Il s'ensuit que les énergies $E_{\vec{n}}$ données par (2.43) peuvent être vues comme des réalisations indépendantes d'un processus aléatoire. En faisant l'analogie avec la formule (2.40) et usage du théorème de la limite centrale, il vient que dans la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$

$$\rho(E) = \frac{1}{M} \sum_{\vec{n}} \delta(E - E_{\vec{n}}) \approx \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - \mu)^2}{\sigma^2}\right), \quad (2.45)$$

avec $\mu = \langle E \rangle$ et $\sigma^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$. Un argument similaire est présenté dans [EFGL09]. De manière plus rigoureuse, ce résultat peut être démontré en utilisant la méthode du col que nous détaillons dans l'Annexe B. Nous utiliserons aussi ce résultat dans le cas du modèle d'Ising en champ transverse.

Généralement, le spectre d'excitation Λ_k dépend d'un paramètre du problème (par exemple le champ magnétique extérieur) et il peut arriver que pour certaine valeur de ce paramètre, Λ_k prenne des valeurs indépendantes de k . Il s'ensuit l'apparition de fortes dégénérescences dans le spectre physique (2.43) se traduisant par des pics dans la densité de niveaux. Dans la limite thermodynamique, ces pics se recouvrent afin de redonner la forme gaussienne (2.45). Cependant, pour des valeurs finies du nombre de degrés de liberté atteignables en pratique dans les simulations numériques, ces pics ont une influence importante dans la densité d'états et l'approximation gaussienne devient inefficace. La question que l'on se pose alors est de savoir s'il est possible de décrire ces pics de manière qualitative et quantitative. Il semblerait que ces questions n'aient pas attiré d'attention particulière dans la littérature si ce n'est que très récemment. Nous discuterons en particulier les récents travaux de Keating sur les chaînes de spins aléatoires en étroite connexion avec nos résultats [KLW14a, KLW14b].

2.1.6 Plan du chapitre

Cette partie du manuscrit est consacrée à l'étude de la densité d'états du modèle d'Ising en présence de deux champs. Nous discuterons en détail la forme des densités spectrales obtenues numériquement pour des valeurs de nombre de spins N de l'ordre de la dizaine. Dans un premier temps, nous nous intéresserons au modèle d'Ising avec un seul champ transverse. Ce modèle intégrable nous permettra d'introduire les outils de base pour l'étude du cas général non intégrable à deux champs. Lorsque le champ magnétique est de l'ordre de l'unité, la densité spectrale est bien approximée par une gaussienne dans le centre du spectre que nous appellerons "bulk" dans la suite. Nous expliquerons ensuite pour quelles raisons des pics apparaissent dans la densité d'états pour les petites et grandes valeurs de la constante de couplage et donnerons une méthode particulièrement simple, basée sur une approximation multi-gaussienne, permettant de reproduire les comportements observés. Dans un deuxième temps, nous porterons notre attention sur le modèle d'Ising non intégrable à deux champs. Bien que le spectre de ce modèle ne soit pas connu en raison du champ longitudinal qui brise l'intégrabilité, une approche perturbative nous permettra d'obtenir des résultats qualitatifs pour les densités d'états en bon accord avec les simulations numériques.

6. La nature fermionique ou bosonique de ces opérateurs dépend évidemment du modèle étudié.

2.2 De Ising classique 2D vers Ising quantique 1D

Le modèle de Lenz-Ising a été introduit par Lenz en 1920 afin de décrire les propriétés ferromagnétiques dans les matériaux présentant une anisotropie très forte. Le Hamiltonien décrivant ce modèle est donné par

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (2.46)$$

où J_{ij} correspondent aux constantes d'interaction entre les spins aux sites i et j , h représente le champ magnétique. Les moments magnétiques s_i sont situés aux noeuds d'un réseau et ne peuvent prendre que les valeurs ± 1 (en unité du magnéton de Bohr $\mu_B = e\hbar/2m_e$). Le réseau peut être unidimensionnel, bidimensionnel ou tridimensionnel et représente une structure cristalline dont les noeuds sont occupés par des ions possédant un moment magnétique. L'interaction effective de ces moments magnétiques sur le réseau est donnée par le Hamiltonien (2.46). En général, on considère le modèle d'Ising avec interaction entre premier voisins seulement. La version unidimensionnelle du modèle a été résolue par Ising en 1925 [Isi25] et la version bidimensionnelle en 1944 par Onsager [Ons44].

À une dimension, le modèle d'Ising classique est exactement soluble par la méthode de la matrice de transfert. L'énergie libre est analytique pour toute température, ce qui signifie que ce modèle ne possède pas de transition de phase. Landau et Lifshitz ont montré que tout modèle unidimensionnel avec des interactions à courte portée ne peut pas posséder de transition de phase à température positive. Le modèle bidimensionnel anisotrope sur un réseau carré en champ nul est donné par

$$H[\{s_{i,j}\}] = - \sum_p \sum_k (J_t s_{p,k} s_{p+1,k} + J_l s_{p,k} s_{p,k+1}) \quad (2.47)$$

où J_l et J_t correspondent aux constantes d'interactions dans les directions longitudinale et transverse respectivement (voir figure 2.3). Ce modèle présente une transition de phase à température finie. En utilisant des arguments de dualité, Kramers et Wannier ont réussi à localiser la position du point critique [KW41]. L'équation de la ligne critique séparant les phases ferromagnétiques et paramagnétiques dans l'espace des paramètres s'écrit

$$\sinh 2\beta_t^c \sinh 2\beta_l^c = 1, \quad \beta_t = \frac{J_t}{k_B T}, \quad \beta_l = \frac{J_l}{k_B T}. \quad (2.48)$$

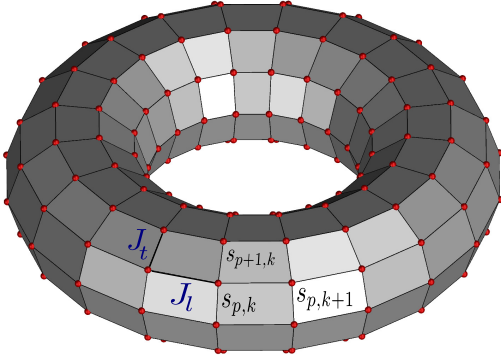


FIGURE 2.3 – Modèle d'Ising classique bidimensionnel avec conditions aux bords périodiques. Les spins voisins interagissent avec des constantes d'interactions J_l et J_t dans les directions longitudinales et transverses respectivement.

La formulation de Feynman de la mécanique quantique permet d'établir un lien entre un système quantique en dimension d avec un système de physique statistique en dimension $d + 1$. L'analogie repose sur l'observation de la ressemblance entre l'écriture des amplitudes de transitions en mécanique quantique [Kog79]

$$K = \sum_{\text{chemins}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \quad (2.49)$$

avec S l'action classique le long du chemin et l'écriture de la fonction de partition en physique statistique

$$Z = \sum_{\text{configurations}} \exp(-\beta E) \quad (2.50)$$

avec E l'énergie de la configuration.

En particulier, il est possible de montrer qu'au modèle d'Ising bidimensionnel (2.47) correspond un modèle quantique unidimensionnel présentant une transition de phase à température nulle et appartenant à la classe d'universalité d'Ising 2D. Dans la limite anisotrope extrême, $\beta_l \ll 1$ et $\beta_t \gg 1$, on peut montrer que le modèle quantique unidimensionnel associé au modèle d'Ising classique bidimensionnel est donné par [Kog79, Ber93]

$$\hat{H} = - \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x - \lambda \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^z \quad (2.51)$$

où les $\hat{\sigma}_n^{x,z}$ sont les opérateurs de Pauli et la constante λ est liée aux couplages du modèle bidimensionnel classique via

$$\lambda = \frac{e^{-2\beta_t}}{\beta_t}. \quad (2.52)$$

Le modèle quantique qui apparaît est le modèle d'Ising quantique en champ transverse et présente une transition de phase à température nulle dont les caractéristiques (tels que les exposants critiques) sont les mêmes que pour la contrepartie classique. En particulier, nous pouvons trouver la position du point critique quantique à partir de l'équation de la ligne critique classique. Dans la limite anisotrope extrême, l'équation définissant le point critique classique (2.48) se transforme en

$$\beta_t^c e^{2\beta_t^c} = 1 \quad (2.53)$$

de sorte que le point critique quantique correspond à $\lambda = 1$.

2.3 Le modèle d'Ising quantique unidimensionnel

Nous allons étudier les propriétés de la densité d'états du modèle d'Ising en champ transverse pour N spins $1/2$ avec des conditions aux bords périodiques. Le Hamiltonien qui décrit ce modèle est donné en (2.51). Il s'agit d'un des exemples les plus simples de système quantique présentant une transition de phase à température nulle. Ce modèle attire de nos jours un intérêt croissant en raison de sa réalisation expérimentale dans des cristaux de CoNb_2O_6 [KFM⁺14]. Le paramètre qui dirige la transition de phase est le champ magnétique λ . L'analogie avec le système classique en dimension deux nous a permis de trouver la position du point critique quantique en $\lambda = 1$. Ce point sépare une phase ordonnée ferromagnétique d'une phase désordonnée paramagnétique. Il est évident que la structure de l'état fondamental du modèle d'Ising quantique (2.51) dépend de la valeur du champ appliqué λ . Afin d'en avoir une idée plus claire, il est intéressant d'étudier les limites $\lambda \ll 1$ et $\lambda \gg 1$. Dans la limite $\lambda \ll 1$, le Hamiltonien du modèle se réduit à

$$\hat{H}_I = - \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x. \quad (2.54)$$

L'état fondamental est dégénéré et est donné par le produit tensoriel

$$|GS\rangle = \bigotimes_{i=0}^{N-1} \frac{|\uparrow\rangle_i \pm |\downarrow\rangle_i}{\sqrt{2}} \quad (2.55)$$

correspondant à un état complètement délocalisé et s'étalant uniformément dans l'espace de Hilbert. L'état fondamental présente la symétrie $\mathbb{Z}_2$ correspondant à la transformation $\sigma_n^x \rightarrow -\sigma_n^x$ qui laisse le Hamiltonien $\hat{H}_I$ invariant. Dans la limite thermodynamique, le système choisit l'un de ces états comme état fondamental (qui sera préféré en raison d'une perturbation infinitésimale extérieure) et brise ainsi la symétrie $\mathbb{Z}_2$. On parle alors de brisure spontanée de symétrie. Une façon de caractériser l'état fondamental consiste à définir la dimension multifractale qui lui est associée. Nous y reviendrons plus en détails au Chapitre 4. On peut aussi regarder les corrélations de $\hat{\sigma}_i^x$ par exemple. Clairement

$$\langle GS | \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_j^x | GS \rangle = 1 \quad (2.56)$$

puisque tous les états de l'espace de Hilbert apparaissent dans (2.55) avec le même poids. Pour des valeurs finies du champ magnétique λ , les corrélations vont décroître.

Dans la limite $\lambda \gg 1$, on a

$$\hat{H}_{II} = -\lambda \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^z. \quad (2.57)$$

et le fondamental est donné par

$$|GS\rangle = \bigotimes_{i=0}^{N-1} |\uparrow\rangle_i = |\uparrow\uparrow \cdots \uparrow\rangle. \quad (2.58)$$

Il s'agit d'un état complètement localisé dans l'espace de Hilbert. Il est facile de calculer la fonction de corrélation à deux points, on a

$$\langle GS | \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_j^x | GS \rangle = \delta_{ij}. \quad (2.59)$$

Si nous prenons en compte les fluctuations quantiques engendrées par $\hat{H}_I$ et regardons les corrections perturbatives à l'ordre $1/\lambda$, on trouve que le fondamental est toujours localisé sur l'état (2.58) mais avec un élargissement et débordement sur d'autres états dans l'espace de Hilbert. Les corrélations sont toujours à courte portée et prennent la forme

$$\langle GS | \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_j^x | GS \rangle = e^{-|i-j|/\xi}, \quad |i-j| \gg 1 \quad (2.60)$$

où ξ peut être interprété comme une longueur de localisation dans l'espace de Hilbert que l'on peut relier au gap du spectre Δ ainsi qu'à l'exposant critique dynamique z via $\Delta \sim \xi^{-z}$ [Sac07]. Comme il n'est pas possible de joindre les états vérifiant (2.56) et (2.60) par une fonction analytique de λ , il s'ensuit qu'il existe une valeur critique $\lambda = \lambda_c$ pour laquelle la fonction de corrélation à deux points passe de (2.56) à (2.60). Ce point critique se trouve en $\lambda_c = 1$ comme nous l'avons vu précédemment en utilisant l'analogie avec le modèle de physique statistique classique associé. En $\lambda_c = 1$, le gap spectral (l'espacement entre l'énergie fondamentale et le premier état excité) se referme et la longueur de corrélation diverge, la fonction de corrélation est alors décrite par une loi de puissance pour $|i-j| \gg 1$. Nous verrons au Chapitre 4 que la criticalité quantique peut être observée au moyen des dimensions multifractales.

2.3.1 Diagonalisation exacte du modèle quantique

Afin de construire la densité d'états du modèle d'Ising, on doit d'abord trouver son spectre. La diagonalisation exacte du modèle d'Ising quantique en champ transverse avec des conditions aux bords périodiques

$$\hat{H} = - \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x - \lambda \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^z \quad (2.61)$$

se fait grâce à la transformation de Jordan-Wigner [JW93]. L'idée de Jordan et Wigner consiste à transformer le système de spins en interaction en un système de fermions sans interaction. Pour cela on effectue une transformation sur les opérateurs de Pauli qui envoie ces derniers sur des opérateurs fermioniques. A première vue un *mapping* de ce genre ne semble pas très intuitif : il existe une correspondance biunivoque entre un spin $1/2$ et un degré de liberté fermionique de spin nul en termes d'opérateurs de création et d'annihilation (i.e. $a^\dagger$ et a)

$$\hat{\sigma}_n^z = 2a_n^\dagger a_n - 1, \quad \hat{\sigma}_n^+ = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_n^x + i\hat{\sigma}_n^y) = a_n^\dagger, \quad \hat{\sigma}_n^- = (\hat{\sigma}_n^+)^{\dagger} = a_n. \quad (2.62)$$

En effet, si on considère qu'un spin *down* $|\downarrow\rangle_n$ au site n correspond à l'absence de fermion $|0\rangle_n$ au même site (voir figure 2.4), on a effectivement

$$\hat{\sigma}_n^+ |\downarrow\rangle_n = |\uparrow\rangle_n \Leftrightarrow a_n^\dagger |0\rangle_n = |1\rangle_n \quad (2.63)$$

où l'état avec un spin *up* $|\uparrow\rangle_n$ au site n correspond à la présence d'un fermion $|1\rangle_n$ au même site. Comme $(\hat{\sigma}_n^+)^2 |\downarrow\rangle_n = 0$, il s'ensuit que les opérateurs $a_n^\dagger$ sont bien de nature fermioniques. Cependant, le caractère fermionique des opérateurs $\hat{\sigma}_n^\pm$ est local, c'est-à-dire à n fixé

$$\{\hat{\sigma}_n^+, \hat{\sigma}_n^-\} = \mathbb{1}, \quad \{\hat{\sigma}_n^+, \hat{\sigma}_m^+\} = \{\hat{\sigma}_n^-, \hat{\sigma}_m^-\} = 0. \quad (2.64)$$

Ces opérateurs commutent sur des sites différents

$$[\hat{\sigma}_n^+, \hat{\sigma}_m^-] = [\hat{\sigma}_n^+, \hat{\sigma}_m^+] = [\hat{\sigma}_n^-, \hat{\sigma}_m^-] = 0, \quad n \neq m \quad (2.65)$$

et ne peuvent donc pas représenter des champs fermioniques (car ceux-ci doivent anticommuter). Jordan et Wigner ont étendu le caractère fermionique non-localement en introduisant une transformation possédant toutes les propriétés nécessaires.

La transformation de Jordan-Wigner est une transformation non-locale et fait intervenir les valeurs de spins sur différents sites. Introduisons l'opérateur nombre $\hat{N}_n = a_n^\dagger a_n$ donnant 1 si le site n est occupé par un fermion et 0 dans le cas contraire. On a de manière triviale $\hat{N}_n^2 = \hat{N}_n$ de sorte que toute fonction $F(z) = \sum_k c_k z^k$ de la variable $z = a_n^\dagger a_n$ s'écrit

$$F(a_n^\dagger a_n) = c_0 + a_n^\dagger a_n \sum_{k=1}^{\infty} c_k = c_0(1 - a_n^\dagger a_n) + F(1)a_n^\dagger a_n. \quad (2.66)$$

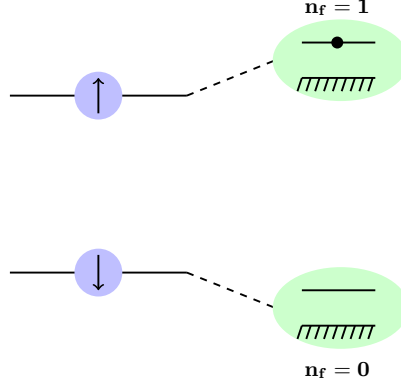


FIGURE 2.4 – Transformation de Jordan-Wigner. Un spin *up* (respectivement *down*) est équivalent à la présence d'un fermion $n_f = 1$ (respectivement absence d'un fermion $n_f = 0$).

L'idée de Jordan et Wigner consiste à écrire la transformation non-locale

$$a_n^\dagger = \hat{\sigma}_n^+ \prod_{j=0}^{n-1} F(\hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^-), \quad a_n = \prod_{j=0}^{n-1} F^*(\hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^-) \hat{\sigma}_n^- \quad (2.67)$$

et à choisir la fonction F de façon à ce que les relations d'anti-commutation fermioniques

$$\{a_n^\dagger, a_m\} = \delta_{nm}, \quad \{a_n^\dagger, a_m^\dagger\} = \{a_n, a_m\} = 0 \quad (2.68)$$

soient vérifiées pour toutes valeurs de n et m (i.e. localement et non-localement). Dans l'Annexe C, nous montrons que la fonction $F(z) = e^{-i\pi z}$ permet de satisfaire les conditions ⁷ (2.68). La relation (2.66) tient aussi pour l'opérateur $\hat{\sigma}_n^+ \hat{\sigma}_n^-$, il vient que les transformations inverses de (2.67) sont données par

$$\hat{\sigma}_n^+ = a_n^\dagger \prod_{j=0}^{n-1} F^*(a_j^\dagger a_j), \quad \hat{\sigma}_n^- = \prod_{j=0}^{n-1} F(a_j^\dagger a_j) a_n. \quad (2.69)$$

La transformation de Jordan-Wigner introduit donc un facteur de phase $\prod_{j=0}^{n-1} e^{-i\pi \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^-}$ (respectivement $\prod_{j=0}^{n-1} e^{-i\pi a_j^\dagger a_j}$) qui vaut ± 1 suivant que le nombre de spins (respectivement le nombre de fermions) précédant le site n sur la chaîne est pair ou impair. En exprimant le Hamiltonien d'Ising (2.61) à l'aide de ces nouvelles variables, on obtient une forme presque quadratique

$$\hat{H} = - \sum_{j=0}^{N-2} (a_j^\dagger - a_j) (a_{j+1}^\dagger + a_{j+1}) - \lambda \sum_{j=0}^{N-1} (2a_j^\dagger a_j - 1) + (a_{N-1}^\dagger - a_{N-1}) (a_0^\dagger + a_0) e^{i\pi \hat{\mathcal{N}}} \quad (2.70)$$

où l'opérateur $\hat{\mathcal{N}} = \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\mathcal{N}}_n = \sum_{n=0}^{N-1} a_n^\dagger a_n$ compte le nombre de fermions de Jordan-Wigner sur la chaîne quantique. L'opérateur nombre peut se réécrire

$$e^{i\pi \hat{\mathcal{N}}} = (-1)^N \prod_{j=0}^{N-1} (1 - 2a_j^\dagger a_j) = (-1)^N \hat{\mathcal{P}}. \quad (2.71)$$

avec l'opérateur parité

$$\hat{\mathcal{P}} = \prod_{j=0}^{N-1} \hat{\sigma}_j^z. \quad (2.72)$$

Ce dernier commute avec le Hamiltonien d'Ising, $[\hat{\mathcal{P}}, \hat{H}] = 0$ de sorte que les états propres de $\hat{H}$ peuvent être classés suivant le secteur de parité auquel ils appartiennent. Suivant la parité du nombre de fermions de Jordan-Wigner sur la chaîne, $e^{i\pi \hat{\mathcal{N}}}$ ne peut prendre que les valeurs ± 1 . Il s'ensuit que dans (2.70) on peut choisir une

7. Comme $F(1) = F(-1) = -1$, il s'ensuit que $e^{i\pi a_n^\dagger a_n} = e^{-i\pi a_n^\dagger a_n} = 1 - 2a_n^\dagger a_n$.

de ces valeurs afin d'obtenir une forme quadratique pour le Hamiltonien mais notre choix doit se répercuter sur les conditions aux limites. Par exemple, en se restreignant aux chaînes quantiques avec N pair⁸, $e^{i\pi\hat{N}}$ et $\hat{\mathcal{P}}$ sont confondus et on peut écrire le Hamiltonien comme

$$\hat{H} = - \sum_{j=0}^{N-1} \left[\left(a_j^\dagger - a_j \right) \left(a_{j+1}^\dagger + a_{j+1} \right) + \lambda \left(2a_j^\dagger a_j - 1 \right) \right], \quad (2.73)$$

et les conditions aux limites dépendent de la parité du nombre d'excitations fermioniques de la chaîne quantique. Si le nombre d'excitations fermioniques sur la chaîne est pair, $\hat{\mathcal{P}} = +1$ et on obtient des conditions aux bords antipériodiques pour les fermions de Jordan-Wigner, $a_N = -a_0$. Par contre si le nombre d'excitations fermioniques est impair, $\hat{\mathcal{P}} = -1$ et il vient des conditions aux bords périodiques pour les fermions $a_N = a_0$. Nous allons voir que ces conditions aux limites entraînent une quantification différente pour les impulsions des modes de Fourier.

Comme nous avons choisi des conditions aux bords périodiques pour la chaîne d'Ising, nous pouvons écrire les opérateurs fermioniques de Jordan-Wigner comme une combinaison d'opérateurs dans l'espace réciproque (transformation de Fourier)

$$a_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikn} b_k^\dagger, \quad (2.74)$$

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikn} b_k. \quad (2.75)$$

Les conditions aux bords antipériodiques ou périodiques entraînent une quantification différente des impulsions k suivant le secteur de parité. Dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$, nous avons des conditions aux bords antipériodiques, $a_N = -a_0$ et il vient que les valeurs des modes de Fourier k dans ce secteur sont données par

$$k_p = (2p+1) \frac{\pi}{N} - \pi, \quad p = 0, 1, \dots, N-1. \quad (2.76)$$

Dans le secteur de parité $\mathcal{P} = -1$, les conditions aux bords périodiques $a_N = a_0$ entraînent que

$$k_p = \frac{2p\pi}{N} - \pi, \quad p = 0, 1, \dots, N-1. \quad (2.77)$$

Le Hamiltonien prend la forme suivante dans l'espace de Fourier

$$H = -2 \sum_k (\lambda + \cos k) \left(b_k^\dagger b_k - \frac{1}{2} \right) + 2i \sum_{k \geq 0} \sin k (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k}) \quad (2.78)$$

et ressemble au Hamiltonien de la théorie BCS de la superconductivité [BCS57]. Il s'ensuit que l'on peut utiliser les mêmes techniques que celles utilisées dans cette théorie afin de diagonaliser notre Hamiltonien. La diagonalisation finale se fait par une transformation de Bogoliubov

$$\begin{cases} \eta_k = u_k b_k + i v_k b_{-k}^\dagger, \\ \eta_k^\dagger = u_k b_k^\dagger - i v_k b_{-k}, \end{cases} \quad (2.79)$$

où les paramètres de la rotation u_k et v_k vont être choisis de manière à ce que les opérateurs η constituent des opérateurs fermioniques et que le Hamiltonien prenne une forme diagonale dans cette nouvelle représentation. Les détails des calculs sont présentés dans l'Annexe C et on obtient finalement la forme diagonale

$$\hat{H} = \sum_k \Lambda_k \left(\eta_k^\dagger \eta_k - \frac{1}{2} \right) = \sum_k \Lambda_k \eta_k^\dagger \eta_k + E_0 \quad (2.80)$$

avec

$$\Lambda_k = 2\sqrt{1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k} \quad \text{et} \quad E_0 = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda_k. \quad (2.81)$$

Les Λ_k constituent le spectre d'excitation des fermions et E_0 correspond à l'énergie du fondamental.

8. La généralisation au cas N impair est immédiate.

2.3.2 Construction des états d'énergies de la chaîne de spins

Le spectre d'énergie du modèle d'Ising s'obtient en ajoutant des excitations fermioniques à l'énergie minimale $E_0^{(\mathcal{P})}$ dans chaque secteur de parité $\mathcal{P} = \pm 1$ avec

$$E_0^{(\mathcal{P})} = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda_k \quad (2.82)$$

et où la somme est faite sur les impulsions dont la forme est donnée par (2.76) et (2.77) et dépend du secteur de parité. Le fondamental se trouve toujours dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$ puisque $E_0^{(\mathcal{P}=+1)} \leq E_0^{(\mathcal{P}=-1)}$.

En raison de la structure du vide de Bogoliubov et de la conservation de la parité, le nombre d'excitations que l'on doit ajouter à l'énergie minimale dans chaque secteur doit obéir à des règles bien précises. De manière générale, le vide de Bogoliubov s'écrit sous la forme [BCS57]

$$|\Psi_0\rangle \equiv \left(b_0^\dagger\right)^\alpha \left(b_{-\pi}^\dagger\right)^\beta \prod_{k>0}' \left(u_k - iv_k b_k^\dagger b_{-k}^\dagger\right) |0\rangle, \quad (2.83)$$

où les u_k et v_k sont les paramètres de la transformation de Bogoliubov (2.79) et vérifie $\eta_k |\Psi_0\rangle = 0$. L'état $|0\rangle$ est le vide des fermions de type b , i.e. $b_k |0\rangle = 0$. Les paramètres α, β ne peuvent valoir que 0 ou 1 et dépendent du secteur de parité $\mathcal{P}$. Le symbole $\prod_{k>0}'$ signifie le produit sur les impulsions différentes de $k = 0$ et/ou $k = -\pi$ si $\alpha = 1$ et/ou $\beta = 1$. Cette forme pour l'état fondamental est la forme standard dans la théorie BCS de la superconductivité [BCS57]. La structure de cet état montre qu'il contient un nombre non-nul de fermions de type b . Comme les énergies de la chaîne s'obtiennent en ajoutant des excitations à l'énergie de cet état et que la parité est une quantité conservée, il s'ensuit que dans chaque secteur de parité $\mathcal{P}$, le nombre d'excitations va être choisi afin de respecter (2.71).

Considérons le cas du secteur de parité $\mathcal{P} = -1$ pour illustrer nos propos. La forme des impulsions dans ce secteur est donnée par (2.77). sin k s'annule pour deux valeurs d'impulsions autorisées, $k = 0$ (correspondant à $p = N/2$) et $k = -\pi$ (pour $p = 0$). Le Hamiltonien (2.78) prend alors la forme

$$H = -2(\lambda + 1) \left(b_0^\dagger b_0 - \frac{1}{2}\right) - 2(\lambda - 1) \left(b_{-\pi}^\dagger b_{-\pi} - \frac{1}{2}\right) - \sum_{\substack{k \neq 0 \\ k \neq -\pi}} (\dots) \quad (2.84)$$

Les modes d'impulsions $k = 0, -\pi$ sont donc déjà sous forme diagonale et ont pour énergies respectives

$$\epsilon_0 = 2(1 + \lambda), \quad \epsilon_{-\pi} = 2(\lambda - 1). \quad (2.85)$$

Il n'est donc pas nécessaire d'accomplir la rotation de Bogoliubov (2.79) sur ces modes et deux cas particulier sont à différencier

- si $\lambda > 1$, les deux excitations d'impulsions 0 et $-\pi$ sont à prendre en compte dans la construction du vide de Bogoliubov et on a

$$|\Psi_0^{\mathcal{P}}\rangle \equiv b_0^\dagger b_{-\pi}^\dagger \prod_{\substack{k>0 \\ k \neq -\pi}} \left(u_k - iv_k b_k^\dagger b_{-k}^\dagger\right) |0\rangle, \quad \eta_k |\Psi_0^{\mathcal{P}}\rangle = 0. \quad (2.86)$$

Ce vide contient un nombre pair de fermions de type b , il s'ensuit que les énergies de la chaîne de spins s'obtiennent en ajoutant un nombre impair d'excitations à $E_0^{(\mathcal{P}=-1)}$ afin de respecter la relation (2.71).

- Si $\lambda \leq 1$, l'énergie $\epsilon_{-\pi}$ du mode d'impulsion $k = -\pi$ devient négative ($(\lambda - 1) \leq 0$) et ne doit donc pas être prise dans la construction du vide de Bogoliubov. Il vient donc

$$|\Psi_0^{\mathcal{P}}\rangle \equiv b_0^\dagger \prod_{\substack{k>0 \\ k \neq -\pi}} \left(u_k - iv_k b_k^\dagger b_{-k}^\dagger\right) |0\rangle, \quad \eta_k |\Psi_0^{\mathcal{P}}\rangle = 0 \quad (2.87)$$

qui contient un nombre impair de fermions de type b . De ce fait, le nombre d'excitations nécessaires à la construction des énergies de la chaîne de spins est pair afin de respecter (2.71).

En résumé, les règles de sélection proviennent du fait que le vide de Bogoliubov contient un certain nombre de fermions de type b qui dépendent du champ λ et de la loi de conservation (2.71). Ajouter un mauvais nombre d'excitations peut faire quitter le système du sous-espace de parité auquel appartient l'état d'énergie

minimale, menant ainsi à des énergies non physiques. Les 2^N énergies propres de la chaîne d'Ising quantique (2.61) s'obtiennent en ajoutant un nombre fixé d'excitations à l'énergie fondamentale et en prenant en compte les prescriptions sur le nombre d'excitations

$$E_{\vec{n}} = \sum_{p=0}^{N-1} \left(n_p - \frac{1}{2} \right) \Lambda_{k_p}, \quad \vec{n} = (n_0, n_1, \dots, n_{N-1}), \quad (2.88)$$

avec $n_p = 0, 1$ et Λ_k donné par (2.81). Chaque secteur de parité apporte la moitié du spectre. Par souci de clarté, nous adopterons dans la suite la notation $\Lambda_p \equiv \Lambda_{k_p}$. La forme des impulsions k_p dépend des conditions aux bords, i.e. du secteur de parité. Par exemple, pour N pair et $\lambda \leq 1$ le nombre d'excitations que l'on doit ajouter au fondamental doit être pair dans chaque secteur de parité et vérifier

$$\prod_{n=0}^{N-1} (2n_p - 1) = 1. \quad (2.89)$$

Ces règles de sélection sont expliquées en détail dans l'Annexe C et résumées dans la table ci-dessous et dans les figures 2.5 et 2.6.

N pair	$\mathcal{P} = -1$ $k_p = \frac{2p\pi}{N} - \pi$	$\mathcal{P} = +1$ $k_p = (2p+1)\frac{\pi}{N} - \pi$
$\lambda \leq 1$	# Excitations pairs $\prod_{p=0}^{N-1} (2n_p - 1) = +1$	# Excitations pairs $\prod_{p=0}^{N-1} (2n_p - 1) = +1$
$\lambda > 1$	# Excitations impairs $\prod_{p=0}^{N-1} (2n_p - 1) = -1$	# Excitations pairs $\prod_{p=0}^{N-1} (2n_p - 1) = +1$

TABLE 2.1 – Nombre d'excitations nécessaires pour reconstruire le spectre du modèle d'Ising en champ transverse λ dans les différents secteurs de parité.

2.3.3 Retour sur le comportement critique

La diagonalisation du Hamiltonien d'Ising en champ transverse s'effectue dans deux secteurs de parité apportant chacun la moitié du spectre. Les énergies propres s'obtiennent en ajoutant des excitations à l'énergie du vide de Bogoliubov dans chaque secteur. L'énergie des excitations est donnée par (2.81) et les impulsions de ces excitations sont quantifiées différemment suivant le secteur de parité. La structure du vide de Bogoliubov ainsi que la conservation de la parité mènent à des règles de sélections spéciales pour la construction des niveaux d'énergies. Dans la figure 2.5, nous présentons de manière schématique la méthode de construction des niveaux pour $\lambda \leq 1$. Nous précisons qu'une figure analogue est présentée dans [Ber93] mais est incorrecte car elle ne prend pas en compte les règles de sélection dans les différents secteurs de parité. Dans chaque secteur, les N excitations permettent de reconstruire 2^N niveaux dont seul la moitié coïncide avec les énergies propres du modèle d'Ising. Les états retenus sont ceux qui respectent les règles de construction présentées dans la table 2.1. Dans la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$, les énergies $E_0^{(\mathcal{P})}$ deviennent égales⁹ dans les deux secteurs de parité et pour $\lambda \leq 1$ le spectre devient double dégénéré reflétant ainsi la symétrie $\mathbb{Z}_2$ de la phase paramagnétique que nous avons vue précédemment en étudiant la limite $\lambda \ll 1$. Pour $\lambda > 1$, la dégénérescence est levée puisque les règles de construction des niveaux dans les secteurs de parité $\mathcal{P} = \pm 1$ sont différentes (voir table 2.1 et figure 2.6). La brisure de la symétrie $\mathbb{Z}_2$ est la signature d'une transition de phase quantique en $\lambda = 1$. Nous retrouvons ainsi la position du point critique du modèle d'Ising quantique. Nous savons aussi que la longueur de corrélation devient infinie au point critique et que, de ce fait, le gap spectral se referme. Le gap spectral correspond à l'intervalle d'énergie entre le premier état excité et le fondamental. L'énergie fondamentale se trouve toujours dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$. Pour $\lambda \leq 1$, les énergies se construisent dans ce secteur en ajoutant un nombre

9. Les impulsions des excitations dans les secteurs de parité $\mathcal{P} = \pm 1$ deviennent effectivement égales dans cette limite. Autrement dit, les conditions aux bords ne jouent plus de rôle dans la limite thermodynamique, ce qui est naturel.

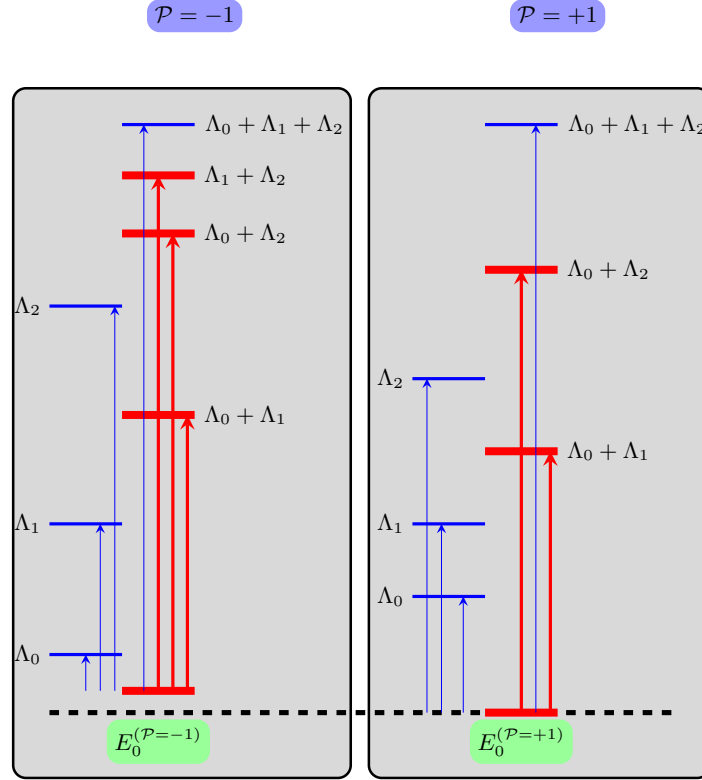


FIGURE 2.5 – Construction du spectre du Hamiltonien d'Ising en champ transverse pour $\lambda \leq 1$ et pour un nombre de spins N pair. Seuls les états avec un nombre d'excitations pair sont retenus et correspondent aux niveaux en rouge. Les niveaux bleus ne sont pas des états physiques car construits avec le mauvais nombre d'excitations. Chaque secteur de parité apporte la moitié du spectre.

pair d'excitations d'impulsions de la forme (2.76) (voir table 2.1). Dans la limite thermodynamique, le premier état excité est obtenu en ajoutant les deux excitations d'énergies minimales à l'énergie fondamentale

$$E_1 = E_0^{(\mathcal{P}=+1)} + \Lambda_0 + \Lambda_1. \quad (2.90)$$

Il vient donc que pour $\lambda \leq 1$, le gap est donné par

$$\Delta_{<} = \Lambda_0 + \Lambda_1. \quad (2.91)$$

Comme dans la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$, on a $\Lambda_0 \simeq \Lambda_1$, il vient que le gap s'écrit

$$\Delta_{<} = 2\Lambda_0 = 4|1 - \lambda|. \quad (2.92)$$

Pour $\lambda > 1$, la méthode de construction des niveaux d'énergies est différente. En particulier, dans le secteur de parité $\mathcal{P} = -1$, les niveaux s'obtiennent en ajoutant maintenant un nombre impair d'excitations. Comme le montre la figure 2.6, l'état $E_0^{(\mathcal{P}=-1)}$ n'est plus un état physique (contrairement au cas $\lambda \leq 1$) puisqu'il a été construit avec un nombre pair d'excitations fermioniques. De ce fait, il apparait clairement que dans la limite thermodynamique le gap spectral est donné par

$$\Delta_{>} = \Lambda_0 = 2|\lambda - 1|, \quad \lambda > 1. \quad (2.93)$$

Dans les deux cas, $\lambda \leq 1$ et $\lambda > 1$, le gap spectral s'annule en $\lambda_c = 1$ dans la limite thermodynamique. Ces résultats sont en accord avec les arguments que nous avons développé précédemment dans les limites de petit et grand champ λ . On retrouve aussi le résultat obtenu par Kramers et Wannier par des arguments de dualité dans le cas du modèle d'Ising classique bidimensionnel [KW41].

2.4 Densité d'états du modèle d'Ising

Maintenant que nous savons calculer les 2^N états d'énergies de la chaîne de spins, nous nous intéressons au calcul de la densité spectrale

$$\rho(E) \equiv \frac{1}{2^N} \sum_{\{\vec{n}\}} \delta(E - E_{\vec{n}}), \quad (2.94)$$

avec

$$E_{\vec{n}} = \sum_{p=0}^{N-1} \left(n_p - \frac{1}{2} \right) \Lambda_{k_p}, \quad \vec{n} = (n_0, n_1, \dots, n_{N-1}), \quad n_p = 0, 1. \quad (2.95)$$

La parité du nombre d'excitations dépend de la valeur du champ λ et doit suivre les prescriptions que nous avons détaillées plus haut. Dans la suite, nous développerons nos idées pour $\lambda \leq 1$ et pour N pair mais la généralisation à $\lambda > 1$ est quasi-immédiate. Par définition, la densité d'états est donnée par la transformée de Laplace inverse de la fonction de partition

$$\rho(E) = \frac{1}{2i\pi} \int_{-i\infty}^{i\infty} Z_N(\beta) e^{\beta E} d\beta, \quad (2.96)$$

avec

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{2^N} \sum_{\{\vec{n}\}} e^{-\beta E_{\vec{n}}}. \quad (2.97)$$

D'après la discussion faite dans la section précédente, nous devons sommer uniquement sur les configurations telles que

$$\mathfrak{P} = \prod_{p=0}^{N-1} (2n_p - 1) = 1, \quad (2.98)$$

correspondant à un nombre pair d'excitations dans chacun des secteurs de parité $\mathcal{P} = \pm 1$. La fonction de partition peut donc être écrite comme la somme des contributions des énergies propres dans chacun des secteurs $\mathcal{P} = \pm 1$

$$Z_N(\beta) = Z_N^+(\beta) + Z_N^-(\beta) \quad (2.99)$$

avec

$$Z_N^{\pm}(\beta) = \frac{1}{2^N} \sum'_{\{\vec{n}\}} \exp \left(-\beta E_{\vec{n}}^{(\mathcal{P}=\pm 1)} \right). \quad (2.100)$$

La somme primée indique la somme sur les configurations vérifiant la contrainte (2.98). Les énergies $E_{\vec{n}}^{(\mathcal{P}=\pm 1)}$ correspondent aux énergies dans les différents secteurs de parité¹⁰ et se construisent en utilisant la formule (2.95). La dépendance dans le secteur de parité est cachée dans la forme des impulsions k des excitations (voir équations (2.76) et (2.77)). Il est facile de voir que

$$\sum'_{\{\vec{n}\}} (\dots) = \frac{1}{2} \sum_{\{\vec{n}\}} (\dots) (1 + \mathfrak{P}) \quad (2.101)$$

où la deuxième somme n'est plus contrainte. Une manière de prendre en compte la contrainte (2.98) consiste à noter que $\ln(2n_p - 1) = -i\pi(n_p - 1)$, il vient alors

$$\mathfrak{P} = \exp \left(-i\pi \sum_{p=0}^{N-1} (n_p - 1) \right). \quad (2.102)$$

Il s'ensuit que les fonctions de partition contraintes s'écrivent

$$Z_N^{\pm}(\beta) = \frac{1}{2^{N+1}} \sum_{\{\vec{n}\}} e^{-\beta E_{\vec{n}}^{(\pm)}} \left(1 + e^{-i\pi \sum_{p=0}^{N-1} (n_p - 1)} \right), \quad (2.103)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\prod_{p=0}^{N-1} \cosh \left(\frac{\beta}{2} \Lambda_p^{(\pm)} \right) + \prod_{p=0}^{N-1} \sinh \left(\frac{\beta}{2} \Lambda_p^{(\pm)} \right) \right) \quad (2.104)$$

10. Nous utiliserons la notation $E_{\vec{n}}^{(\mathcal{P}=\pm 1)} = E_{\vec{n}}^{(\pm)}$ pour alléger les équations.

avec

$$\begin{cases} \Lambda_p^{(+)} &= 2\sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos\left((2p+1)\frac{\pi}{N}\right)}, \\ \Lambda_p^{(-)} &= 2\sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos\left(2p\frac{\pi}{N}\right)}. \end{cases} \quad (2.105)$$

2.4.1 Densité spectrale asymptotique et méthode du col

Dans la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$, les conditions aux bords qui sont à l'origine de la différence de quantification des impulsions des excitations dans les différents secteurs de parité ne jouent plus de rôle et $\Lambda_p^{(+)} = \Lambda_p^{(-)} \equiv \Lambda_p$ (i.e. $(2p+1)\frac{\pi}{N} \simeq 2p\frac{\pi}{N}$). Il vient alors que la fonction de partition est donnée par

$$Z_N(\beta) = \prod_{p=0}^{N-1} \cosh\left(\frac{\beta}{2}\Lambda_p\right) + \prod_{p=0}^{N-1} \sinh\left(\frac{\beta}{2}\Lambda_p\right). \quad (2.106)$$

En écrivant les produits comme

$$\prod_{p=0}^{N-1} \cosh\left(\frac{\beta}{2}\Lambda_p\right) = \exp\left(\sum_{p=0}^{N-1} \ln \cosh\left(\frac{\beta}{2}\Lambda_p\right)\right), \quad (2.107)$$

$$\prod_{p=0}^{N-1} \sinh\left(\frac{\beta}{2}\Lambda_p\right) = \exp\left(\sum_{p=0}^{N-1} \ln \sinh\left(\frac{\beta}{2}\Lambda_p\right)\right), \quad (2.108)$$

et en remplaçant les sommes par des intégrales¹¹, on obtient

$$\begin{aligned} Z_N(\beta) = & \exp\left(\frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln\left(\cosh(\beta\sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u})\right) du\right) \\ & + \exp\left(\frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln\left(\sinh(\beta\sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u})\right) du\right). \end{aligned} \quad (2.109)$$

On peut montrer que la contribution du second terme est négligeable devant le premier dans la limite thermodynamique puisque $\cosh z > \sinh z$ pour toutes valeurs de z finies. Finalement, la fonction de partition du modèle s'écrit

$$Z_N(\beta) = \exp\left(\frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln\left(\cosh(\beta\sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u})\right) du\right). \quad (2.110)$$

Il n'est pas très difficile de montrer que la fonction de partition pour $\lambda > 1$ prend exactement la même forme. Nous utilisons maintenant la transformée de Laplace inverse (2.96) de la fonction de partition pour obtenir la densité d'états

$$\rho(E) = \frac{1}{2i\pi} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{N S(E, \beta)} d\beta, \quad (2.111)$$

où l'entropie du système à la température β est donnée par

$$S(E, \beta) = \beta \frac{E}{N} + \frac{1}{N} \ln Z_N(\beta) = \beta \frac{E}{N} + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln\left(\cosh(\beta\sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u})\right) du. \quad (2.112)$$

Notons qu'il s'agit d'une quantité extensive [Gri04] qui ne dépend que de l'énergie par spin $e = E/N$. Dans la limite thermodynamique, on peut utiliser la méthode du col pour évaluer l'intégrale [BM98, Bet37, GC65, Bri16]. Dans l'Annexe B, nous présentons en détail cette méthode pour des modèles dont le spectre est de type fermionique. En utilisant ces résultats, nous obtenons

$$\rho(E) = \frac{\exp(NS(E, \beta_0))}{\sqrt{2\pi N |S''(E, \beta_0)|}} \quad (2.113)$$

où le point col β_0 est la solution de (voir formule (B.11))

$$\int_0^{2\pi} \sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u} \tanh\left(\beta_0 \sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u}\right) du = -\frac{2\pi E}{N}, \quad (2.114)$$

Pour tracer la solution (2.113), on regarde en pratique ρ comme une fonction de β_0 plutôt que de E . Comme on ne peut pas obtenir de solutions exactes de l'équation du col (2.114), il est intéressant de regarder le comportement de la densité d'états pour $\beta_0 \ll 1$ et $\beta_0 \gg 1$.

11. Plus précisément, nous écrivons $\sum_{n=0}^{N-1} f(n) \simeq \int_0^{N-1} f(u) du$.

Approximation gaussienne dans le “bulk” pour $\beta_0 \ll 1$

Il n'est pas très difficile de voir que la solution de l'équation du col (2.114) pour les petites valeurs de β_0 donne accès au comportement de la densité d'états dans le “bulk”, c'est-à-dire autour de $E \simeq 0$. Développons la fonction $\tanh$ pour les petites valeurs de son argument. Au premier ordre en β_0 , la solution du col s'exprime comme

$$\beta_0 = -\frac{2\pi E}{N \int_0^{2\pi} (1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u) du} = -\frac{E}{N(1 + \lambda^2)}. \quad (2.115)$$

conduisant au comportement gaussien de la densité d'états dans le “bulk”

$$\rho_G(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N(1 + \lambda^2)}} \exp\left(-\frac{E^2}{2N(1 + \lambda^2)}\right). \quad (2.116)$$

Le facteur 2 au dénominateur dans l'exponentielle assure la normalisation de la densité d'états. Dans la figure 2.7, nous avons tracé la densité d'états exacte (2.113) en utilisant la solution numérique exacte de l'équation du col (2.114) et l'approximation gaussienne dans le “bulk” (2.116). Comme on peut le voir, l'approximation gaussienne approche bien le résultat exact.

Comportement de la densité près de l'état fondamental

On peut obtenir le comportement de la densité d'états pour $E \simeq E_0$ en étudiant la limite $\beta_0 \rightarrow +\infty$. Développons à cet effet l'équation du col (2.114) autour de $\beta_0 \rightarrow +\infty$, on a en première approximation

$$\int_0^{2\pi} \sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u} \left(1 - 2 \exp\left(-\beta_0 \sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u}\right)\right) du = -\frac{2\pi E}{N}. \quad (2.117)$$

Dans la limite thermodynamique, l'énergie fondamentale est donnée par

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda_k = -\frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u} du. \quad (2.118)$$

Il vient donc que

$$E \simeq E_0 + \frac{N}{\pi} \int_0^{2\pi} R(\lambda, u) \exp(-2\beta_0 R(\lambda, u)) du + \text{corrections}, \quad (2.119)$$

où nous avons introduit la notation $R(\lambda, u) = \sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u}$ afin d'alléger les formules. Ceci prouve que la limite $\beta_0 \rightarrow \infty$ donne accès au comportement de la densité d'états près de l'énergie fondamentale.

Comportement au point critique $\lambda = 1$ Développons maintenant les calculs au point critique $\lambda = 1$. On a $R(1, u) = 2 \sin\left(\frac{u}{2}\right)$ et l'équation du col (2.114) se réécrit

$$\frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{4 \sin(u/2) \exp(-4\beta_0 \sin(u/2))}{1 + \exp(-4\beta_0 \sin(u/2))} du = E - E_0. \quad (2.120)$$

Notons que nous n'avons pas fait d'hypothèse sur β_0 pour l'instant, il s'agit juste d'une réécriture de l'équation du col. Pour $\beta_0 \gg 1$, on peut utiliser le développement en série

$$\frac{1}{1 + \exp(-4\beta_0 \sin(u/2))} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \exp(-4n\beta_0 \sin(u/2)) \quad (2.121)$$

et en intervertissant la somme et l'intégrale on obtient

$$E - E_0 = \frac{4N}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\pi} \sin(u/2) \exp(-4(n+1)\beta_0 \sin(u/2)) du. \quad (2.122)$$

Le terme $n = 0$ de cette équation redonne (2.119). Le calcul de l'intégrale ne pose pas de problème particulier et on trouve finalement que le point col est donné par

$$\beta_0 = \sqrt{\frac{N\pi}{24(E - E_0)}} \quad (2.123)$$

qui est bien large devant 1 puisque $E \rightarrow E_0$. L'entropie (2.112) s'exprime quant à elle comme

$$S(E, \beta_0) = \frac{\beta_0}{N}(E - E_0) - \ln 2 + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left(1 + e^{-4\beta_0 \sin(u/2)} \right) du. \quad (2.124)$$

Dans la figure 2.8, nous avons tracé la forme de l'intégrant $f(x) = \ln(1 + e^{-4\beta_0 \sin(x/2)})$ apparaissant dans l'expression de l'entropie (2.124) pour les valeurs de β_0 finies. Comme on peut l'observer, dans la limite $\beta_0 \gg 1$, la contribution majeure à l'intégrale provient des points près de l'origine. Pour les petites valeurs de son argument, la fonction $f(x)$ se comporte comme $g(x) = \ln(1 + e^{-2\beta_0 x})$. Dans l'encadré de la figure 2.8, nous avons tracé la différence $f(x) - g(x)$ pour les valeurs de $\beta_0 = 6$ et $\beta_0 = 10$. Il apparaît clairement que la fonction $g(x)$ est une bonne approximation de la fonction $f(x)$ dans la limite $\beta_0 \gg 1$. De plus, comme l'intégrant est une fonction décroissant extrêmement vite, on peut remplacer les bornes de l'intégrale et étendre l'intégration à l'axe réel. On a

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\pi \ln \left(1 + e^{-4\beta_0 \sin(u/2)} \right) du = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \ln \left(1 + e^{-2\beta_0 u} \right) du \quad (2.125)$$

Pour $\beta_0 \gg 1$, on peut développer le logarithme en série entière pour obtenir

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \ln \left(1 + e^{-2\beta_0 u} \right) du = \frac{1}{\beta_0 \pi} \sum_{n=1}^\infty \frac{(-1)^n}{n} \int_0^\infty e^{-2nw} dw = \frac{\pi}{24\beta_0}. \quad (2.126)$$

Il vient alors la forme suivante pour l'entropie

$$S(E, \beta_0) = \frac{\beta_0}{N}(E - E_0) - \ln 2 + \frac{\pi}{24\beta_0}. \quad (2.127)$$

En remplaçant par l'expression du point col (2.123), on trouve finalement que

$$S(E, \beta_0) = \sqrt{\frac{\pi(E - E_0)}{6N}} - \ln 2. \quad (2.128)$$

Il ne nous reste plus qu'à calculer la dérivée seconde de l'entropie au point col pour utiliser (2.113) et ainsi obtenir une approximation de la densité d'états près de l'état fondamental. En utilisant la même astuce que précédemment pour le calcul des intégrales, on montre que la dérivée seconde de l'entropie est donnée par

$$S''(E, \beta_0) = \frac{16}{\pi} \int_0^\pi \frac{\sin^2(u/2) e^{-4\beta_0 \sin(u/2)}}{(1 + e^{-4\beta_0 \sin(u/2)})^2} du = \frac{\pi}{12\beta_0^3}. \quad (2.129)$$

Le comportement de la densité d'états est finalement donné par

$$\rho(E) = 2^{-N} Q^{-3/4} \left(8\sqrt{6\pi N} \right)^{-1/2} \exp \left(\sqrt{\frac{\pi N Q}{6}} \right). \quad (2.130)$$

où $Q = (E - E_0)$ mesure l'énergie par rapport au fondamental. Notons la ressemblance avec le résultat de Bethe (2.3) pour la densité d'états des noyaux lourds.

Retour sur l'approximation gaussienne

Le comportement gaussien dans le "bulk" peut être retrouvé en faisant appel au théorème de la limite centrale comme nous l'avons vu dans l'introduction de ce chapitre. La connaissance du résultat exact n'est donc pas nécessaire puisqu'il suffit de calculer les deux premiers moments du Hamiltonien pour pouvoir caractériser la distribution gaussienne. Considérons donc les moments normalisés du Hamiltonien d'Ising (2.61) définis par

$$\langle H^k \rangle = \frac{1}{2^N} \text{Tr}(H^k). \quad (2.131)$$

Le Hamiltonien d'Ising peut s'écrire comme la somme de deux contributions, $\hat{H} = \hat{H}_I + H_{II}$ avec

$$\hat{H}_I = - \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x \quad \text{et} \quad \hat{H}_{II} = -\lambda \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^z. \quad (2.132)$$

Seul le terme $\hat{H}_{II}$ peut potentiellement donner une contribution au premier moment du Hamiltonien puisque le terme $\hat{H}_I$ retourne les spins adjacents menant de ce fait à des éléments non diagonaux. On a donc

$$\langle H \rangle = -\frac{\lambda}{2^N} \sum_{\{\vec{\sigma}\}} \sum_{n=0}^{N-1} \langle \vec{\sigma} | \hat{\sigma}_n^z | \vec{\sigma} \rangle. \quad (2.133)$$

Or, les états $|\vec{\sigma}\rangle$ sont des états propres de l'opérateur $\hat{\sigma}_n^z$. Il s'ensuit que

$$\langle H \rangle = -\frac{\lambda}{2^N} \sum_{\sigma_0=\pm 1} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_{N-1}=\pm 1} (\sigma_0 + \sigma_1 + \cdots + \sigma_{N-1}) = 0. \quad (2.134)$$

Pour le moment d'ordre deux, les deux termes du Hamiltonien apportent une contribution. En développant le carré, on a

$$(\hat{H}_I + \hat{H}_{II})^2 = \hat{H}_I^2 + \hat{H}_I \hat{H}_{II} + \hat{H}_{II} \hat{H}_I + \hat{H}_{II}^2. \quad (2.135)$$

Les termes croisés n'apportent pas de contribution en raison de la présence d'une puissance impaire de l'opérateur $\hat{H}_I$ qui retourne les spins. Considérons le terme $\hat{H}_I^2$ appliqué à une configuration $|\vec{\sigma}\rangle$, on a

$$\hat{H}_I^2 |\vec{\sigma}\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} (\hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x)^2 |\vec{\sigma}\rangle + \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{N-1} \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x \hat{\sigma}_m^x \hat{\sigma}_{m+1}^x |\vec{\sigma}\rangle. \quad (2.136)$$

Le second terme engendre des configurations orthogonales à $|\vec{\sigma}\rangle$ et n'apporte pas de contribution au calcul de la trace. Comme $(\hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x)^2 = \mathbb{1}$, on a

$$\langle H_I^2 \rangle = N. \quad (2.137)$$

Le terme $\hat{H}_{II}^2$ donne quant à lui

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_{II}^2 \rangle &= \frac{\lambda^2}{2^N} \sum_{\{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'\}} \sum_{n,m} \langle \vec{\sigma} | \hat{\sigma}_n^z | \vec{\sigma}' \rangle \langle \vec{\sigma}' | \hat{\sigma}_n^z | \vec{\sigma} \rangle, \\ &= \frac{\lambda^2}{2^N} \sum_{\{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'\}} \langle \vec{\sigma} | \vec{\sigma}' \rangle \sum_{n,m} \sigma_n \sigma'_m. \end{aligned} \quad (2.138)$$

La base des états $\{|\vec{\sigma}\rangle\}$ étant orthonormée, on a

$$\langle \hat{H}_{II}^2 \rangle = \frac{\lambda^2}{2^N} \sum_{\{\vec{\sigma}\}} \left(\sum_n \sigma_n \right)^2. \quad (2.139)$$

Il est facile de voir que pour une configuration donnée $|\vec{\sigma}\rangle$, on a $\sum_n \sigma_n = (N - 2n_\uparrow)$ où $n_\uparrow$ correspond au nombre de spins *up* dans la configuration $|\vec{\sigma}\rangle$. On peut donc transformer la somme sur les configurations par une somme sur les configurations avec un nombre de spins *up* fixé

$$\langle \hat{H}_{II}^2 \rangle = \frac{\lambda^2}{2^N} \sum_{n_\uparrow=0}^N C_N^{n_\uparrow} (N - 2n_\uparrow)^2 = N\lambda^2 \quad (2.140)$$

où le coefficient binomial compte le nombre de configurations avec un nombre de spins *up* fixé. Finalement, il vient que le moment d'ordre deux du Hamiltonien est donné par

$$\langle H^2 \rangle = \langle \hat{H}_I^2 \rangle + \langle \hat{H}_{II}^2 \rangle = N(1 + \lambda^2). \quad (2.141)$$

En faisant usage du théorème de la limite centrale et de la formule (2.45), on retrouve que la densité d'états s'exprime comme

$$\rho(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N(1 + \lambda^2)}} \exp\left(-\frac{E^2}{2N(1 + \lambda^2)}\right) \quad (2.142)$$

qui concorde avec le résultat (2.116) trouvé en utilisant la méthode du col. Nous utiliserons cette technique pour le calcul de la densité d'états d'un modèle de chaîne de spins non-intégrable.

Résultats numériques

Dans la figure 2.9, nous présentons les résultats numériques obtenus par diagonalisation exacte pour la densité d'états du modèle d'Ising en champ transverse. L'approximation gaussienne pour des valeurs de champ λ autour du point critique $\lambda = 1$ colle parfaitement aux résultats numériques. Avant d'aller plus loin dans l'étude des propriétés de la densité d'états du modèle d'Ising avec l'apparition de comportements plus riches, nous nous attardons sur un travail récent de Keating *et al.* sur la densité spectrale des chaînes de spins quantiques aléatoires [KLW14a]. En particulier, nous présentons un de leurs résultats sur la densité de niveaux asymptotiques en accord avec nos résultats.

2.4.2 Un résultat de Keating *et al.* sur les chaînes de spins aléatoires

Dans un article récent [KLW14a], les auteurs introduisent un ensemble de matrices aléatoires construit à l'aide des matrices de Pauli

$$\hat{H}_N(\{\alpha\}) = \sum_{j=1}^N \sum_{a,b=1}^3 \alpha_{a,b,j} \hat{\sigma}_j^a \hat{\sigma}_{j+1}^b \quad (2.143)$$

où les $9N$ variables $\{\alpha\}$ sont des variables aléatoires normales de moyenne nulle et de variance $\sigma_N^2 = \frac{1}{9N}$. Les opérateurs $\hat{\sigma}_j^a$ avec $a = 1, 2, 3$ sont les opérateurs de Pauli au site j

$$\hat{\sigma}^1 \equiv \hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^2 \equiv \hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^3 \equiv \hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

avec des conditions aux bords périodiques $\hat{\sigma}_{j+N}^a = \hat{\sigma}_j^a$. Ces matrices décrivent l'interaction entre plus proches voisins de spins $1/2$ sur une chaîne périodique. Une étude numérique d'ensembles de matrices analogues a été effectuée dans [PPMS08]. Dans [KLW14a], Keating *et al.* se sont intéressés au comportement de la densité d'état

$$\rho_N(E) = \left\langle \frac{1}{2^N} \sum_{k=1}^{2^N} \delta(E - E_k) \right\rangle \quad (2.144)$$

où les E_k désignent les valeurs propres de H_N et les crochets correspondent à la moyenne sur les réalisations des variables aléatoires $\{\alpha\}$. La fonction caractéristique

$$\psi_N(t) = \left\langle \frac{1}{2^N} \text{Tr} e^{itH_N} \right\rangle = \langle Z_N(-it) \rangle \quad (2.145)$$

correspond à la moyenne sur les fonctions de partition (2.97) avec $\beta = -it$. Il s'agit donc de la transformée de Fourier de la densité d'états¹². Le résultat suivant sur la convergence de la fonction caractéristique est prouvé dans [KLW14a]. Pour $N \in 2\mathbb{N}^+$, la fonction caractéristique converge vers une loi normale standard¹³ dans la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$

$$\left| \psi_N(t) - e^{-\frac{t^2}{2}} \right| \leq \frac{t^2(4\sqrt{2} + 9)}{\sqrt{N}}. \quad (2.146)$$

En terme de densité d'états, ce résultat s'écrit

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^x \rho_{2N}(E) dE = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{E^2}{2}} dE. \quad (2.147)$$

traduisant la convergence vers une loi normale standard. Bien qu'il n'y ait pas de composante aléatoire dans notre problème, ce résultat est en accord avec ce que nous avons obtenu en (2.116). Nous retrouvons également la vitesse de convergence en $1/\sqrt{N}$ vers la loi gaussienne pour la densité d'état d'un modèle de chaîne de spins non intégrable. Dans la limite thermodynamique, la densité d'états des modèles de spins à courte portée semble converger vers une loi normale notamment en raison du théorème de la limite centrale.

12. Dans notre cas, la fonction de partition correspondait à la transformée de Laplace de la densité d'états.

13. C'est-à-dire une loi gaussienne de moyenne nulle et variance unité.

2.5 Apparition de pics dans la densité d'états et échec de l'approximation gaussienne

En regardant le comportement de la densité d'états pour les valeurs de $\lambda \leq 1$, on peut se rendre compte de l'apparition de pics prononcés que l'on ne peut pas décrire par l'approximation gaussienne (2.116). Par exemple, dans la figure 2.10, nous présentons les résultats numériques obtenus par diagonalisation exacte d'une chaîne de $N = 14$ spins pour différentes valeurs du champ $\lambda = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$. Comme on peut le voir, des pics apparaissent pour les petites valeurs de λ et la description par la gaussienne ne tient plus. Si on trace tout de même l'approximation gaussienne, on observe qu'elle donne le comportement moyen des pics. La présence des pics devient moins prononcée pour des valeurs de champ λ proches de la valeur critique $\lambda = 1$, les pics commencent alors à se recouvrir et la densité d'états est de nouveau bien décrite par l'approximation gaussienne (voir figure 2.9). Il est clair que la présence des pics est liée à des dégénérescences dans le spectre du Hamiltonien. Afin d'obtenir une description des pics, il faut aller au-delà de l'approximation gaussienne. On propose tout d'abord d'étudier les cas limites $\lambda \ll 1$ et $\lambda \gg 1$ qui vont nous être d'une grande utilité et nous permettre d'obtenir une interprétation physique simple des pics dans la densité d'états.

2.5.1 Cas où $\lambda \rightarrow 0$

Dans cette limite, le Hamiltonien se réduit à $\hat{H}_I$ et le spectre des excitations fermioniques (2.81) est donné par

$$\Lambda_k = 2, \quad \forall k \quad (2.148)$$

Il vient alors que les énergies propres sont données par

$$E_{\vec{n}} = \sum_{p=0}^{N-1} (2n_p - 1) \equiv E_{\vec{\sigma}} = \sum_{p=0}^{N-1} \sigma_p, \quad \vec{\sigma} = (\sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}), \quad (2.149)$$

avec $\sigma_p = \pm 1$ suivant que le spin au site p de la configuration $\vec{\sigma}$ est *up* ou *down*. Ici nous avons utilisé la paramétrisation des énergies en termes des configurations de la chaîne de spins¹⁴. La somme est contrainte aux configurations telles que le nombre d'excitations $\sum_p n_p = \sum_p (1 + \sigma_p)/2$ est pair puisque $\lambda < 1$. Par conséquent, la contrainte est équivalente à sommer sur les configurations avec un nombre de spins *up* pair. Sans la contrainte, il est facile de voir que la somme $\sum_p \sigma_p$ est égale à $2n_{\uparrow} - N$. Par conséquent, il vient que les énergies s'expriment comme

$$E_k = 4k - N, \quad k = 0, 1, \dots, N/2, \quad (2.150)$$

avec $n_{\uparrow} = 2k$ le nombre de spins *up*. Chaque énergie E_k est dégénérée $C_N^{n_{\uparrow}} = C_N^{2k}$ fois, correspondant au nombre de configurations avec $n_{\uparrow}$ spins *up*. Il s'ensuit que le spectre d'énergie est constitué de pics aux positions E_k données par (2.150) avec un poids $C_N^{2k}/2^N$. On peut obtenir ce résultat en calculant la transformée de Laplace inverse de la fonction de partition. En effet, d'après (2.106) la fonction de partition s'écrit

$$Z_N(\beta) = \cosh^N(\beta) + \sinh^N(\beta). \quad (2.151)$$

La densité s'exprime alors comme

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \frac{1}{2i\pi} \int_{-i\infty}^{i\infty} e^{\beta E} \left(\cosh^N(\beta) + \sinh^N(\beta) \right) d\beta, \\ &= \frac{1}{2^{N-1}} \sum_{k=0}^{N/2} C_N^{2k} \frac{1}{2i\pi} \int_{-i\infty}^{i\infty} e^{\beta(E+N-4k)} d\beta, \\ &= \frac{1}{2^{N-1}} \sum_{k=0}^{N/2} C_N^{2k} \delta(E + N - 4k). \end{aligned} \quad (2.152)$$

La deuxième ligne a été obtenue en utilisant le développement d'Euler des fonctions hyperboliques et le théorème binomial. On retrouve ainsi que les niveaux d'énergies de la chaîne de spins avec $\lambda = 0$ sont donnés par $E_k = 4k - N$. Ceux-ci sont dégénérés C_N^{2k} fois avec $k = 0, 1, \dots, N/2$.

14. Ces configurations n'ont rien à voir avec les états propres du Hamiltonien : il s'agit juste d'une paramétrisation très utile.

Analogie avec les marches aléatoires

Comme nous l'avons noté précédemment, les énergies de la chaîne de spins peuvent être vues comme des réalisations de processus aléatoires. Cet argument, en plus du fait que les énergies des systèmes intégrables satisfont la statistique de Poisson, nous a permis d'utiliser le théorème de la limite centrale pour prouver que les densités d'états des modèles intégrables¹⁵ convergeaient vers la loi normale dans la limite thermodynamique. L'analogie avec un processus aléatoire est en fait facile à voir dans le cas $\lambda = 0$ (et aussi le cas $\lambda \gg 1$). En effet, chaque énergie de la chaîne de spins peut être associée à la réalisation d'une marche aléatoire 1D contrainte de faire un nombre de pas de parité définie dans une direction. Ceci est beaucoup plus clair et évident si nous réécrivons les niveaux d'énergies comme

$$E_{\vec{n}} = \sum_{p=0}^{N-1} (2n_p - 1) = \sum_{p=0}^{N-1} X_p, \quad (2.153)$$

avec $X_p = \pm 1$ et où la somme est contrainte aux configurations telles que $\sum_p n_p$ est pair. La contrainte se traduit par un nombre pair de pas dans la direction $+1$. Le nombre total de réalisations de longueur N est 2^N . La moitié de ces réalisations est constituée d'un nombre pair de pas dans la direction positive, soit 2^{N-1} . La probabilité d'observer une réalisation avec $2k$ pas dans une direction est donc donnée par $C_N^{2k}/2^{N-1}$ où C_N^{2k} est le nombre de manières de choisir un nombre pair de pas dans la direction positive. Après $2k$ pas dans la direction positive, l'énergie (où, de manière équivalente, la distance parcourue par le marcheur) est donnée par $E_k = 4k - N$ et on retrouve ainsi la loi (2.152).

2.5.2 Limite $\lambda \rightarrow \infty$

Dans cette limite, le Hamiltonien est donné par H_{II} et il est très facile de voir que les énergies propres de celui-ci sont paramétrisées par le nombre de spins up

$$E_{n_{\uparrow}} = \lambda(N - 2n_{\uparrow}), \quad n_{\uparrow} = 0, 1, \dots, N. \quad (2.154)$$

Chaque énergie est dégénérée $C_N^{n_{\uparrow}}$ fois correspondant au nombre de configurations avec $n_{\uparrow}$ spins up . Il s'ensuit que la densité d'états présente des pics aux positions $E_{n_{\uparrow}}$ avec une hauteur $C_N^{n_{\uparrow}}/2^N$

$$\rho(E) = \frac{1}{2^N} \sum_{n=0}^N C_N^n \delta(E - \lambda(N - 2n)). \quad (2.155)$$

2.5.3 Origine des pics

D'après l'étude que nous venons de faire dans les limites de couplage faible et fort au champ magnétique λ , on peut dire que la structure en pics de la densité d'états est reliée aux fortes dégénérescences des niveaux d'énergies qui apparaissent dans ces limites. Nous avons aussi vu que chaque pic est indexé par le nombre $n_{\uparrow}$ de spins up qui, non seulement fixe la position des pics, mais aussi leurs hauteurs. Sur la figure 2.12, nous avons tracé la densité d'états obtenue par diagonalisation exacte pour $N = 14$ spins pour les valeurs de champ $\lambda = 0$ et $\lambda = 50 \gg 1$.

Dans le cas où $\lambda = 0$, il existe $N/2 + 1$ pics et deux pics consécutifs sont séparés d'une distance de 4 unités d'énergie. Les pics se répartissent sur un intervalle d'énergie $2N$. Il s'ensuit que, dans la limite thermodynamique, l'échelle d'observation de la densité (typiquement sur le support de la densité de taille $2N \rightarrow \infty$) ne permet pas de distinguer les pics¹⁶. On observe alors une courbe lisse formée par l'enveloppe des pics. L'enveloppe est bien décrite par l'approximation gaussienne. De la même manière, dans la limite opposée de grand champ λ , il existe $N + 1$ pics et deux pics consécutifs sont séparés de 2λ . Il vient donc que dans la limite thermodynamique et pour des valeurs finies mais grandes du champ λ , la densité est bien approximée par une loi gaussienne.

L'échec de l'approximation gaussienne est donc en grande partie due à l'apparition de dégénérescences dans le spectre dans certaines limites de couplage mais aussi au fait qu'en pratique, la limite thermodynamique n'est pas atteignable dans les simulations numériques. Comme nous l'avons remarqué dans l'étude numérique des

15. Notre argument ne s'applique qu'aux modèles dont le spectre s'obtient par remplissage de niveaux individuels fermioniques ou bosoniques.

16. Les pics seraient théoriquement visibles à n'importe quelles échelles si la distance entre deux pics successifs était de l'ordre de N .

chaînes de spins (voir Chapitre 1), la diagonalisation exacte est limitée par la taille des systèmes. En pratique, la taille de chaîne de spins maximale que l'on peut atteindre est de l'ordre de $N = 20$. Il s'ensuit que dans les limites de faible et fort couplage au champ λ , les pics seront toujours observables pour les valeurs de tailles de chaîne de spins atteignables.

2.6 Approximations multi-gaussiennes

On peut maintenant se demander si ces pics seront présents dans le cas de valeurs finies du champ λ où les deux termes du Hamiltonien H_I et H_{II} jouent tous les deux un rôle important. La réponse est évidemment oui comme le prouvent les figures 2.10. De manière assez intuitive, on peut comprendre que pour des valeurs finies du paramètre λ , les pics vont s'étaler et prendre une structure autour des valeurs $E_{n\uparrow}$ obtenues dans les cas limites. Nous supposons que ces pics s'étalent de manière gaussienne. Cette hypothèse et les résultats qui en découlent sont à l'origine de ce que nous avons appelé approximation multi-gaussiennes de la densité d'états. Cette technique simple est basée sur le calcul de la position $\langle E \rangle_n$ des gaussiennes centrées autour du pic n et de la variance $\sigma_n^2 = \langle E^2 \rangle_n - \langle E \rangle_n^2$ associées. Le résultat sur la densité d'états s'exprime alors comme une somme sur les densités gaussiennes de chaque pic

$$\rho(E) = \sum_n g(n) \rho_n(E), \quad (2.156)$$

où $g(n)$ est relié à la dégénérescence du pic n et

$$\rho_n(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} \exp\left(-\frac{(E - \langle E \rangle_n)^2}{2\sigma_n^2}\right) \quad (2.157)$$

est l'approximation gaussienne du pic. Comme chaque pic est indexé par le nombre $n_{\uparrow} \equiv n$ de spins *up*, il vient que les paramètres de chaque gaussienne s'obtiennent en calculant les deux premiers moments du Hamiltonien de Ising dans les sous-espaces avec un nombre n de spins *up* fixé

$$\langle H^k \rangle_n = \frac{1}{C_N^n} \text{Tr}_n(H^k). \quad (2.158)$$

Tr_n indique la trace sur les états avec un nombre de spins *up* fixé à n . Nous n'utiliserons pas cette technique pour obtenir les deux premiers moments du Hamiltonien. Les détails de cette méthode, basée sur des arguments combinatoires, sont donnés dans l'annexe B de notre article [AB14b]. Nous préférons détailler une autre technique qui permet d'obtenir le résultat de manière plus directe mais avec un peu plus de travail.

2.6.1 Méthode de la fonction génératrice

L'idée de la technique repose sur l'observation suivante : la fonction de partition $Z_N(\beta)$ est la fonction génératrice des moments de la distribution d'énergie $\rho(E)$. Afin de vérifier cette proposition, commençons par écrire la fonction de partition comme la transformée de Laplace de la densité d'états

$$Z_N(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta E} \rho(E) dE. \quad (2.159)$$

En développant l'exponentielle en série entière, il vient

$$\begin{aligned} Z_N(\beta) &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \beta^k E^k \rho(E) dE, \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \beta^k \int_{-\infty}^{\infty} E^k \rho(E) dE, \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} m_k \beta^k \end{aligned} \quad (2.160)$$

avec m_k le moment d'ordre k de la densité d'états

$$m_k = \int_{-\infty}^{\infty} E^k \rho(E) dE. \quad (2.161)$$

Comme nous voulons calculer les moments du Hamiltonien dans les sous-espaces avec un nombre de spins up fixé, nous introduisons la fonction de partition

$$Z_N(\beta, x) = \sum_{\{\vec{n}\}} e^{-\beta E_{\vec{n}}} x^{n_0 + \dots + n_{N-1}}, \quad (2.162)$$

où le paramètre x joue le rôle d'un multiplicateur de Lagrange qui va permettre de fixer le nombre d'excitations ou de manière équivalente le nombre de spins up puisque, par la transformation de Jordan Wigner, il existe une bijection entre un spin up et l'occupation d'une orbitale par un fermion. L'idée consiste donc à développer $Z_N(\beta, x)$ en puissance de β

$$Z_N(\beta, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} m_k(x) \beta^k, \quad (2.163)$$

où le moment d'ordre k dépend maintenant du paramètre x . En développant ensuite $m_k(x)$ en puissance de la variable x

$$m_k(x) = \frac{1}{2^N} \sum_{n=0}^N C_N^n \langle E^k \rangle_n x^n, \quad (2.164)$$

on obtient directement les moments $\langle E^k \rangle_n$ (voir formule (2.158)) dans les sous-espaces avec un nombre n de spins up fixé. Le coefficient $C_N^n/2^N$ assure la normalisation du moment d'ordre zéro et, de ce fait, celui de la densité d'états. Pour $x = 1$, on retrouve le moment d'ordre k sans la contrainte sur le nombre de spins

$$m_k \equiv m_k(x = 1) = \frac{1}{2^N} \sum_{n=0}^N C_N^n \langle E^k \rangle_n = \langle E^k \rangle. \quad (2.165)$$

Sans le coefficient de normalisation, nous n'aurions pas $m_0 = 1$. Maintenant, en utilisant la méthode de construction des énergies propres du Hamiltonien d'Ising (2.95), il n'est pas très difficile de montrer que

$$Z_N(\beta, x) = \frac{1}{2^N} e^{\frac{\beta}{2} \sum_p \Lambda_p} \prod_{p=0}^{N-1} (1 + x e^{-\beta \Lambda_p}). \quad (2.166)$$

On rappelle qu'en toute rigueur, il faudrait distinguer les secteurs de parité $\mathcal{P} = \pm 1$ qui donnent une forme différente pour l'impulsion k des excitations. Pour alléger les notations et comme nous nous intéressons en toute fin à la limite thermodynamique, les conditions aux limites qui sont à l'origine de la quantification différente des impulsions des excitations ne sont plus importantes et chaque secteur de parité apporte la même contribution. Nous multiplierons donc le résultat final par deux. Notre stratégie va donc consister à trouver le développement en puissance de β de la fonction de partition (2.166) puis à extraire les moments $m_k(x)$ pour en déduire $\langle E^k \rangle_n$. Les détails des calculs sont donnés dans l'Annexe D. Pour $\lambda < 1$, on trouve que les coefficients devant les puissances paires x^{2r} dans le développement de $m_1(x)$ et $m_2(x)$ sont donnés par

$$\langle E \rangle_r = -\frac{N}{2\pi} \left(1 - \frac{4r}{N}\right) \int_0^{2\pi} (1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u)^{1/2} du, \quad (2.167)$$

$$\sigma_r^2 = \langle E^2 \rangle_r - \langle E \rangle_r^2 = \frac{2r(N-2r)}{N-1} \left[4(1 + \lambda^2) - \frac{1}{\pi^2} \left(\int_0^{2\pi} (1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u)^{1/2} du \right)^2 \right] \quad (2.168)$$

avec l'indice $r = 1, 2, \dots, N/2 - 1$. Il vient que la densité d'états peut s'écrire comme une somme de gaussiennes

$$\rho(E) = 2 \sum_{r=1}^{N/2-1} \frac{C_N^{2r}}{2^N} \frac{\exp\left(-\frac{(E - \langle E \rangle_r)^2}{2\sigma_r^2}\right)}{\sqrt{2\pi\sigma_r^2}}, \quad \lambda < 1 \quad (2.169)$$

où le facteur 2 provient des conditions aux bords périodiques et anti-périodiques et le coefficient $C_N^{2r}/2^N$ traduit la dégénérescence du pics r . Cette formule correspond à l'approximation multi-gaussienne de la densité d'états. Le lecteur attentif aura noté que nous n'avons pas pris en compte les cas $r = 0$ et $r = N/2$ dans la somme sur les pics. Ces deux cas apportent une contribution de type delta (puisque la variance (D.13) s'annule) centré en $\pm E_0$ et de poids $1/2^{N-1}$ avec

$$E_0 = -\frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} (1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u)^{1/2} du \quad (2.170)$$

correspondant à l'énergie du fondamental. Dans la limite thermodynamique, ces deux configurations sont de poids nulles et n'interviennent pas dans la construction de la densité d'états. Dans la figure 2.13, nous comparons le résultat multi-gaussien (2.169) aux résultats numériques obtenus par diagonalisation exacte d'une chaîne de $N = 14$ spins pour différentes valeurs du champ $\lambda < 1$. Comme on peut l'observer, l'accord avec les résultats numériques est excellent.

Notons maintenant que l'approximation multi-gaussienne redonne exactement la formule (2.152) dans le cas extrêmement dégénéré $\lambda = 0$. En effet, pour $\lambda = 0$ la formule (2.167) donne la position des pics en

$$\langle E \rangle_r = E_r = (4r - N) \quad (2.171)$$

et la variance (D.13) s'annule. Comme

$$\lim_{\sigma_r \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_r^2}} \exp\left(-\frac{(E - E_r)^2}{2\sigma_r^2}\right) = \delta(E - E_r). \quad (2.172)$$

on retrouve bien le résultat attendu qui consiste en une somme de pics delta de poids $C_N^{2r}/2^{N-1}$ centrés en E_r .

Un calcul similaire pour $\lambda \geq 1$ où il n'y a plus de contraintes sur le nombre d'excitations, donne l'approximation multi-gaussienne suivante

$$\rho(E) = \sum_{r=0}^N \frac{C_N^r}{2^N} \frac{\exp\left(-\frac{(E - \langle E \rangle_r)^2}{2\sigma_r^2}\right)}{\sqrt{2\pi\sigma_r^2}}, \quad \lambda \geq 1 \quad (2.173)$$

avec cette fois-ci, la position des pics et les variances suivantes

$$\langle E \rangle_r = -\frac{N}{2\pi} \left(1 - \frac{2r}{N}\right) \int_0^{2\pi} (1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u)^{1/2} du, \quad (2.174)$$

$$\sigma_r^2 = \langle E^2 \rangle_r - \langle E \rangle_r^2 = \frac{r(N-r)}{N-1} \left[4(1 + \lambda^2) - \frac{1}{\pi^2} \left(\int_0^{2\pi} (1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u)^{1/2} du \right)^2 \right] \quad (2.175)$$

Observons que la variance s'annule aussi pour $\lambda \gg 1$ correspondant à l'autre limite extrêmement dégénérée que nous avons étudiée précédemment. Comme on peut le voir dans la figure 2.14, l'approximation multi-gaussienne redonne aussi l'approximation gaussienne simple pour les valeurs de champ λ autour de la valeur critique. L'accord avec les résultats numériques est très bon.

2.6.2 Domaine de visibilité des pics

Un critère sur le domaine de visibilité des pics peut être grossièrement estimé en utilisant l'argument

$$|\langle E \rangle_{r+1} - \langle E \rangle_r| > 2\sigma_r \quad (2.176)$$

qui signifie que deux pics successifs peuvent être distingués si la distance qui les sépare est plus grande que la largeur sur laquelle il s'étalent. Dans le centre du spectre, correspondant à $r = N/2$, ce critère se traduit par l'existence d'une valeur de taille de chaîne N_{max} telle que pour tout $N < N_{max}$, les pics restent visibles. On peut montrer que dans les cas limites, on a

$$N_{max} = 2\lambda^2, \quad \lambda \gg 1 \quad \text{et} \quad N_{max} = \frac{8}{\lambda^2}, \quad \lambda \ll 1. \quad (2.177)$$

Pour $N > N_{max}$, les pics se recouvrent et l'approximation gaussienne simple devient adéquate. Par exemple, pour $\lambda = 10$, il faudrait atteindre des tailles de chaîne de spins de l'ordre de $N = 200$ afin d'observer le recouvrement des pics dans le centre du spectre (voir figure 2.15 ci-dessous). En pratique, on observera donc toujours des pics dans la densité puisque la diagonalisation exacte d'une chaîne de spins de cette taille est inatteignable aujourd'hui même avec le plus puissants des ordinateurs.

2.6.3 Récapitulatif

Nous venons d'obtenir un résultat simple qui permet d'approximer la densité d'états du modèle d'Ising pour n'importe quelle valeur de couplage au champ magnétique λ , y compris pour les limites asymptotiques de grands et petits champs. La recherche d'une telle formule a été rendue nécessaire par l'apparition de fortes dégénérescences dans le spectre de la chaîne de spins se traduisant par des pics prononcés dans la densité spectrale et l'échec par l'approximation gaussienne simple. En étudiant les limites de couplage faible et fort au champ transverse λ , nous nous sommes rendu compte que la méthode de construction des niveaux d'énergies permettait de dire que chaque pic pouvait être obtenu en utilisant les configurations $\{|\vec{\sigma}\rangle\}$ de l'espace de Hilbert avec un nombre de spins up fixe. Nous avons ensuite supposé que, pour des valeurs de λ fini, les fluctuations quantiques entraînaient un étalement plus ou moins gaussien des pics autour des positions *classiques* obtenues dans les limites asymptotiques. Il nous était alors suffisant de trouver la position et la variance de chacune de ces gaussiennes pour obtenir une approximation de la densité d'états par sommation sur la position des pics. Les paramètres des différentes gaussiennes ont été obtenus en calculant les deux premiers moments du Hamiltonien dans les sous-espaces avec un nombre de spins up fixe. Finalement, nous avons montré que notre approximation multi-gaussienne était en très bon accord avec les résultats expérimentaux obtenus par diagonalisation numérique. Nous avons donc réussi à donner une bonne description de la limite *mésodynamique*¹⁷.

2.7 Modèle d'Ising non intégrable

La deuxième partie de ce chapitre est consacrée à l'étude du modèle d'Ising en présence de deux champs

$$\hat{H} = - \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x - \lambda \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^z - \alpha \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^x. \quad (2.178)$$

Le constante de couplage α correspond à un champ dans la direction longitudinal et brise l'intégrabilité de la chaîne. Comme nous le verrons au chapitre 3, la brisure d'intégrabilité se traduit par le passage d'une description poissonnienne de la statistique des niveaux d'énergies dans le cas où $\alpha = 0$ à une description par l'ensemble GOE des matrices aléatoires pour $\alpha \neq 0$. Par la transformation de Jordan Wigner, on voit que le second champ α introduit des termes non quadratiques du type $-\alpha \sum_j (a_j^\dagger - a_j)$ dans (C.33) menant de surcroît à la non intégrabilité. Ce modèle a été étudié récemment du point de vue expérimental [CTW⁺10]. De prime abord, les énergies propres ne peuvent pas être obtenues exactement et le calcul de la densité d'états par la méthode de la fonction de partition n'est donc pas possible. On peut alors adopter une approche perturbative et essayer de calculer les termes correctifs aux énergies du modèle d'Ising intégrable. Cependant, l'approche perturbative est très difficile à utiliser en grande partie à cause de la dégénérescence des niveaux dans certaines limites de constantes de couplages et puis à cause du nombre d'état qui croît exponentiellement avec le nombre de spins N sur la chaîne. Comme nous l'avons vu dans le cas du modèle d'Ising, il n'est en fait pas nécessaire de connaître exactement la forme des énergies propres afin d'obtenir une approximation de la densité d'états. En effet, dans la limite thermodynamique la densité d'états des modèles de spins avec interactions à courte portée est bien décrite par l'approximation gaussienne dans le "bulk". Il vient donc que la connaissance des premiers moments du Hamiltonien est suffisante pour obtenir les paramètres de la gaussienne. Calculons les trois premiers moments définis par (2.131). Le fait que les trois premiers moments sont nécessaires va devenir clair dans ce qui suit. Le Hamiltonien s'écrit maintenant comme la somme de trois termes $\hat{H} = \hat{H}_I + \hat{H}_{II} + \hat{H}_{III}$ avec

$$\hat{H}_I = - \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x, \quad \hat{H}_{II} = -\lambda \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^z, \quad \hat{H}_{III} = -\alpha \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^x. \quad (2.179)$$

Comme le terme additionnel $\hat{H}_{III}$ retourne le spins au site n , il vient de manière triviale que $\langle H \rangle = 0$. En ce qui concerne le moment d'ordre 2, les deux premiers termes redonnent exactement (2.137) et (2.140), les termes croisés avec $\hat{H}_{III}$ ne donnent pas de contributions et on montre sans trop de peine que

$$\langle \hat{H}_{III}^2 \rangle = N\alpha^2 \quad (2.180)$$

puisque $(\hat{\sigma}_n^x)^2 = \mathbb{1}$. Il vient alors que

$$\langle H^2 \rangle = N(1 + \lambda^2 + \alpha^2). \quad (2.181)$$

17. Le terme *mésodynamique* provient du grec *meso* signifiant milieu et consiste donc en l'étude des systèmes dont le nombre de degrés de liberté est intermédiaire et n'est pas suffisant pour utiliser les outils de la limite thermodynamique.

Comme le Hamiltonien ne commute plus avec l'opérateur de parité en raison de la présence du champ longitudinal α , le spectre en énergie n'est plus symétrique et la densité d'états présente une asymétrie qui peut être prise en compte grâce au moment d'ordre 3. Notons que les moments d'ordre impair étaient tous nuls dans le cas du modèle d'Ising en champ transverse. En présence du champ longitudinal α , les moments d'ordre impairs ne sont plus strictement nuls. Illustrons ce propos pour le moment d'ordre 3. Dans le produit

$$\hat{H}^3 = (\hat{H}_I + \hat{H}_{II} + \hat{H}_{III})(\hat{H}_I + \hat{H}_{II} + \hat{H}_{III})(\hat{H}_I + \hat{H}_{II} + \hat{H}_{III}), \quad (2.182)$$

seuls les termes croisés $\hat{H}_I \hat{H}_{III}^2$, $\hat{H}_{III}^2 \hat{H}_I$ et $\hat{H}_{III} \hat{H}_I \hat{H}_{III}$ sont susceptibles d'apporter une contribution non nulle dans le calcul du moment d'ordre 3. Il est en effet facile de se convaincre que tous les autres termes n'apportent pas de contributions parce qu'ils engendrent des configurations orthogonales dans le calcul de la trace. Calculons à titre d'exemple la contribution venant du produit $\hat{H}_I \hat{H}_{III}^2$. Seuls les termes du type

$$-\alpha^2 (\hat{\sigma}_0^x \hat{\sigma}_1^x + \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x + \cdots + \hat{\sigma}_{N-1}^x \hat{\sigma}_0^x) (\hat{\sigma}_0^x \hat{\sigma}_1^x + \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x + \cdots + \hat{\sigma}_{N-1}^x \hat{\sigma}_0^x + \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_0^x + \hat{\sigma}_2^x \hat{\sigma}_1^x + \cdots + \hat{\sigma}_0^x \hat{\sigma}_{N-1}^x) \quad (2.183)$$

apportent une contribution non nulle dans le calcul de la trace et on trouve que

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_I \hat{H}_{III}^2 \rangle &= \frac{1}{2^N} \sum_{\{\vec{\sigma}\}} \langle \vec{\sigma} | \hat{H}_I \hat{H}_{III}^2 | \vec{\sigma} \rangle, \\ &= -2N\alpha^2. \end{aligned} \quad (2.184)$$

De la même manière, on prouve que les deux autres termes donnent la même contribution et on obtient finalement

$$\langle H^3 \rangle = -6N\alpha^2. \quad (2.185)$$

Un calcul un peu plus long et fastidieux permet d'obtenir le moment d'ordre 4

$$\langle H^4 \rangle = 3N^2(1 + \lambda^2 + \alpha^2)^2 + N(24\alpha^2 - 2\alpha^4 - 2 - 2\lambda^4 - 8\lambda^2 - 4\lambda^2\alpha^2). \quad (2.186)$$

En calculant les moments d'ordre supérieurs, nous avons conjecturé que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^k} \langle H^{2k} \rangle = (1 + \lambda^2 + \alpha^2)^k \frac{(2k)!}{2^k k!}. \quad (2.187)$$

Cette conjecture a récemment été prouvée par Keating *et al* qui ont utilisé le fait que la distribution d'énergie limite tendaient vers une loi normale et en ont ainsi déduit le résultat en calculant les moments de la loi normale [KLW14b].

L'expression des moments conduit à la formule suivante pour la densité d'états de modèle d'Ising en présence de deux champs

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\varepsilon^2}{2}} \left[1 - \frac{\alpha^2}{\sqrt{N}(1 + \lambda^2 + \alpha^2)^{3/2}} (\varepsilon^3 - 3\varepsilon) \right], \quad (2.188)$$

avec ε l'énergie renormalisée

$$\varepsilon = E / \sqrt{N(1 + \lambda^2 + \alpha^2)}. \quad (2.189)$$

Le second terme de la formule (2.188) a été introduit pour prendre en compte le moment d'ordre 3. Les moments d'ordre supérieurs peuvent aussi être pris en compte si nécessaire. Observons que la convergence vers la loi normale est en accord avec le résultat de Keating *et al* dans le cas des chaînes de spins aléatoires [KLW14a]. La premier terme correctif à la loi normale est en $1/\sqrt{N}$ avec N le nombre de spins ce qui est en accord avec le résultat (2.146). Dans la figure 2.16, nous présentons la comparaison de la formule théorique (2.188) avec les résultats obtenus par diagonalisation exacte pour différentes tailles de chaîne de spins N . Comme on peut l'observer, le terme cubique est nécessaire pour la description de la densité d'états pour les tailles de chaînes accessibles en pratique et donne une contribution non négligeable. Les résultats sont présentées pour les valeurs de champs $\lambda = \alpha = 1$.

Bien que le modèle ne soit pas intégrable, nous venons de montrer que la connaissance des premiers moments du Hamiltonien permet d'obtenir une bonne description de la densité d'états pour les valeurs de champs λ et α de l'ordre de l'unité. Il est évident que pour certaines valeurs limites des champs, des dégénérescences vont apparaître dans le spectre tout comme dans le cas du modèle d'Ising en champ transverse. L'approximation gaussienne que nous avons obtenues ne sera donc plus efficace pour la description des pics dans la densité d'états. Notons que pour la valeur de champ $\alpha = 1.5$, les pics apparaissent plus vite avec les valeurs croissantes de λ que dans le cas où $\alpha = 0.5$. Tout comme dans le cas du modèle d'Ising en champ transverse, les pics sont reliés aux dégénérescences des niveaux d'énergies dans certaines limites de couplage. Il est donc intéressant de regarder ces limites.

2.7.1 Limite de champs forts

Commençons par l'étude de la limite de couplage fort. Écrivons le Hamiltonien comme la somme de deux termes

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (2.190)$$

avec

$$\hat{H}_0 = - \sum_{n=0}^{N-1} (\lambda \hat{\sigma}_n^z + \alpha \hat{\sigma}_n^x) \quad \text{et} \quad \hat{H}_1 = - \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x. \quad (2.191)$$

Dans la limite de champs forts, nous allons considérer le terme $\hat{H}_1$ comme une perturbation au Hamiltonien $\hat{H}_0$. Diagonalisons donc tout d'abord le Hamiltonien non perturbé $\hat{H}_0$. Soit les nouvelles variables de spins $\tilde{\sigma}_n^{x,z}$ obtenues par rotation à partir des variables $\hat{\sigma}_n^{x,z}$

$$\begin{cases} \tilde{\sigma}_n^x &= -\sin \phi \hat{\sigma}_n^z + \cos \phi \hat{\sigma}_n^x, \\ \tilde{\sigma}_n^z &= \cos \phi \hat{\sigma}_n^z + \sin \phi \hat{\sigma}_n^x. \end{cases} \quad (2.192)$$

La valeur de l'angle de rotation va être choisit de manière à obtenir une forme diagonale dans la nouvelle représentation de spins. En écrivant les relations inverses puis en injectant dans l'expression $\hat{H}_0$, on trouve que l'angle de rotation

$$\cos \phi = \frac{\lambda}{\sqrt{\lambda^2 + \alpha^2}}, \quad \sin \phi = \frac{\alpha}{\sqrt{\lambda^2 + \alpha^2}} \quad (2.193)$$

annule les termes non diagonaux et on obtient que

$$\hat{H}_0 = -\sqrt{\lambda^2 + \alpha^2} \sum_{n=0}^{N-1} \tilde{\sigma}_n^z. \quad (2.194)$$

Il s'ensuit que les énergies propres du Hamiltonien non perturbé sont données par

$$E_n = \sqrt{\lambda^2 + \alpha^2} (N - 2n), \quad n = 0, 1, \dots, N \quad (2.195)$$

où n correspond au nombre de spins *up* dans la nouvelle représentation de spins. La dégénérescence de chaque niveau d'énergie est donnée par C_N^n , correspondant au nombre de manière de choisir n spins *up* parmi les N spins disponibles.

Dans la nouvelle représentation de spins, le terme perturbatif $\hat{H}_1$ prend la forme suivante

$$\hat{H}_1 = -\sin^2 \phi \sum_n \tilde{\sigma}_n^z \tilde{\sigma}_{n+1}^z - \cos^2 \phi \sum_n \tilde{\sigma}_n^x \tilde{\sigma}_{n+1}^x - \sin \phi \cos \phi \sum_n \tilde{\sigma}_n^x (\tilde{\sigma}_{n+1}^z + \tilde{\sigma}_{n-1}^z). \quad (2.196)$$

La théorie des perturbations traditionnelle consiste à diagonaliser le terme perturbatif $\hat{H}_1$ dans le sous-espace dégénéré des états avec la même énergie non perturbée correspondant ici au sous-espace constitué des configurations (dans la nouvelle représentation de spins) avec un nombre de spins *up* fixe. Comme la taille de ces sous-espaces croît comme C_N^n , une telle approche n'est pas efficace, ni effective généralement.

Par analogie avec notre étude du modèle d'Ising en champ transverse et la technique de l'approximation multi-gaussienne, nous proposons ici de faire le calcul des deux premiers moments du Hamiltonien dans les sous-espaces avec un nombre n de spins *up* fixe. Nous écrivons ensuite la densité d'états comme une somme de gaussiennes dans les différents sous-espace avec un nombre de spins *up* fixe

$$\rho(E) = \frac{1}{2^N} \sum_{n=0}^N C_N^n \rho_n(E) \quad (2.197)$$

avec

$$\rho_n(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} \exp\left(-\frac{(E - E_n)^2}{2\sigma_n^2}\right). \quad (2.198)$$

$E_n = \langle \hat{H} \rangle_n$ correspond au moment d'ordre 1 dans le sous-espace avec n spins *up* et $\sigma_n^2 = \langle \hat{H}^2 \rangle_n - \langle \hat{H} \rangle_n^2$ est la variance associée. Le détail du calcul de ces quantités est bien détaillé dans l'annexe B de notre article [AB14b]. On a

$$E_n \equiv \langle \mathcal{H} \rangle_n = \sqrt{\lambda^2 + \alpha^2} (N - 2n) - \left(N - \frac{4n(N-n)}{N-1} \right) \frac{\alpha^2}{\lambda^2 + \alpha^2}, \quad (2.199)$$

$$\sigma_n^2 = \frac{2n(N-n)}{N-1} \frac{\lambda^4}{(\lambda^2 + \alpha^2)^2}. \quad (2.200)$$

Ces simples formules donnent de très bonnes approximations de la densité d'états en accord avec les résultats numériques comme en témoignent les figures ci-dessous.

Dans cette limite, ces résultats peuvent être rendu encore plus rigoureux en observant que dans le sous-espace avec un nombre de spins *up* fixés, le modèle se réduit au modèle XX qui est un modèle intégrable par la transformation de Jordan Wigner [LSM61]. Il s'ensuit que le spectre s'obtient par remplissage de niveaux fermioniques comme dans le cas du modèle d'Ising en champ transverse et nous pouvons alors utiliser tout l'arsenal que nous avons développés dans le cadre de ce modèle. On obtient alors la description multi-gaussienne dont les paramètres sont donnés par (2.199) et (2.200). Nous renvoyons le lecteur à l'annexe C de notre article pour de plus amples détails [AB14b]. Le critère de visibilité des pics que nous avons développés dans la sous section 2.6.2 peut être utilisé ici aussi et on trouve qu'en champs forts, les pics seront visibles pour tout $N < N_{max}$ avec

$$N_{max} = \frac{2(\lambda^2 + \alpha^2)^3}{\lambda^4}. \quad (2.201)$$

2.7.2 Limite où α est fixe et $\lambda \rightarrow 0$

Dans la nouvelle représentation de spins, le Hamiltonien non perturbé s'écrit

$$\hat{H}_0 = -\sqrt{\lambda^2 + \alpha^2} \sum_n \tilde{\sigma}_n^z - \sin^2 \phi \sum_n \tilde{\sigma}_n^z \tilde{\sigma}_{n+1}^z \quad (2.202)$$

où l'angle de rotation est donné par (2.193). Comme ce Hamiltonien n'est composé que d'opérateurs de type $\tilde{\sigma}^z$, il vient qu'il est diagonal dans la base des états propres $\{|\vec{\sigma}\rangle\}$ de $\tilde{\sigma}^z$. Une paramétrisation utile des configurations de la chaîne de spins consiste à considérer les configurations composés de k groupes de n_j spins *up* et m_j spins *down* tels que

$$\sum_{i=1}^k n_j = n, \quad \sum_{i=1}^k m_j = m, \quad n + m = N. \quad (2.203)$$

Une configuration de ce type est représentée sur la figure 2.19. Il est clair qu'il existe plusieurs configurations avec n et k fixés. Il est facile de voir que les énergies non-perturbées de telles configurations sont données par

$$E_{n,k}(\alpha, \lambda) = \sqrt{\lambda^2 + \alpha^2}(N - 2n) - (N - 4k) \sin^2 \phi, \quad \sin \phi = \frac{\alpha}{\sqrt{\lambda^2 + \alpha^2}}. \quad (2.204)$$

Il s'ensuit que toutes les configurations avec les mêmes valeurs de n et k donnent la même énergie non perturbée. La dégénérescence des états d'énergies, notée $f(n, k)$, est donc donnée par le nombre de configuration avec n et k fixés. La dégénérescence des états s'écrit

$$f(n, k) = \frac{N}{k} C_{n-1}^{k-1} C_{N-n-1}^{k-1}. \quad (2.205)$$

Le coefficient C_{n-1}^{k-1} exprime le nombre de manière de placer $k-1$ barrières parmi les $n-1$ positions disponibles pour la création des k groupes de spins *up*. Le coefficient $C_{N-n-1}^{k-1} = C_{m-1}^{k-1}$ exprime la même quantité mais pour les spins *down*. Le coefficient N/k prend en compte les configurations équivalentes par permutations cycliques.

Pour $\lambda = 0$, les énergies non perturbées prennent la forme suivante

$$E_{n,k}(\alpha, 0) = \alpha(N - 2n) + 4k - N. \quad (2.206)$$

Équations diophantiennes et taille des sous-espaces dégénérés

Pour $\alpha = 1$, les énergies non perturbées prennent la forme $E_R^0 \equiv E_{n,k}(1, 0) = 2R$ avec $R = 2k - n$. Il s'ensuit que la dégénérescence du niveau d'énergie E_R^0 s'écrit

$$\mathcal{N}_R = \sum_{2k-n=R} f(n, k) = \sum_{2k-n=R} \frac{N}{k} C_{n-1}^{k-1} C_{N-n-1}^{k-1}, \quad 0 \leq k \leq n \leq N \quad (2.207)$$

où la somme court sur les solutions de l'équation diophantienne $2k - n = R$. Si $\alpha = 0.9$, alors l'équation diophantienne à laquelle obéit R est cette fois donnée par $R = 20k - 9n$. Comme dans le cas du modèle d'Ising en champ transverse, l'étude de ce cas limite permet de voir l'apparition de pics aux positions E_R^0 avec un poids $\mathcal{N}_R$ comme le montre la figure 2.20. Dans le cas où λ est non-nul mais petit, ces pics vont s'élargir de manière

gaussienne et en calculant les deux premiers moments du Hamiltonien dans les sous-espaces dégénérés, il est possible d'obtenir une approximation multi-gaussienne de la densité d'états en très bon accord avec les résultats expérimentaux. Nous ne présenterons pas les détails des calculs ainsi que les résultats numériques que l'on peut retrouver dans [AB14b]. Nous attirons juste l'attention du lecteur sur le lien entre la théorie des équations diophantiennes, la combinatoire et la densité spectrale du modèle d'Ising.

2.8 Conclusion et perspectives

Les densités d'états des modèles quantiques constituent des quantités importantes et très simples qui permettent de caractériser les propriétés spectrales des systèmes avec un grand nombre de degrés de liberté. De par leur définition, elle permettent d'avoir accès aux quantités thermodynamiques tels que l'énergie libre et l'entropie puisqu'elles sont reliées à la transformée de Laplace inverse de la fonction de partition. Ce lien constitue d'ailleurs l'une des stratégies d'étude des densités d'états des modèles intégrables. En effet, si une forme analytique pour les niveaux d'énergies est connue, on peut espérer obtenir une forme analytique pour la densité d'états en calculant la transformée de Laplace inverse de la fonction de partition.

Dans un premier temps, nous avons montré en utilisant le théorème de la limite centrale, que la densité d'états des modèles intégrables dont le spectre consiste en le remplissage de niveaux fermioniques convergeait vers une loi normale dans la limite thermodynamique. Nous avons vérifié ce résultat dans le cadre du modèle d'Ising en champ transverse. Ce modèle intégrable se diagonalise par la transformation de Jordan-Wigner, qui envoie les opérateurs de spins sur des opérateurs fermioniques. Le spectre de ce modèle se réduit donc au remplissage de niveaux fermioniques avec des règles de sélection sur le nombre d'excitations provenant de la structure du vide de Bogoliubov et de la loi de conservation de la parité. En calculant la fonction de partition de ce modèle, nous avons montré que dans la limite thermodynamique, la méthode du col redonnait la loi gaussienne dans le "bulk". En étudiant les limites de couplage faible et fort au champ extérieur, nous avons observé l'apparition de pics dans la densité d'états dont l'origine est liée aux fortes dégénérescences apparaissant dans ces limites de couplages. Dans la limite thermodynamique, les pics se recouvrent et on retrouve l'approximation gaussienne. Cependant, comme la limite thermodynamique n'est pas atteignable en pratique, il nous a semblé important de trouver des approximations des densités d'états afin de décrire les pics dans cette limite, que nous avons qualifié de *mésodynamique*. Notre hypothèse principale pour la description des pics suppose un étalement gaussien des pics autour de leur positions dégénérées classiques. Cette hypothèse est à la base de l'approximation multi-gaussienne que nous avons développé. Nous avons alors montré que la connaissance des deux premiers moments du Hamiltonien dans le sous-espace dégénéré associé à chaque pic, correspondant au sous-espace avec un nombre de spins *up* fixe, donnait une bonne approximation de la densité d'états. Les formules que nous avons trouvées sont simples et s'écrivent comme des sommes de gaussiennes centrées sur les pics et dont la variance est donnée par le moment d'ordre 2 du Hamiltonien dans le sous-espace dégénéré associé au pic. Ces formules nous ont permis de décrire et reproduire les comportements observés numériquement.

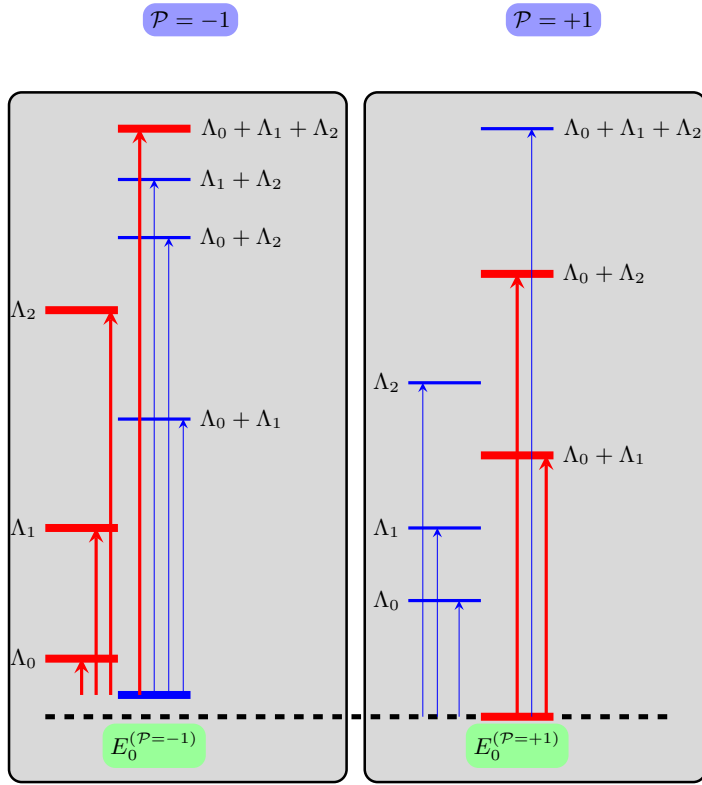
Dans un deuxième temps, nous nous sommes tournés vers l'étude d'un modèle non intégrable. En ajoutant un champ longitudinal au modèle d'Ising intégrable, on brise l'intégrabilité du système. Les niveaux d'énergies ne peuvent donc pas être obtenus exactement dans ce nouveau modèle. Néanmoins, en utilisant les premiers moments du Hamiltonien, nous avons montré que dans la limite thermodynamique, la densité d'états était bien décrite par une loi normale avec des corrections en $1/\sqrt{N}$ où N est le nombre de spins. Ce résultat est en accord avec le terme correctif trouvée pour des chaînes de spins aléatoires dans [KLW14a]. Les termes correctifs d'ordres supérieurs, en puissance de $1/N$, peuvent être calculés au moyen des moments d'ordre supérieurs du Hamiltonien. Pour les mêmes raisons que dans le cadre du modèle d'Ising intégrable, ce modèle présente des pics dans la densité d'états dans certaines limites de constantes de couplages. Ces pics ne peuvent être décrits par les corrections à la loi normale et sont reliés aux dégénérescences des niveaux d'énergies qui apparaissent dans ces limites. Pour de petites déviations de ces limites, les pics acquièrent une certaine largeur et nous avons montré que les pics peuvent être décrits par une superposition de gaussiennes dont les paramètres sont obtenues en calculant les deux premiers moments du Hamiltonien projeté dans un certain sous-espace (celui des états dégénérés). Nous avons entre autre montré le lien intéressant entre la théorie des nombres et la dégénérescence des états d'énergie dans la limite de faible champ transverse. Nos formules ont permis de décrire les résultats numériques obtenus par diagonalisation exacte.

Bien que nous nous soyons intéressés uniquement à des modèles de chaînes de spins, nos résultats peuvent être étendus à une classe plus large de systèmes quantiques à plusieurs corps. Le modèle de Bose-Hubbard constitue

l'un des paradigmes de modèles de N corps en interaction et est défini par [KRBL10]

$$H_{BH} = -J \sum_{j=1}^L \left(b_j^\dagger b_{j+1} + \text{c.c.} \right) + \frac{U}{2} \sum_{j=1}^L \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1) = H_J + H_U, \quad (2.208)$$

où les $b_j^\dagger$ et b_j sont des opérateurs de création et annihilation bosonique et $\hat{n}_j = b_j^\dagger b_j$, le nombre de bosons au site j d'une chaîne de taille L . La constante J traduit la propension qu'ont les bosons à passer d'un site j au site voisin $j + 1$ et la constante U correspond à l'amplitude d'interaction sur site. Dans la figure 2.21 tirée de [KRBL10], nous observons l'apparition de pics dans la densité d'états lorsque le paramètre $U/J \gg 1$. Ces pics se comprennent assez facilement puisque dans cette limite le Hamiltonien de Bose-Hubbard (2.208) se réduit au terme quadratique H_U qui présente un spectre fortement dégénéré. De par sa forme, H_U est intégrable du fait qu'il est déjà sous sa forme diagonale. Les auteurs ont par ailleurs clairement observer un passage d'une statistique GOE pour la distribution de l'espacement d'énergie pour U/J de l'ordre de l'unité à une description Poissonienne pour $U/J \gg 1$ [KRBL10]. Ce résultat prouve que l'on passe d'un modèle non intégrable à un modèle intégrable. En théorie il ne serait pas très difficile d'utiliser nos résultats sur l'approximation multi-gaussienne dans ce contexte. En effet, il suffirait pour cela de calculer les deux premiers moments du Hamiltonien (2.208) dans les sous-espaces dégénérés associés aux énergies dégénérées de H_U et écrire la densité comme une somme de gaussiennes. Il est donc potentiellement possible d'obtenir une bonne description de ces pics.



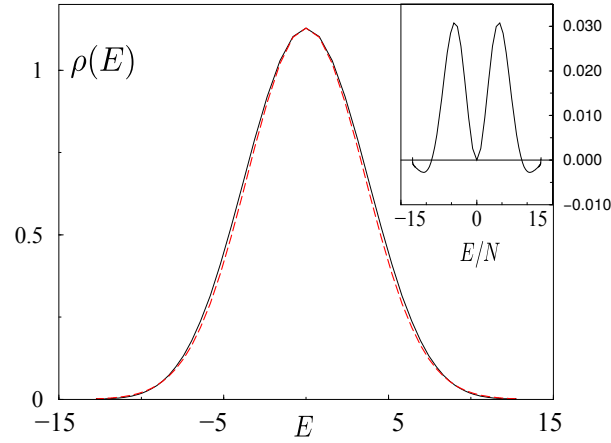


FIGURE 2.7 – Densité d'états du modèle d'Ising pour $\lambda = 1$ et $N = 16$ spins. En traits tiretés rouge l'approximation du col (2.113) résolue exactement numériquement, en traits plein noir l'approximation gaussienne (2.116). Encadré : Différence entre l'approximation gaussienne et l'approximation du col numérique.

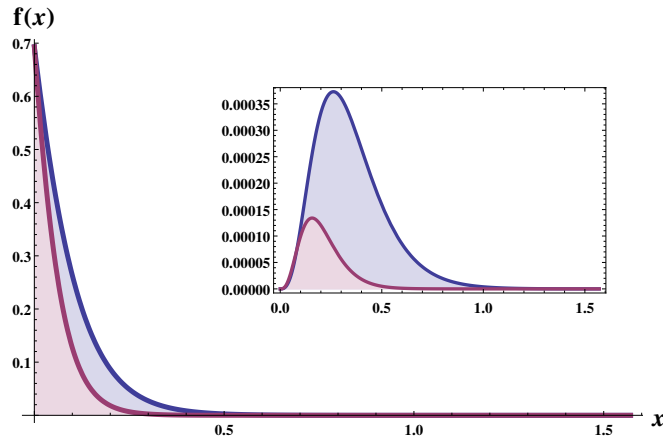


FIGURE 2.8 – intégrant $f(x) = \ln(1 + e^{-4\beta_0 \sin(x/2)})$ apparaissant dans l'expression de l'entropie (2.124) pour $\beta_0 = 6$ (en bleu) et $\beta_0 = 10$ (en rouge). En encadré, la différence entre $f(x)$ et la fonction $g(x) = \ln(1 + e^{-2\beta_0 x})$ obtenue en développant le sinus autour de $x \simeq 0$.

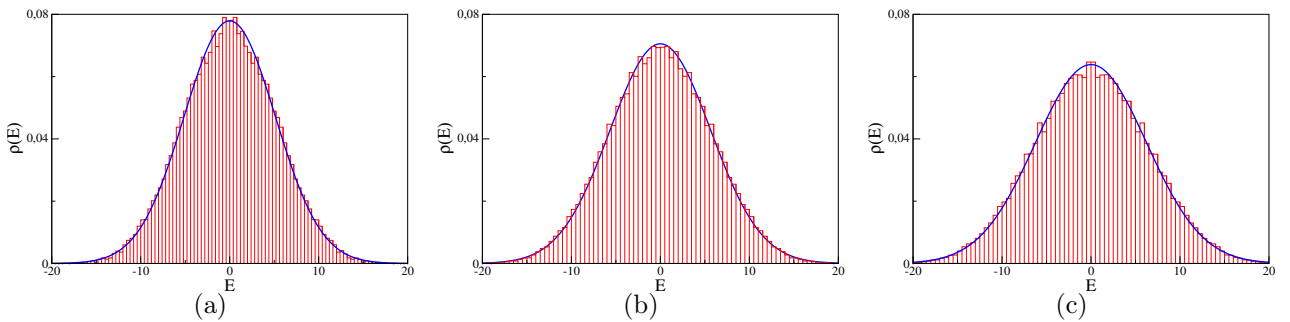


FIGURE 2.9 – Densité spectrale du modèle d'Ising en champ transverse λ pour $N = 16$ spins (a) $\lambda = 0.8$, (b) $\lambda = 1$, (c) $\lambda = 1.2$. Les histogrammes correspondent aux résultats numériques obtenus par diagonalisation exacte. Les courbes en bleu indiquent l'approximation gaussienne (2.116).

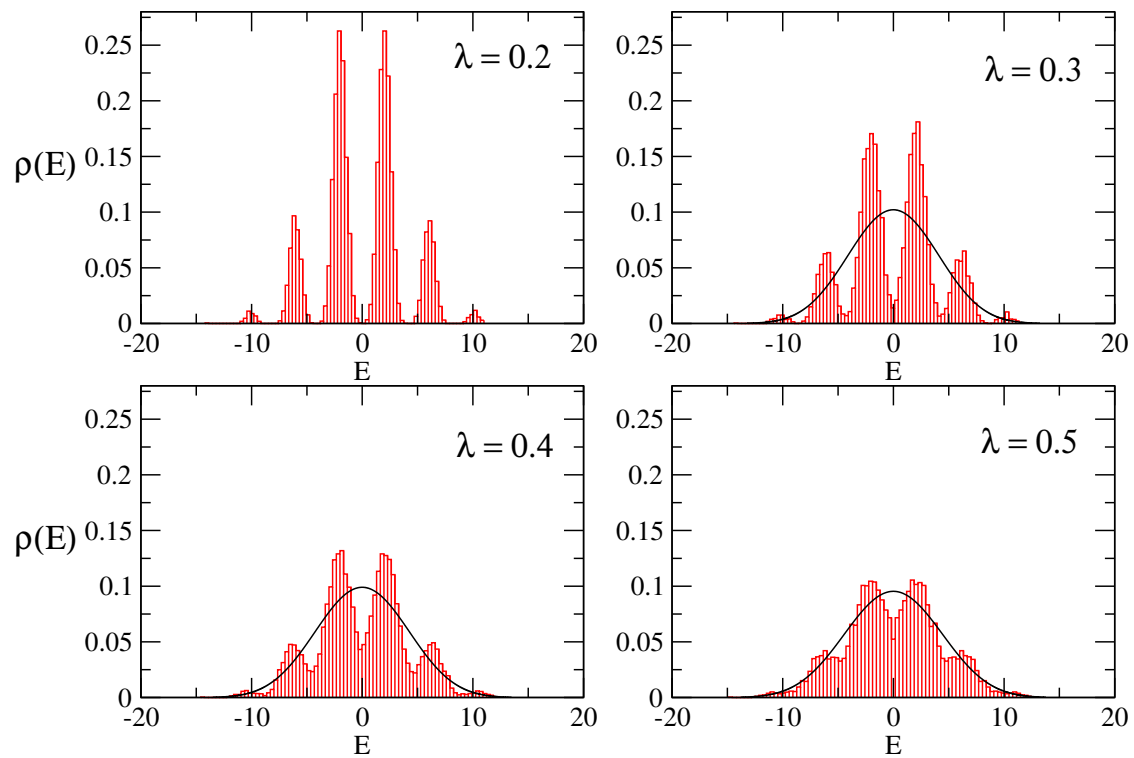


FIGURE 2.10 – Densité d'états du modèle d'Ising en champ λ pour $N = 14$ spins. Les courbes noires correspondent à l'approximation gaussienne (2.116). La description gaussienne de la densité ne tient plus en raison de l'apparition de pics prononcés.

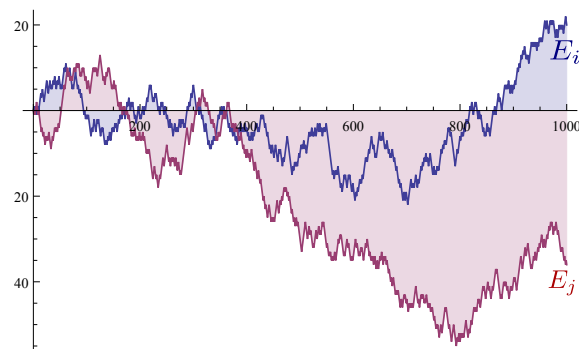


FIGURE 2.11 – Deux réalisations de marches aléatoires de $N = 1000$ pas. Les deux marches engendrent deux énergies propres E_i et E_j du Hamiltonien de Ising.

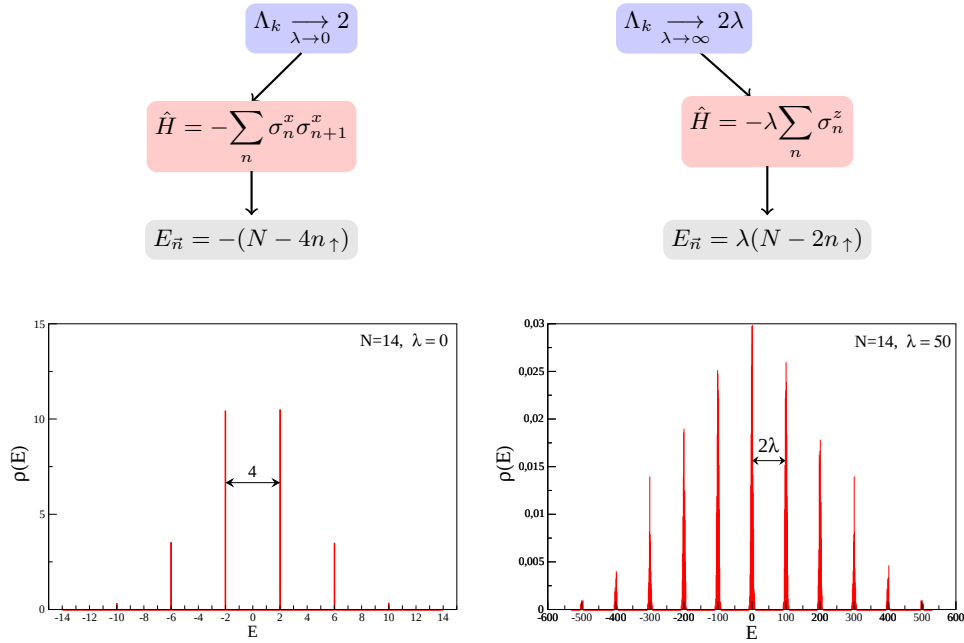


FIGURE 2.12 – Structure en pics de la densité d'états dans les limites de couplage faible et fort au champ magnétique λ . Les résultats ont été obtenus par diagonalisation exacte d'une chaîne de $N = 14$ spins. Dans le cas $\lambda = 0$, le nombre $n_{\uparrow}$ ne peut prendre que $N/2 + 1$ valeurs en raison de la contrainte sur le nombre d'excitations, $n_{\uparrow} = 0, 1, \dots, N/2$. Dans le cas $\lambda \gg 1$, le paramètre $n_{\uparrow}$ prend $N + 1$ valeurs d'où la présence de pics supplémentaires par rapport au cas $\lambda \ll 1$. Dans la limite thermodynamique, l'espacement entre pics ne devient plus visible puisque le support de la densité croît comme N . On observe alors une courbe lisse dont l'enveloppe est décrite par une gaussienne.

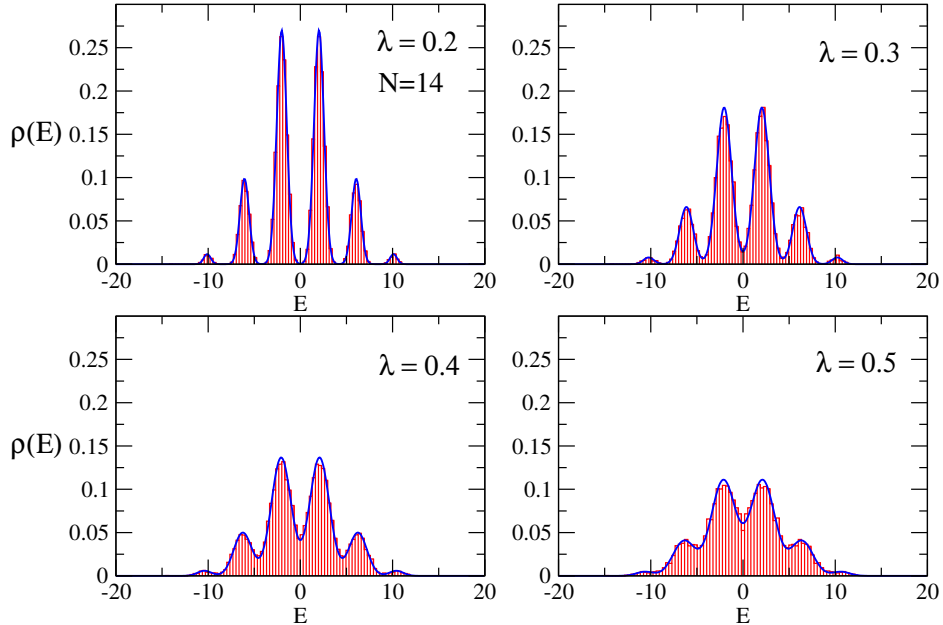


FIGURE 2.13 – Densité d'états du modèle d'Ising pour $N = 14$ spins et différentes valeurs de champ magnétique λ . Les histogrammes rouges correspondent aux résultats numériques obtenus par diagonalisation exacte. En bleu, l'approximation multi-gaussienne (2.169).

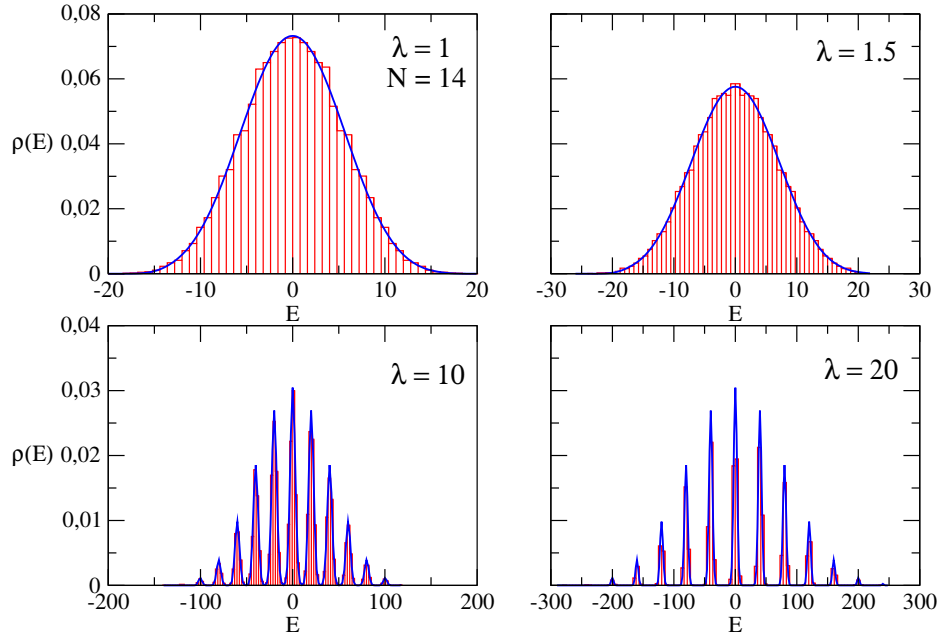


FIGURE 2.14 – Densité d'états du modèle d'Ising pour $N = 14$ spins et pour différentes valeurs de champ magnétique $\lambda \geq 1$. Les histogrammes rouges correspondent aux résultats numériques obtenus par diagonalisation exacte. En bleu, l'approximation multi-gaussienne (2.173).

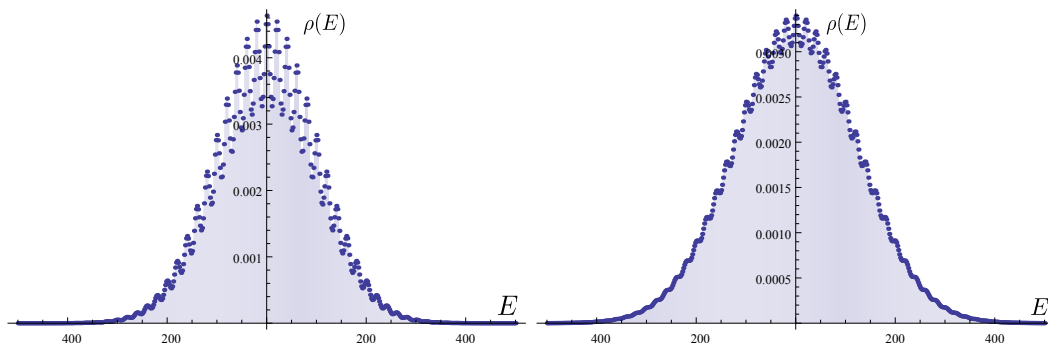


FIGURE 2.15 – Recouvrement des pics dans la densité d'états du modèle d'Ising en champ transverse $\lambda = 10$ pour $N = 100$ spins (à gauche) et $N = 150$ spins (à droite) obtenues en utilisant l'approximation multi-gaussienne (2.173). De telles tailles de chaînes ne peuvent être atteintes par diagonalisation exacte.

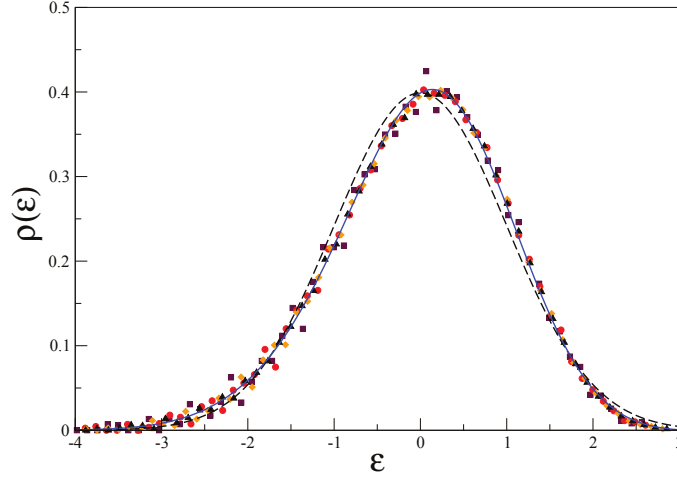


FIGURE 2.16 – Densité d'états du modèle d'Ising en présence de deux champs $\alpha = \lambda = 1$ en fonction de l'énergie renormalisée (2.189). Les différents symboles indiquent les résultats numériques obtenus par diagonalisation exacte pour différentes tailles de chaînes de spins. Carrés noirs : $N = 13$, cercles rouges : $N = 14$, diamants oranges : $N = 15$, triangles bleus : $N = 16$. La ligne bleue correspond à l'approximation (2.188) pour $N = 16$. La courbe tiretée noire indique l'approximation purement gaussienne sans le terme correctif cubique pour $N = 16$.

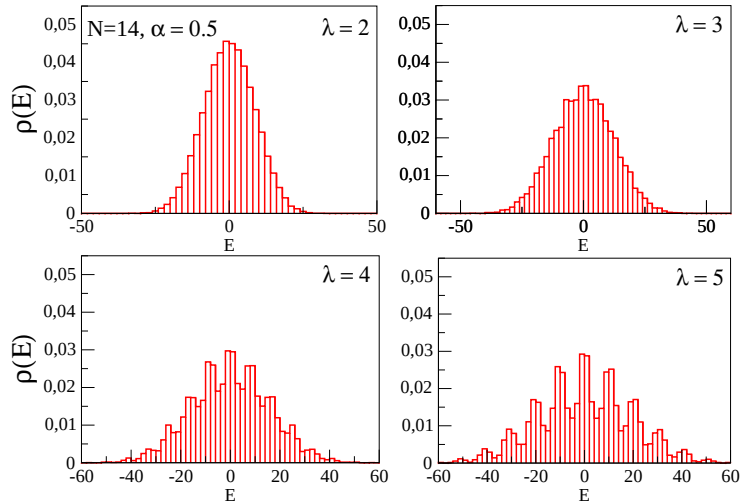


FIGURE 2.17 – Densité d'états du modèle d'Ising pour $\alpha = 0.5$ et des valeurs croissantes du champ transverse λ pour $N = 14$ spins. On observe clairement l'apparition de pics lié aux dégénérescences de niveaux d'énergies dans la limite $\lambda \gg 1$.

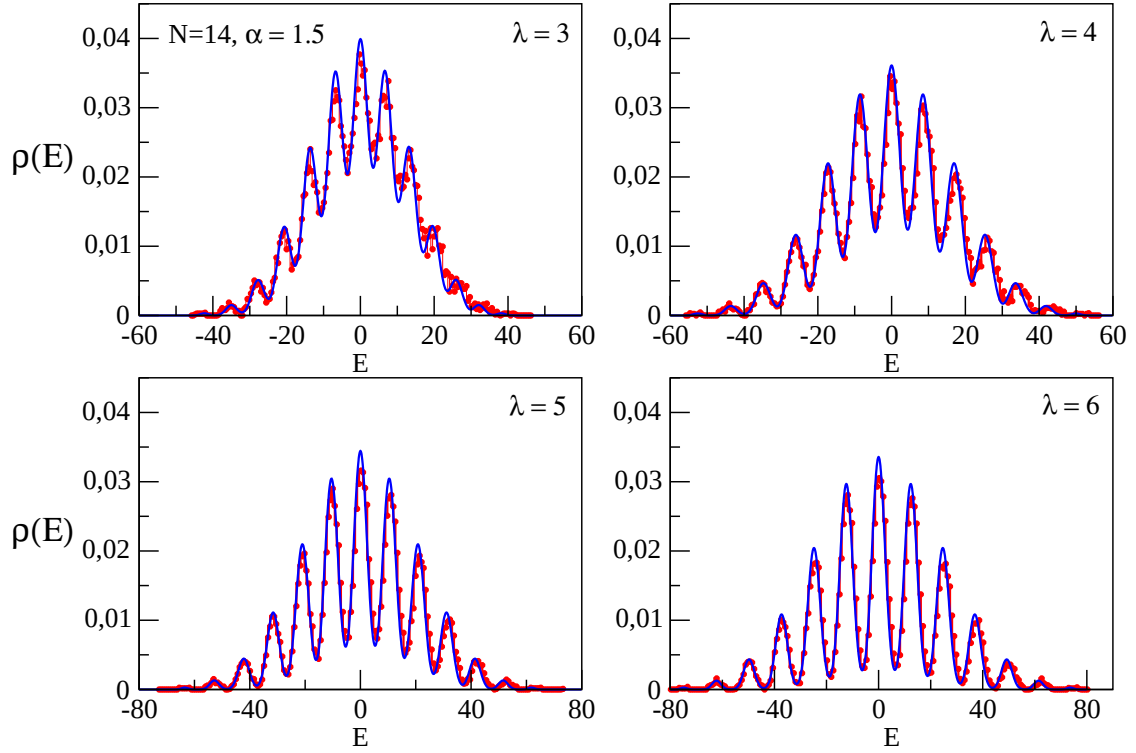


FIGURE 2.18 – Densité d'états du modèle d'Ising pour $\alpha = 1.5$ et des valeurs croissantes du champ transverse λ pour $N = 14$ spins. Les points rouges ont été obtenus par diagonalisation exacte. Les courbes bleues correspondent à l'approximation multi-gaussienne (2.198).

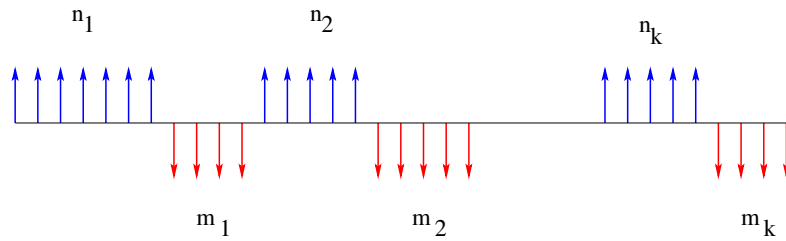


FIGURE 2.19 – Structure d'un état de configuration dans la base des états propres de $\tilde{\sigma}^z$ composé de k groupes de spins *up* (en bleu) et *down* (en rouge).

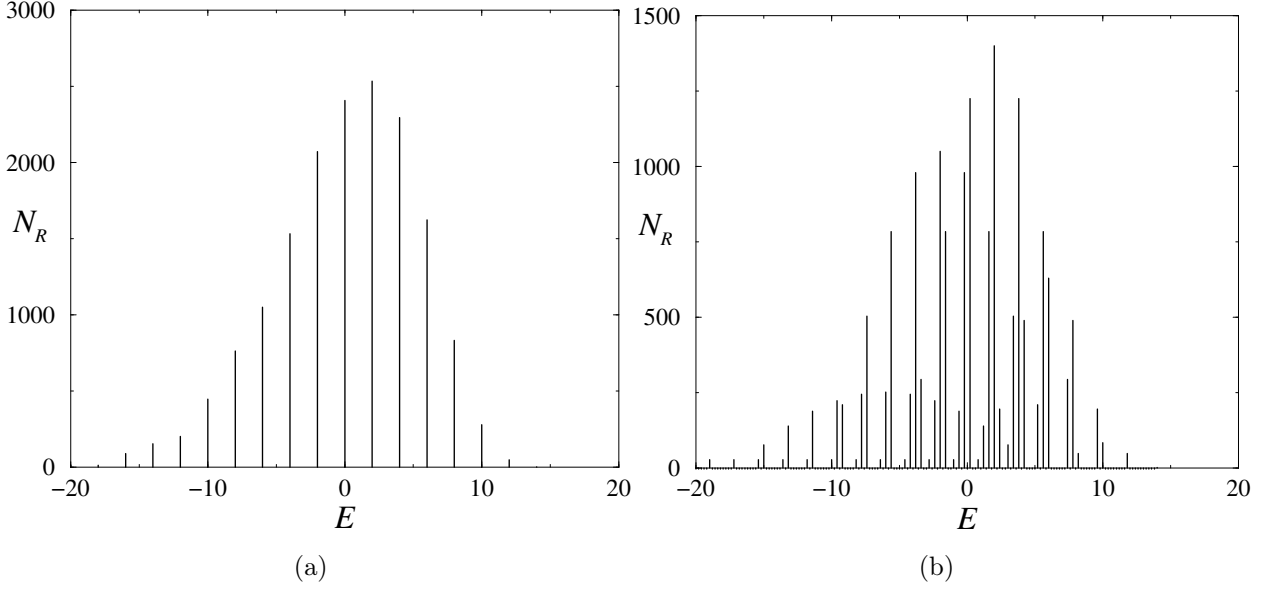


FIGURE 2.20 – Dégénérescence du spectre du modèle d’Ising en présence de deux champs pour $N = 14$ et $\lambda = 0$: (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 0.9$.

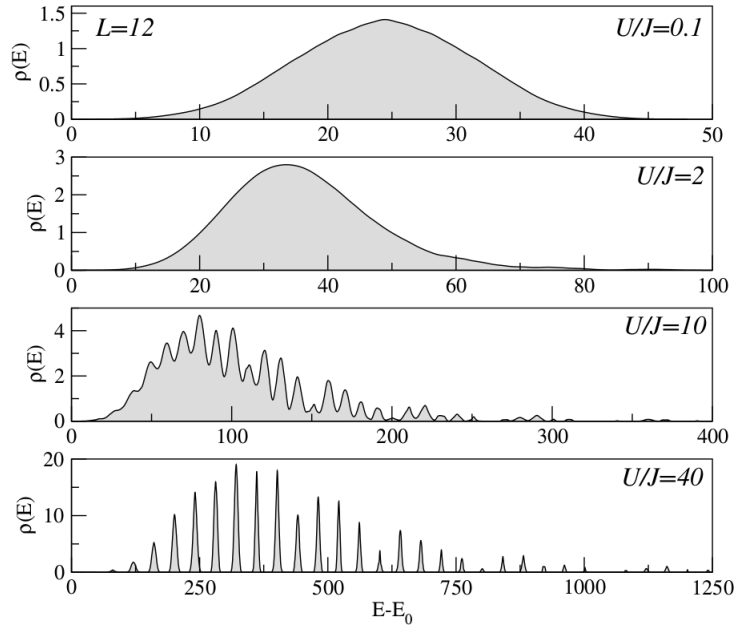


FIGURE 2.21 – Densité du modèle de Bose-Hubbard (2.208) pour différentes valeurs du paramètre U/J pour une chaîne de $L = 12$ sites. Notons l’apparition de pics dans la limite $U/J \gg 1$. Figure tirée de [KRBL10].

Article I

Spectral density of the quantum Ising model in
two fields : Gaussian and multi-Gaussian
approximations

Spectral density of the quantum Ising model in two fields: Gaussian and multi-Gaussian approximations

Y.Y. Atas, E. Bogomolny

Univ. Paris Sud, CNRS, LPTMS, UMR8626, Orsay F-91405, France

E-mail: yasar.atas@lptms.u-psud.fr, eugene.bogomolny@lptms.u-psud.fr

Abstract. Spectral density of quantum Ising model in two fields for large but finite number of spins N , is discussed in detail. When all coupling constants are of the same order, spectral densities in the bulk are well approximated by a Gaussian function which is typical behaviour for many-body models with short-range interactions. The main part of the paper is devoted to the investigation of a different characteristic case when spectral densities have peaks related with strong degeneracies of unperturbed states in certain limits of coupling constants. In the strict limit $N \rightarrow \infty$ peaks overlap and disappear but for values of N accessible in numerical calculations they often strongly influence spectral densities and other quantities as well. A simple method is developed which permits to find general approximation formulae for multi-peak structure of spectral density in good agreement with numerics.

1. Introduction

Spectral density is a fundamental and one of the simplest characteristics of quantum systems. In general, spectral density is system dependent. Nevertheless, there exist a few 'universal' densities which appear in numerous different models in the limit of large number degrees of freedom.

Probably the best known example of such universality is the Wigner semicircle law [1]-[3]

$$\rho_W(E; N) = \begin{cases} \frac{1}{\pi N \sigma^2} \sqrt{2N\sigma^2 - E^2}, & |E| < \sigma\sqrt{2N} \\ 0, & |E| > \sigma\sqrt{2N} \end{cases} \quad (1)$$

Here N is the matrix dimension and σ is a constant.

The semicircle law is well investigated in mathematics. Initially it appears as limiting spectral density of random matrices with independent elements [1] but later it was proved that it describes densities of a large variety of random matrix ensembles (e.g. in free probability [4]). In physics its importance is limited as there is practically no physical models with such density.

Instead, there exist models whose spectral density is well described by a different universal law, namely by the Gaussian function

$$\rho_G(E; N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N\sigma^2}} \exp\left(-\frac{E^2}{2N\sigma^2}\right). \quad (2)$$

A typical and the most investigated example is the shell model with N fermions with two-body interaction occupying M one-particle states with $M \gg N$ [5]-[10] but one can argue that the Gaussian density is universal behaviour (under certain conditions) for any N -body model with short-range interaction.

We stress that the both formulae (1) and (2) (with corresponding rescaling) are valid only in the bulk, namely when energy is scaled as follows

$$E = \sqrt{N}e \quad (3)$$

with fixed e and $N \rightarrow \infty$.

For larger energies (e.g. $E \sim N e$) and, in particular close to the ground state, the spectral densities have a different forms, usually exponential or stretched exponential. For example, for standard Gaussian ensembles of random matrices at the left of zero point of the semicircle law, $E_0 = -\sqrt{2N}\sigma$, the density for $E < E_0$ is given by $\rho(E) \sim N^{1/6} \exp[-\text{const. } N^{1/6}(E_0 - E)]$ [11]. For the shell model with equally spaced one-particle states, the density close to the ground state E_{gs} increases as follows: $\rho(E) \sim \exp[\text{const. } \sqrt{N(E - E_{gs})}]$ [12], [13].

Though there exist many physical models with the Gaussian density (2), this subject is not well investigated due to the fact that in solid state physics the number of particles is so large that the behaviour of the density in the bulk very far from the ground state is meaningless.

Recently the situation has changed. First, modern experiments can be performed with a small number of particles. Second, progress in numerical calculations permits to obtain the full solution of quantum models with a few tenths of particles (but not much more). Consequently, the investigation of such models at large but finite values of N becomes of interest.

The purpose of this paper is to discuss in detail spectral densities of one-dimensional spin chains. As a typical example we consider the quantum spin- $\frac{1}{2}$ Ising model in transverse and longitudinal fields whose Hamiltonian is

$$\mathcal{H} = - \sum_{n=1}^N \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x - \lambda \sum_{n=1}^N \sigma_n^z - \alpha \sum_{n=1}^N \sigma_n^x, \quad (4)$$

where $\sigma^{x,y,z}$ are usual Pauli matrices. Parameter λ determines the strength of the transverse field and parameter α fixes the longitudinal field. We refer to λ and α as coupling constants. For simplicity we assume periodic boundary conditions.

The purpose of the paper is twofold. First we confirm that in the thermodynamic limit $N \rightarrow \infty$ the spectral densities of the Ising model when all coupling constants

are of the order of unity attain the Gaussian form (2) even at relatively small number of spins N . Second, we discuss different types of corrections at large but finite N . The simplest is power series corrections to (2) in close analogy with usual corrections to the central limit theorem. The second kind of corrections is more drastic as it manifests as pronounced peaks in the spectral density. These peaks are related with strong degeneracies of eigenvalues in certain limits of coupling constants. Though this phenomenon leads to spectral densities quite different from the smooth Gaussian shape prediction (2), it seems that it has not been discussed in detail in the literature. The investigation of such corrections constitutes the main part of the paper. We develop a simple method which permits to obtain approximate formulae describing well multi-peaks spectral densities in good agreement with numerical calculations for different values of coupling constants. Limiting densities are represented as a sum of different Gaussian functions (multi-Gaussians) whose parameters are calculated analytically from the Hamiltonian without the full solution of the problem.

The plan of the paper is the following. In Section 2 the Ising model in transverse field (with $\alpha = 0$) is considered. As its spectrum is known, all calculations are straightforward and can be performed analytically. In Section 3 the non-integrable case of the Ising model in two fields is discussed. Similar to the integrable case we demonstrate the existence of Gaussian and multi-Gaussian regimes for this model. The calculations are slightly different for large values of coupling constants and for small values of λ . The summary of results is given in Section 4. Details of calculations are presented in Appendices.

2. Ising model in transverse field

The quantum Ising model in transverse field [14] is one of the most investigated one-dimensional spin- $\frac{1}{2}$ models. In particular, it serves as the standard model of quantum phase transition [15].

This model is determined by the Hamiltonian (4) with $\alpha = 0$

$$\mathcal{H} = - \sum_{n=1}^N \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x - \lambda \sum_{n=1}^N \sigma_n^z . \quad (5)$$

The quantum Ising model in transverse field is integrable and its spectrum are calculated explicitly by the Jordan-Wigner transformation [16], [17]. The result corresponds to the fermionic filling of one-particle levels

$$E_{\vec{n}} = \sum_{j=1}^N e_j \left(n_j - \frac{1}{2} \right) , \quad (6)$$

where $n_j = 0, 1$ are number of fermions in state j , $e_j = e(\phi_j)$ with

$$e(\phi) = 2\sqrt{1 - 2\lambda \cos \phi + \lambda^2} , \quad (7)$$

and phase ϕ_j equals $\pi k_j/N$ with integer momenta k_j .

More precisely, for $|\lambda| < 1$ the spectrum consists of two sub-spectra with only even number of excitations, $\sum_{j=1}^N n_j = \text{even integer}$, but with the both even and odd momenta, $k_j = 2m_j$ and $k_j = 2m_j + 1$ for $m_j = 0, \dots, N-1$. For $|\lambda| > 1$ any numbers of excitations are possible but if $\sum_{j=1}^N n_j = \text{even integer}$ one has to choose odd $k_j = 2m_j + 1$ and when the total number of excitations is odd, i.e. $\sum_{j=1}^N n_j = \text{odd integer}$, k_j is even integer, $k_j = 2m_j$. For $|\lambda| = 1$ there exists one zero mode and the both expressions give the same result. For completeness, in Appendix A the derivation of this result is briefly reminded.

Exact asymptotic spectral density

The existence of the exact spectrum rends the calculation of the spectral density straightforward (see e.g. [16], [17]). Consider first the case $|\lambda| > 1$ and let us calculate the canonical sum of energies (6)

$$Z(\beta) = \frac{1}{2^N} \sum_{\vec{n}} e^{-\beta E_{\vec{n}}} = \prod_j \cosh\left(\frac{1}{2}\beta e_j\right) = \exp\left[\sum_j \ln \cosh\left(\frac{1}{2}\beta e_j\right)\right]. \quad (8)$$

For large N the sum in the exponent can be substituted by the integral over phases ϕ

$$Z(\beta) \approx \exp\left[\frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \ln \cosh\left(\beta \sqrt{1 - 2\lambda \cos \phi + \lambda^2}\right)\right]. \quad (9)$$

The knowledge of the canonical sum permits to calculate the spectral density using the Laplace transform

$$\rho(E) \equiv \sum_{\vec{n}} \delta(E - E_{\vec{n}}) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{\beta E} Z(\beta) d\beta \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{NS(\beta e)} d\beta, \quad (10)$$

where $e = E/N$ is the energy per spin and the entropy

$$S(\beta, e) = e\beta + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \ln \cosh\left(\beta \sqrt{1 - 2\lambda \cos \phi + \lambda^2}\right). \quad (11)$$

When $N \rightarrow \infty$ it is legitimate to perform the integration over β by the saddle point method. The saddle point, β_{sp} , is determined from the equation $\partial S(\beta, e)/\partial \beta|_{\beta=\beta_{\text{sp}}} = 0$, or

$$e = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \tanh\left(\beta_{\text{sp}} \sqrt{1 - 2\lambda \cos \phi + \lambda^2}\right) \sqrt{1 - 2\lambda \cos \phi + \lambda^2} d\phi, \quad (12)$$

and the spectral density in this approximation takes the form

$$\rho(e) = A e^{NS(e)}. \quad (13)$$

Here $S(e)$ plays the role of the entropy per spin and is given by following expression

$$S(e) = e\beta_{\text{sp}} + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \ln \cosh\left(\beta_{\text{sp}} \sqrt{1 - 2\lambda \cos \phi + \lambda^2}\right). \quad (14)$$

The pre-factor A is determined by the second derivative of $S(\beta, e)$ calculated at the saddle point,

$$\frac{N}{A^2} = \int_0^{2\pi} \frac{(1 - 2\lambda \cos \phi + \lambda^2) d\phi}{\cosh^2 \left(\beta_{\text{sp}} \sqrt{1 - 2\lambda \cos \phi + \lambda^2} \right)}. \quad (15)$$

Of course, the saddle point method is equivalent to the standard thermodynamic relations between the free energy, energy, and entropy. In calculations it is convenient to plot ρ as function of β_{sp} versus $e(\beta_{\text{sp}})$ from (12).

For $|\lambda| < 1$ one has to take into account the restriction that the total number of excitations over the two vacua with odd and even momenta should be even. It can be done e.g. by calculating first a slightly modified canonical sum depending on parameter x controlling the total number of excitations,

$$Z(\beta, x) = \frac{1}{2^N} \sum_{\vec{n}} e^{-\beta E_{\vec{n}}} x^{\sum_j n_j} = \prod_j \left[\frac{1+x}{2} \cosh(\beta e_j/2) + \frac{1-x}{2} \sinh(\beta e_j/2) \right]. \quad (16)$$

The canonical sum of energies with even number of excitations is simply

$$\begin{aligned} Z_+(\beta) &= \frac{1}{2}(Z(\beta, 1) + Z(\beta, -1)) \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \exp \left[\sum_j \ln \cosh \left(\frac{1}{2} \beta e_j \right) \right] + \exp \left[\sum_j \ln \sinh \left(\frac{1}{2} \beta e_j \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (17)$$

For $|\lambda| < 1$ there is two sub-spectra with different parity of momenta. In limit $N \rightarrow \infty$ in the both cases one can change the summation over momenta to the integration over ϕ from 0 to 2π . Therefore one gets exactly as above

$$\begin{aligned} Z(\beta) &\approx \exp \left[\frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \ln \cosh \left(\beta \sqrt{1 - 2\lambda \cos \phi + \lambda^2} \right) \right] \\ &+ \exp \left[\frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \ln \sinh \left(\beta \sqrt{1 - 2\lambda \cos \phi + \lambda^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

At finite y , $\cosh y > \sinh y$, the second term in the bulk is negligible at large N and for all λ in the bulk the spectral density is given by (13)-(15) with β_{sp} determined from (12).

Gaussian approximation for the density

It is instructive to find the approximate behaviour of the above spectral density in the bulk (i.e. close to the maximum) as in (3). In this case the dominant contribution is given by vicinity of point $\beta = 0$ and

$$\rho_G(e) \approx \sqrt{\frac{N}{2\pi(1 + \lambda^2)}} \exp \left(-\frac{Ne^2}{2(1 + \lambda^2)} \right). \quad (19)$$

This is exactly the Gaussian prediction (2) for the rescaled variable $e = E/N$. As the true energy is the sum of individual ones (cf. (6)), it is plain that in this case the origin

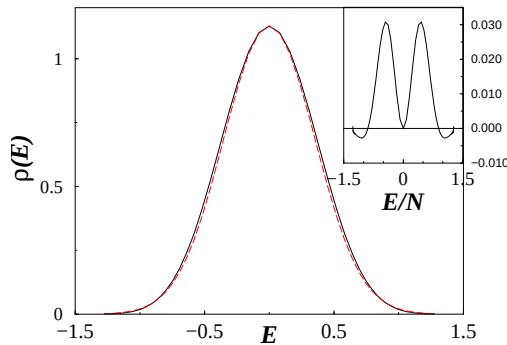


Figure 1. Density of states for the Ising model in transverse field with $\lambda = 1$ and $N = 16$. Solid black line is the saddle point approximation (13). Dashed red line indicates the Gaussian approximation (19). Insert: the difference between them.

of the Gaussian behaviour for the spectral density is the same as in the usual central limit theorem. Indeed, the quantity

$$E_{\vec{n}} = \sum_{j=1}^N e_j \left(n_j - \frac{1}{2} \right), \quad \vec{n} = (n_1, \dots, n_N) \quad (20)$$

can be considered as the sum of N random variables $n_j = 0, 1$ (or equivalently as a realization of a random walk) and the central limit theorem states that probability distribution of $\{E_{\vec{n}}\}$ is the Gaussian with parameters determined by the first and the second moments of $\{E_{\vec{n}}\}$ which gives (19). Of course, the same result can be obtained directly from the Hamiltonian without reference to the exact solution. It is sufficient to calculate the first traces of powers of the Hamiltonian (5). Denote

$$\langle \mathcal{H}^k \rangle = \frac{1}{2^N} \text{Tr } \mathcal{H}^k. \quad (21)$$

Simple calculations give that for Ising model in the transverse field

$$\langle \mathcal{H}^{2k+1} \rangle = 0, \quad \langle \mathcal{H}^2 \rangle = N(1 + \lambda^2), \quad \langle \mathcal{H}^4 \rangle = 3N^2(1 + \lambda^2)^2 - N(2 + 8\lambda^2 + 2\lambda^4). \quad (22)$$

Often the Gaussian approximation (19) is practically indistinguishable in the bulk from the exact saddle point formula (13). For example, in figure 1 the both expressions are present and it is clear that the difference is hardly visible. The Gaussian approximation is also in a good agreement with the results of direct numerical calculations for values of coupling constant close to 1 as indicated in figure 2.

It is also of interest to find the behaviour of the spectral density close to the ground state. This limit corresponds to $\beta \rightarrow \infty$ so that ground state energy is

$$e_{\text{gs}} = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sqrt{1 - 2\lambda \cos \phi + \lambda^2} d\phi. \quad (23)$$

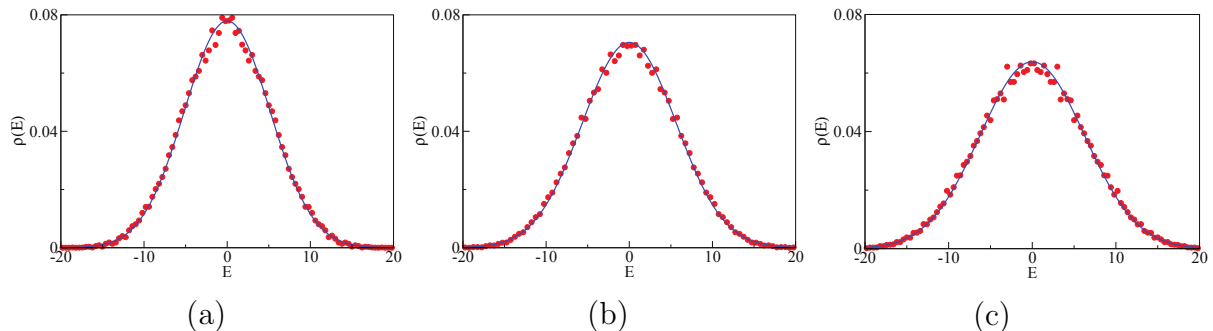


Figure 2. Spectral density for the quantum Ising model in transverse field with $N = 16$: (a) $\lambda = 0.8$, (b) $\lambda = 1$, (c) $\lambda = 1.2$. Red circles represent numerical calculated densities. Blue thick lines indicate the Gaussian approximation (19).

Expanding the above expressions for large β one can find the corresponding formulae. We omit the details and present only the results for $\lambda = 1$

$$\rho(E) = 2^{-N} (E - E_{\text{gs}})^{-3/4} \left(8\sqrt{6\pi N} \right)^{-1/2} \exp \left(-\sqrt{\frac{\pi N (E - E_{\text{gs}})}{6}} \right). \quad (24)$$

When N is not too big, the region of applicability of (24) is small and even the uniform approximation is of little interest.

Multi-Gaussian approximation

The exact asymptotic spectral density (12) for the Ising model in transverse field and its Gaussian approximation (19) are valid in the limit when the number of spins tends to infinity, $N \rightarrow \infty$. Nevertheless for large but finite values of N the situation may and often will be different. For example, in figure 3 and 4 we present the results of numerical calculations for the spectral density at different values of coupling constants. Notice that the density has clear peaks which are not described by the above asymptotic formulae.

The origin of these peaks is evident. At very small or very large coupling constant the one-particle energy levels (7) are strongly degenerated and for all ϕ_j

$$e(\phi_j) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 2, \quad e(\phi_j) \xrightarrow{\lambda \rightarrow \infty} 2\lambda. \quad (25)$$

At finite coupling constant the interaction removes degeneracies and leads to overlapping peaks. As for the model considered exact results are available (see (6)), the calculation of the spectral density at finite N is straightforward. Indeed, it is plain that peaks correspond to states with fixed number of fermions in (6) and each peak is related with sum of all possibilities to have fixed sum of occupation numbers

$$n = \sum_{j=1}^N n_j. \quad (26)$$

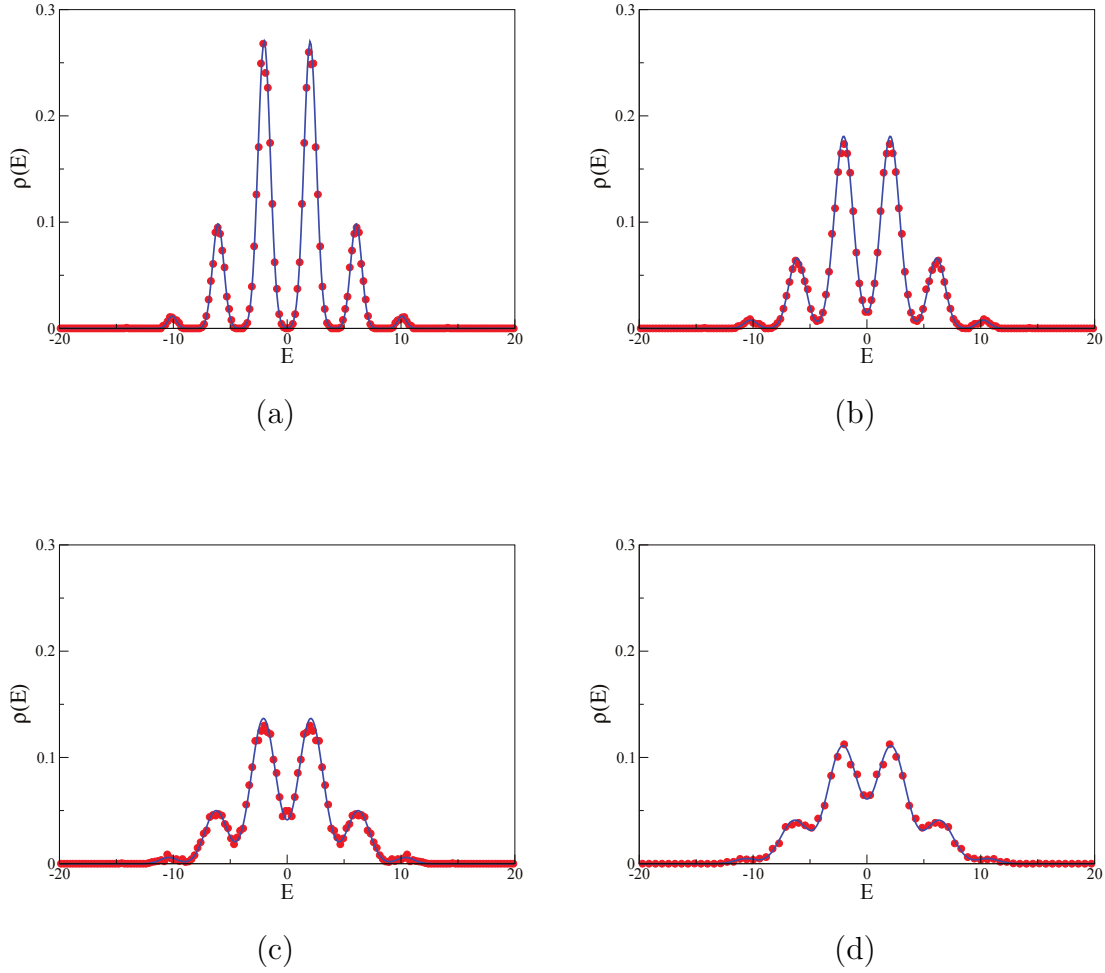


Figure 3. Spectral density for the quantum Ising model in transverse field with $N = 14$: (a) $\lambda = 0.2$, (b) $\lambda = 0.3$, (c) $\lambda = 0.4$, (d) $\lambda = 0.5$. Red circles are numerically calculated densities. Blue thick lines indicate the multi-Gaussian approximation (36).

This restriction can be taken into account by considering the generating function given by (16). When $N \rightarrow \infty$ it takes the form

$$Z(\beta, x) = \exp \left[\frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left(\frac{1+x}{2} \cosh(\beta e(\phi)/2) + \frac{1-x}{2} \sinh(\beta e(\phi)/2) \right) \right] d\phi . \quad (27)$$

The extraction of the term with fixed total occupation number, n , is achieved by the integration in the complex x -plane around a contour encircling the origin

$$Z_n(\beta) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{Z(\beta, x)}{x^{n+1}} dx , \quad (28)$$

Finally the spectral density is the sum over all n densities of states with fixed total occupation number (for $\lambda > 1$)

$$\rho(E) \equiv \frac{1}{2^N} \sum_n C_N^n \rho_n(E) . \quad (29)$$

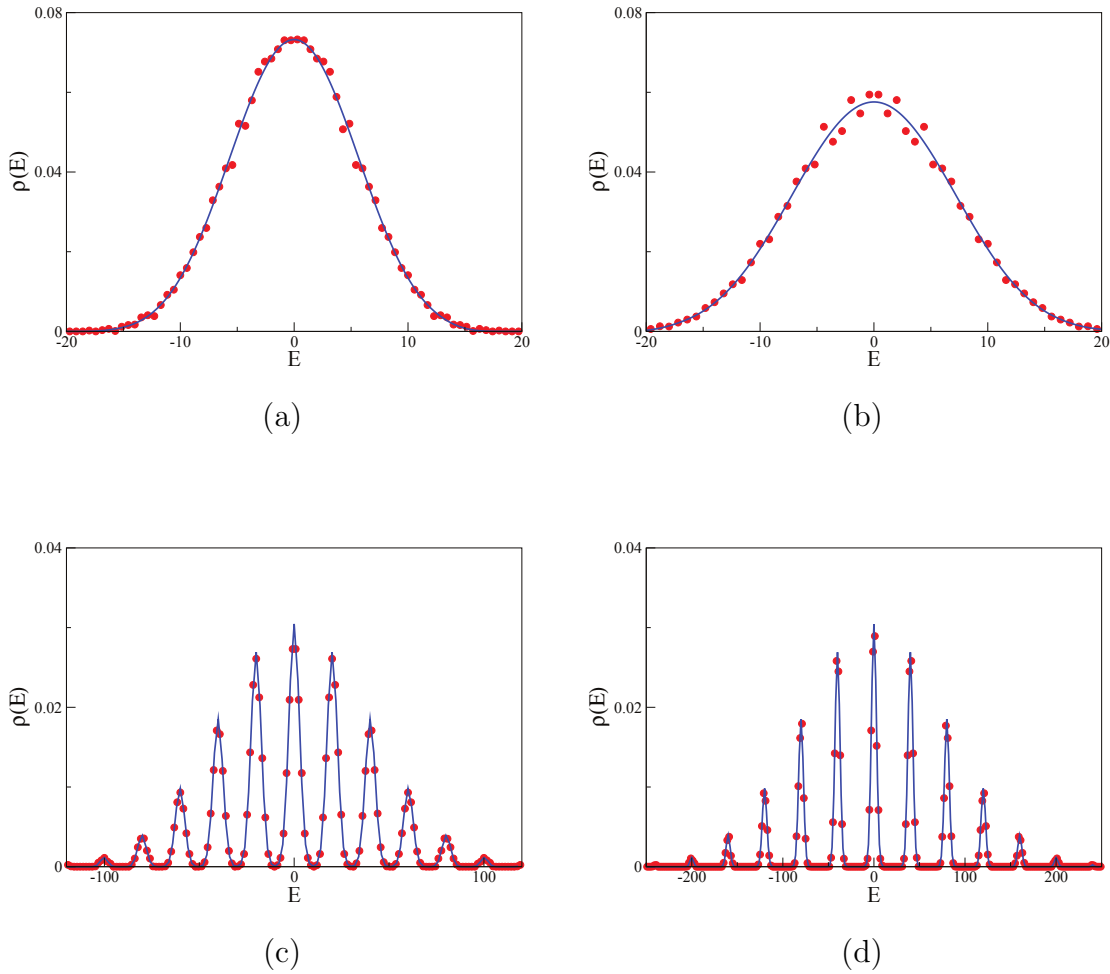


Figure 4. The same as in figure 3 but with $\lambda \geq 1$: (a) $\lambda = 1$, (b) $\lambda = 1.5$, (c) $\lambda = 10$. (d) $\lambda = 20$. Blue thick lines indicate the multi-Gaussian approximation (35).

Here C_N^n is the binomial coefficient which counts the total number of states with fixed n and $\rho_n(E)$ is given by the double integral

$$\rho_n(E) = -\frac{1}{4\pi^2} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\beta e^{\beta E} \oint \frac{Z(\beta, x)}{x^{n+1}} dx. \quad (30)$$

The both integrations can be performed by the saddle point method as above. Calculations are straightforward but the results are tedious, not transparent, and we shall not present them here.

We found that for our purposes the Gaussian approximation is sufficient. To settle it, one has to calculate the lowest moments of the Ising Hamiltonian in a sub-space with fixed n . The simplest way to find the necessary quantities is to calculate the two first terms of expansion of the generating function (27) into series of β and then find the

term with x^n power. The direct calculations lead to the following results

$$\langle E \rangle_n = (N - 2n)\langle e \rangle, \quad \langle e \rangle = \frac{1}{2N} \sum_j e_j \approx \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sqrt{1 - 2\lambda \cos \phi + \lambda^2} d\phi, \quad (31)$$

and

$$\sigma_n^2 \equiv \langle E^2 \rangle_n - \langle E \rangle_n^2 = 4 \frac{n(N-n)}{N-1} (\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2), \quad \langle e^2 \rangle = \frac{1}{4N} \sum_j e_j^2 = 1 + \lambda^2. \quad (32)$$

It means that the mean density of states with fixed n corresponding to each individual peak can well be approximated by the Gaussian

$$\rho_n(E) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} \exp\left(-\frac{(E - \langle E \rangle_n)^2}{2\sigma_n^2}\right), \quad (33)$$

and the total mean density is the sum over all allowed n .

The limiting values of $\langle e \rangle$ and of $\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2$ are the following:

$$\langle e \rangle = \lambda, \quad \langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2 = 1, \quad \text{when } \lambda \rightarrow \infty, \quad \langle e \rangle = 1, \quad \langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2 = \lambda^2, \quad \text{when } \lambda \rightarrow 0. \quad (34)$$

Taking into account different counting for different λ one gets the following multi-Gaussian formulae for the spectral density for the Ising model in transverse field at large but finite N .

For $|\lambda| > 1$

$$\rho_{\text{mG}}(E) = \frac{1}{2^N} \sum_{n=0}^N C_N^n \rho_n(E). \quad (35)$$

For $|\lambda| < 1$

$$\rho_{\text{mG}}(E) = \frac{1}{2^{N-1}} \sum_{n=0}^{N/2} C_N^{2n} \rho_{2n}(E). \quad (36)$$

Figures 3-4 demonstrate that these simple formulae are in a good agreement with numerical results for different coupling constants.

The domain of visibility of peaks in the spectral density can roughly be estimated from the condition

$$|E_{n+1} - E_n| > 2\sigma_n \quad (37)$$

In the center of the spectrum, $n = N/2$ and the above formulae show that the peaks will be observable provided the number of spins, $N < N_{\text{max}}$ where

$$N_{\text{max}} = 2\lambda^2, \quad \lambda \rightarrow \infty, \quad N_{\text{max}} = \frac{8}{\lambda^2}, \quad \lambda \rightarrow 0 \quad (38)$$

For $N > N_{\text{max}}$ peaks will be strongly overlapped and the description by simple Gaussian formula (19) becomes adequate.

3. Ising model in two fields

The Ising model in the transverse field is integrable but when a second longitudinal field is added, the resulting model whose Hamiltonian is given by (4) is not integrable (but see [18] for low lying states). Recently certain properties of such model have been investigated experimentally [19].

Eigenvalues of this problem cannot be calculated analytically and its spectral statistics is well described by the standard GOE distribution [20]. Nevertheless, this model belongs to the class of translational invariant systems with short-range interactions. It is well known (see e.g. [21]) that for such problems the free energy, energy, and entropy are extensive functions of the number of spins (physically it means that the surface energy for short-range interaction systems is much smaller than the volume energy). In particular, the full entropy of N -spins, $S(E, N)$ which determines the full spectral density according to the formula

$$\rho(E) \sim e^{S(E, N)} \quad (39)$$

has the following form (in weak sense, in general,)

$$S(E, N) = NS(E/N) + \mathcal{O}(1). \quad (40)$$

It is also well known (and can be proved e.g. by calculating moments by saddle point method) that the N -th power of any convex function $f(e)$ when $N \rightarrow \infty$ can be approximated in the bulk by the Gaussian centered at the point of maximum, e_0 ($f'(e_0) = 0$)

$$f^N(e) \approx \left(f(e_0) + \frac{(e - e_0)^2}{2} f''(e_0) \right)^N \approx f^N(e_0) e^{-N(e - e_0)^2 / 2\sigma^2}, \quad \sigma^2 = -\frac{f(e_0)}{f''(e_0)}. \quad (41)$$

Combining these two statements together leads to the known conclusion that the spectral density of many-body systems with short-range interactions should be well described in the bulk by the Gaussian approximation which is fixed by the knowledge of only two lowest momenta of the Hamiltonian. For random spin systems, similar result has been proved in [22] by a different method.

The first moments of the Hamiltonian (4) (as in (21)) can be calculated straightforwardly. The result is

$$\langle \mathcal{H} \rangle = 0, \quad \langle \mathcal{H}^2 \rangle = N(1 + \lambda^2 + \alpha^2), \quad \langle \mathcal{H}^3 \rangle = -6N\alpha^2, \quad (42)$$

$$\langle \mathcal{H}^4 \rangle = 3N^2(1 + \lambda^2 + \alpha^2)^2 + N(24\alpha^2 - 2\alpha^4 - 2 - 2\lambda^4 - 8\lambda^2 - 4\lambda^2\alpha^2) \quad (43)$$

These expressions lead to the following formula for the spectral density in the bulk of the Ising model in two fields

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\varepsilon^2}{2}} \left[1 - \frac{\alpha^2}{\sqrt{N}(1 + \lambda^2 + \alpha^2)^{3/2}} (\varepsilon^3 - 3\varepsilon) \right], \quad (44)$$

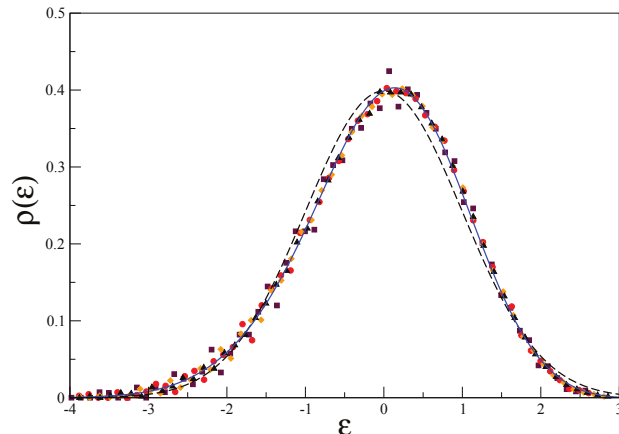


Figure 5. Spectral density for the quantum Ising model in two fields with $\lambda = 1$ and $\alpha = 1$ versus rescaled energy (45). Different symbols indicate results of direct diagonalization with different number of spins. Black squares: $N = 13$, Red circles: $N = 14$, Orange diamond: $N = 15$. Blue triangles: $N = 16$. Blue solid line shows prediction (44) for $N = 16$. Dashed black line indicates the pure Gaussian formula for $N = 16$ without the cubic correction term.

where ε is rescaled energy

$$\varepsilon = E / \sqrt{N(1 + \lambda^2 + \alpha^2)} . \quad (45)$$

The term in the square brackets is introduced to take into account the third moment of the Hamiltonian (42). If necessary, it is easy to incorporate the forth moment and a few higher moments as well by using well known GramCharlier and (or) Edgeworth series in Hermite polynomials. Notice that the convergence of the spectral density to the pure Gaussian form is slow. The first correction term is of the order of $1/\sqrt{N}$ where N is the number of spins. It agrees with the error term obtained in [22] for random spin chain. In figure 5 we present an example of a good agreement of the above formula with the results of direct numerical calculations of spectral density for the Ising model (4) with $\lambda = \alpha = 1$. In particular, this figure demonstrates that the correction term in (44) gives non-negligible contribution at accessible number of spins.

Strong fields

As presented above, there exist general arguments explaining why the density of states for N -body short-range interaction models should be well approximated asymptotically in the bulk by the Gaussian function (see (44)). However, the numerical calculations for large but finite N clearly demonstrate that it is not always the case (see figure 6).

As for the case of quantum Ising model in transverse field discussed in the previous Section, the existence of such peaks in the spectral density is related with degeneracy

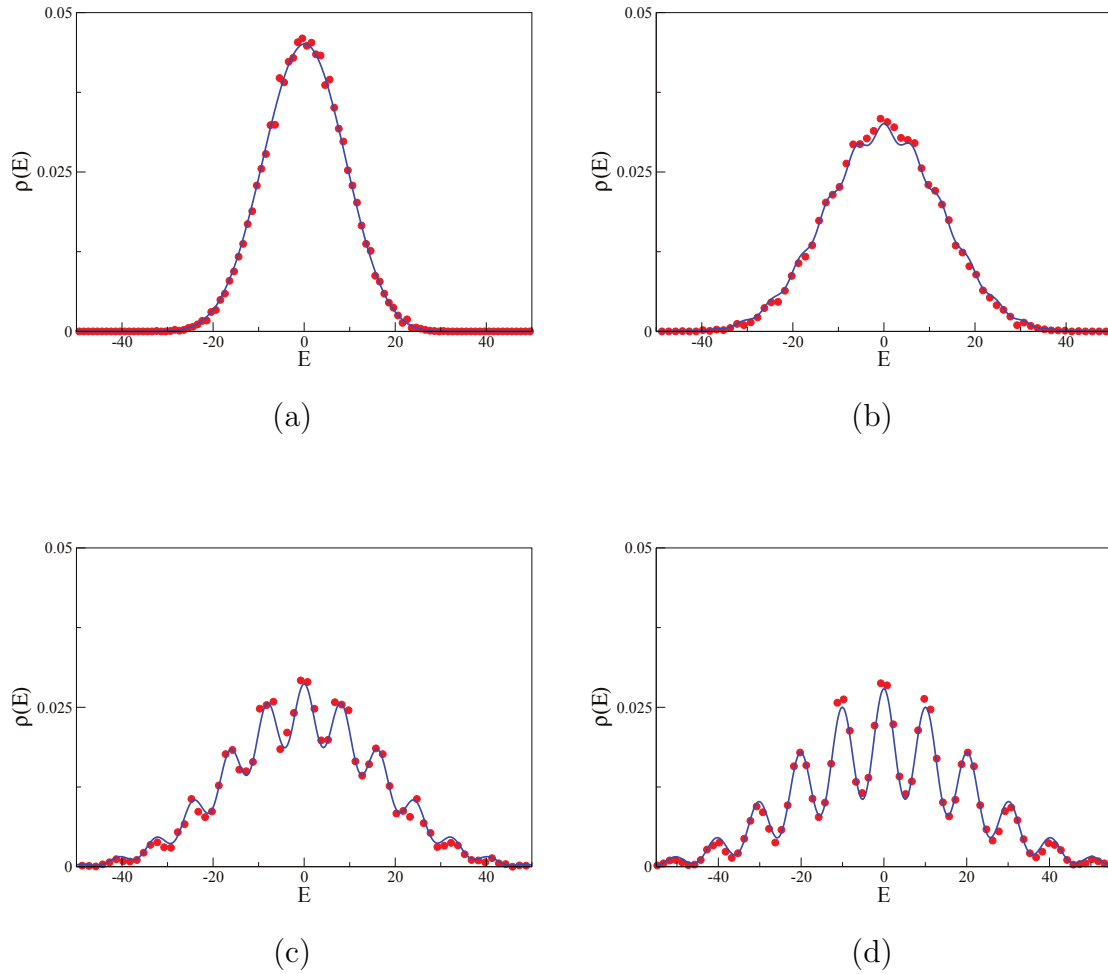


Figure 6. Spectral density for the quantum Ising model in two fields with $\alpha = 0.5$ and $N = 14$ for different values of λ : (a) $\lambda = 2$, (b) $\lambda = 3$, (c) $\lambda = 4$, (d) $\lambda = 5$. Red circles are numerically calculated densities. Blue thick lines indicate the multi-Gaussian approximation (56).

of energy levels at strong fields. For the non-integrable case of the Ising model in two fields it is possible to construct a kind of perturbation series to determine the splitting of such degenerate states.

Let us start with the case of large λ and α where non-perturbed Hamiltonian is the sum of one-spin terms

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_n [\lambda \sigma_n^z + \alpha \sigma_n^x] . \quad (46)$$

It can be diagonalized by the rotation

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_n [\lambda \sigma_n^z + \alpha \sigma_n^x] = -\sqrt{\lambda^2 + \alpha^2} \sum_n \hat{\sigma}_n^z \quad (47)$$

where

$$\hat{\sigma}_n^z = \cos \phi \sigma_n^z + \sin \phi \sigma_n^x, \quad \cos \phi = \frac{\lambda}{\sqrt{\lambda^2 + \alpha^2}}, \quad \sin \phi = \frac{\alpha}{\sqrt{\lambda^2 + \alpha^2}}. \quad (48)$$

The other component of the new spin operator is

$$\hat{\sigma}_n^x = -\sin \phi \sigma_n^z + \cos \phi \sigma_n^x. \quad (49)$$

It is plain that the unperturbed spectrum of this Hamiltonian is

$$E_n^{(0)} = \sqrt{\lambda^2 + \alpha^2}(N - 2n) \quad (50)$$

where n is the total number of (new) spins up and the degeneracy of each level is C_N^n .

The remaining Hamiltonian is the sum of nearest-neighbour interaction terms

$$\mathcal{H}_1 = \sum_n \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x. \quad (51)$$

After the rotation to new spins it takes the form

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 &= - \sum_n (\sin \phi \hat{\sigma}_n^z + \cos \phi \hat{\sigma}_n^x)(\sin \phi \hat{\sigma}_{n+1}^z + \cos \phi \hat{\sigma}_{n+1}^x) \\ &= -\sin^2 \phi \sum_n \hat{\sigma}_n^z \hat{\sigma}_{n+1}^z - \cos^2 \phi \sum_n \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x - \sin \phi \cos \phi \sum_n \hat{\sigma}_n^x (\hat{\sigma}_{n+1}^z + \hat{\sigma}_{n-1}^z). \end{aligned} \quad (52)$$

The standard way of splitting the degeneracies consists in the diagonalization of the interaction Hamiltonian H_1 in the sub-space of all states with the same energy (which in our case corresponds to the fixed number of spin up). Due to exponentially large dimension of such sub-space for the Ising model considered here, this direct approach is not effective.

We propose a different method. As the initial Hamiltonian belongs to the class of short-range interaction, the Hamiltonian projected to the sub-space of states with fixed number of spins up will, necessarily also contain only short-range interactions. As it was done above, one can argue that the spectral density of such projected Hamiltonian is well described by the first two moments of this Hamiltonian. The calculation of these momenta is performed in Appendix B and the results are

$$E_n \equiv \langle \mathcal{H} \rangle_n = \sqrt{\lambda^2 + \alpha^2}(N - 2n) - \left(N - \frac{4n(N - n)}{N - 1} \right) \frac{\alpha^2}{\lambda^2 + \alpha^2}, \quad (53)$$

$$\sigma_n^2 = \frac{2n(N - n)}{N - 1} \frac{\lambda^4}{(\lambda^2 + \alpha^2)^2}. \quad (54)$$

It means that the normalised density of states with fixed number of spins up is the Gaussian with the above parameters

$$\rho_n(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} \exp \left(-\frac{(E - E_n)^2}{2\sigma_n^2} \right) \quad (55)$$

and the total spectral density is the sum over all n

$$\rho_{\text{mG}}(E) = \frac{1}{2^N} \sum_{n=0}^N C_N^n \rho_n(E) \quad (56)$$

Figure 6 shows that this formula agrees well with results of numerical calculations for different values of λ .

In Appendix C it is demonstrated that for the Ising model in two fields the Hamiltonian projected on the sub-space with fixed number of spins up reduces to the well known XX model which has an exact solution. The spectrum of the XX model corresponds to the fermionic filling as in (6). Therefore, in the bulk the XX spectral density can be well approximated by the Gaussian function whose parameters agree with (53). It gives a direct proof that in sub-space of fixed unperturbed energy (i.e. fixed n) spectral density is Gaussian.

The criterium (37) implies that peaks in strong fields are visible if $N < N_{\text{max}}$ where

$$N_{\text{max}} = \frac{2(\lambda^2 + \alpha^2)^3}{\lambda^4}. \quad (57)$$

Small transverse field

Another interesting limit of the Ising model in two fields (4) is when α is fixed and $\lambda \rightarrow 0$. To investigate this case it is convenient first to diagonalize the one-spin part as it is done in (47) and (52). In particular, the diagonal energy in the new z -spin representation is

$$E_{n,k}(\alpha, \lambda) = \sqrt{\alpha^2 + \lambda^2}(N - 2n) - (N - 4k) \sin^2 \phi, \quad \sin \phi = \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + \lambda^2}} \quad (58)$$

Here as above n is the total number of spins up and k is the number of groups of spins in the same directions (cf. figure B1).

When $\lambda = 0$ the unperturbed energy takes the form

$$E_{n,k}^{(0)} = \alpha(N - 2n) + 4k - N \quad (59)$$

We assume that parameter α is of order of 1, therefore this energy is a function of two integers, n and k . The existence of strong peaks in the spectral density depends crucially on exact degeneracies of this energy.

We consider first a characteristic example with integer $\alpha = 1$. In this case, unperturbed energy is simply an even integer, $E_{n,k}^{(0)} = 2R$ where

$$R = 2k - n \quad (60)$$

It means that the sub-space of exactly degenerated states consists of all combinations of spins up and down such that integer $R \equiv 2k - n$ takes a constant value. From (B.7) derived in Appendix B, it follows that the dimension of each degenerate sub-space is

$$\mathcal{N}_R = \sum_{2k-n=R} \frac{N}{k} C_{n-1}^{k-1} C_{N-n-1}^{k-1} \quad (61)$$

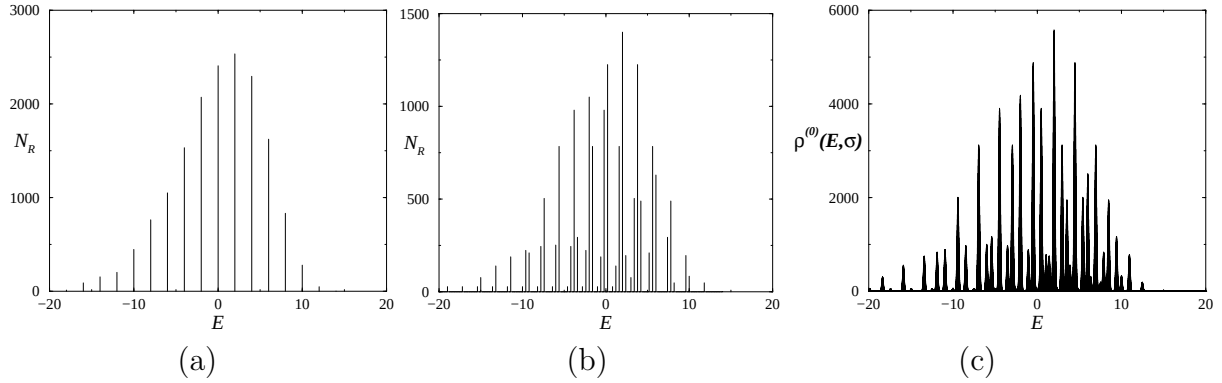


Figure 7. Degeneracies of the unperturbed spectrum of the Ising model in two fields with $N = 14$ and $\lambda = 0$: (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 0.9$, and (c) $\alpha = \sqrt{5} - 1$.

These degeneracies are plotted in figure 7a.

Our second example is $\alpha = 0.9$. In this case unperturbed energy is $E_{n,k}^{(0)} = -0.1N + R/5$ where R is an integer

$$R = 20k - 9n \quad (62)$$

In this case the exact degeneracies are calculated by the formula similar to (61)

$$\mathcal{N}_R = \sum_{20k-9n=R} \frac{N}{k} C_{n-1}^{k-1} C_{N-n-1}^{k-1} . \quad (63)$$

These values are presented in figure 7b. Notice that the combination of number theory and combinatorics leads to peaks with irregular heights.

When longitudinal field α is irrational, the unperturbed spectrum (59) is formally non-degenerated. Nevertheless the density of such spectrum is not constant and has clear peaks related with the continued fraction expansion of α . To illustrate it, we present in figure 7c the density of unperturbed spectrum represented as the double sum over n and k for $\alpha = \sqrt{5} - 1 \approx 1.24$

$$\rho^{(0)}(E, \sigma) = \sum_{n=0}^N \sum_{k=1}^{n-1} f(n, k) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left(-\frac{(E - \alpha(N - 2n) + (N - 4k))^2}{2\sigma^2} \right) . \quad (64)$$

with σ chosen arbitrary, $\sigma = 0.1$. $f(n, k)$ as above is the total number of symbols with fixed n and k given by (B.7).

Peaks of different heights and irregular positions are clearly visible in this picture which has to be compared with figure 7a for $\alpha = 1$ and figure 7b for $\alpha = 0.9$. Notice that figure 7a and figure 7b show true integer degeneracies but figure 7c is only the density of unperturbed states smoothed by σ . For smaller σ more peaks in this figure become visible.

At non-zero but small values of λ each degenerate peak is shifted and acquires a finite width. If peaks are well separated, the peak shift is determined by the first moment

the Hamiltonian $\mathcal{H}$ projected into sub-space with fixed R and the peak width is related with the second moment of the projected Hamiltonian. When unperturbed peaks are very close to each other such simple approximation is questionable and one has to add more perturbation terms related with transitions to almost degenerated states.

In the above examples the most regular peaks correspond to integer $\alpha = 1$ (cf. figure 7a). In this case the contribution to the first moment of the the Hamiltonian $\mathcal{H}_0$ is given by the expression

$$E_R \equiv \langle \mathcal{H} \rangle_R = \frac{1}{\mathcal{N}_R} \sum_{2k-n=R} E_{n,k}(1, \lambda) \quad (65)$$

$$= 2R\sqrt{1+\lambda^2} + N \left(\sqrt{1+\lambda^2} - \frac{1}{1+\lambda^2} \right) \left[1 - \frac{4}{\mathcal{N}_R} \sum_{2k-n=R} C_{n-1}^{k-1} C_{N-n-1}^{k-1} \right]. \quad (66)$$

Of course, this formula is valid at small λ . In the limit $\lambda \rightarrow 0$ it coincides with (60). To take into account all second order terms proportional to λ^2 one should add the contribution due to transitions into states with different energies. They can be calculated within the usual perturbation series. The details of the calculations in the second order in λ are presented in Appendix E. The result is

$$\Delta E_R = \frac{1}{\mathcal{N}_R} \sum_{2k-n=R} \Delta E_{n,N-n;k}, \quad (67)$$

where

$$\Delta E_{n,m;k} = \frac{2\lambda^2 N}{(1+\lambda^2)^2} \left[\left(\frac{2k-n}{3} + 2k-m \right) \frac{1}{k} C_{n-1}^{k-1} C_{m-1}^{k-1} + \frac{2}{3} (C_{n-2}^{k-2} C_{m-1}^{k-1} - C_{n-1}^{k-1} C_{m-2}^{k-2}) \right]. \quad (68)$$

Up to the second order in λ the mean energy is the sum $E_R + \Delta E_R$. We stress that we ignore here the mixing of different transitions. The discussion of higher order terms is beyond the scope of the paper and will be given elsewhere.

To calculate the variances of Hamiltonian (52) for $\alpha = 1$ in sub-spaces with fixed value of R it is necessary to select terms which do not change the energy (60). Hamiltonian (52) consists of two terms, the first one consists in the inversion of two-nearby spins,

$$\mathcal{H}_1^{(1)} = -\cos^2 \phi \sum_n \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x \quad (69)$$

and the second changes the direction of only one spin

$$\mathcal{H}_1^{(2)} = -\sin \phi \cos \phi \sum_n \hat{\sigma}_n^x (\hat{\sigma}_{n+1}^z + \hat{\sigma}_{n-1}^z) \quad (70)$$

The later term always corresponds to transitions with $n \rightarrow n \pm 1$ and $k \rightarrow k$ or $k \rightarrow k \pm 1$. It changes the energy of states and can be ignored when we are interesting in splitting of degenerated states. The calculation of corresponding variances of $\mathcal{H}_1^{(1)}$ in the sub-space

can be done by straightforward combinatorics. The details are presented in Appendix D. The final result is

$$\sigma_R^2 \equiv \langle \mathcal{H}^2 \rangle_R = \frac{\lambda^4}{(1 + \lambda^2)^2 \mathcal{N}_R} \sum_{2k-n=R} [N_a(n, k) + N_b(n, k) + N_c(n, k)] \quad (71)$$

with

$$\begin{aligned} N_a(n, k) &= N C_{n-1}^{k-1} C_{N-n-3}^k, & N_b(n, k) &= N C_{n-3}^{k-2} C_{N-n-1}^{k-1}, \\ N_c(n, k) &= 2N [C_{n-2}^{k-1} C_{N-n-2}^{k-2} + C_{N-n-2}^{k-1} C_{n-2}^{k-2}]. \end{aligned} \quad (72)$$

Here subscripts a , b , and c indicate different transitions with constant R : (a) $n \rightarrow n-2$ and $k \rightarrow k-1$, (b) $n \rightarrow n+2$ and $k \rightarrow k+1$, (c) $n \rightarrow n$ and $k \rightarrow k$. Transition indicated by subscript b are the inverse of transitions a , so their total contributions to the variance are the same.

In the approximation of well separated peaks R serves as a good quantum number and the spectral density in sub-space with fixed R is the Gaussian

$$\rho_R(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_R^2}} \exp\left(-\frac{(E - E_R)^2}{2\sigma_R^2}\right). \quad (73)$$

In the leading order the total spectral density is the sum over all such Gaussians

$$\rho_{\text{mG}}(E) = \frac{1}{2^N} \sum_R \mathcal{N}_R \rho_R(E). \quad (74)$$

In figure 8 the comparison between the spectral density of the Ising model with $\alpha = 1$ and different values of λ calculated numerically by direct diagonalization and by the multi-Gaussian approximation formula (74) is presented. The agreement is very good at small λ . Even at $\lambda = 0.7$ main features of numerics are well reproduced by the simple formula (74). Notice that from (66) and (71) it follows that for $\alpha = 1$ peaks are visible when $N < N_{\text{max}}$ where N_{max} is calculated from (37)

$$N_{\text{max}} \sim \frac{1}{\lambda^4} \quad (75)$$

which explains the appearance of very pronounced peaks in this case.

For non-integer values of α different peaks in unperturbed density may come close to each other and one needs a careful calculation of a few terms perturbation series to get a good agreement with true spectral density at small λ . We consider here a slightly different approximation suitable for the both rational and irrational values of α .

Instead of representing the density as a simple sum over integer R as in (74), we propose to represent it as a double sum over n and k

$$\rho_{\text{mG}}(E) = \sum_{n=0}^N \sum_{k=1}^{n-1} f(n, k) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(n, k)}} \exp\left(-\frac{(E - E(n, k))^2}{2\sigma^2(n, k)}\right), \quad (76)$$

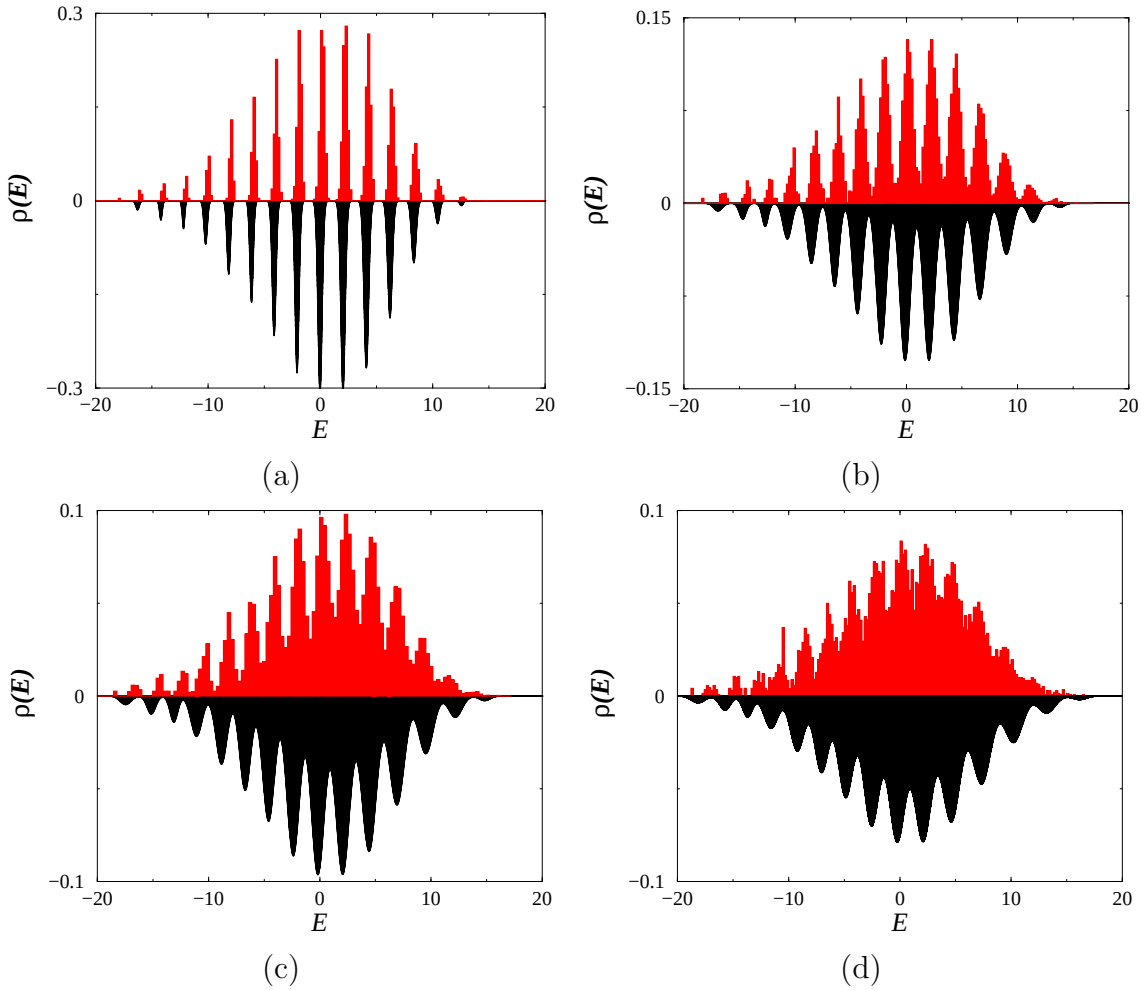


Figure 8. Mean spectral density for the quantum Ising model in two fields with $\alpha = 1$, $N = 14$, and different λ . (a) $\lambda = 0.3$, (b) $\lambda = 0.5$, (c) $\lambda = 0.6$, (d) $\lambda = 0.7$. Upper red lines are histograms of numerically calculated densities. Lower black thick lines indicate the multi-Gaussian approximation (74).

where $E(n, k)$ and $\sigma^2(n, k)$ are the first and the second moments of Hamiltonians (47) and (52) in the state with fixed n and k . We use unperturbed value (59) for $E(n, k)$:

$$E(n, k) = \alpha(N - 2n) + 4k - N. \quad (77)$$

The second moment can be calculated as in Appendix D. The difference is that for generic α one has to take into account transitions which conserve the both n and k . In the notation of Appendix D they corresponds to the case (c). From (D.12) together with (B.7) one finds

$$\sigma^2(n, k) = \frac{2\lambda^4}{(\alpha^2 + \lambda^2)^2} \frac{k(k-1)(N-2k)}{(n-1)(N-n-1)} \approx \frac{2\lambda^4}{(\alpha^2 + \lambda^2)^2} \frac{k^2(N-2k)}{n(N-n)}. \quad (78)$$

The last expression corresponds to large values of n and k . It is this formula that we use in calculations.

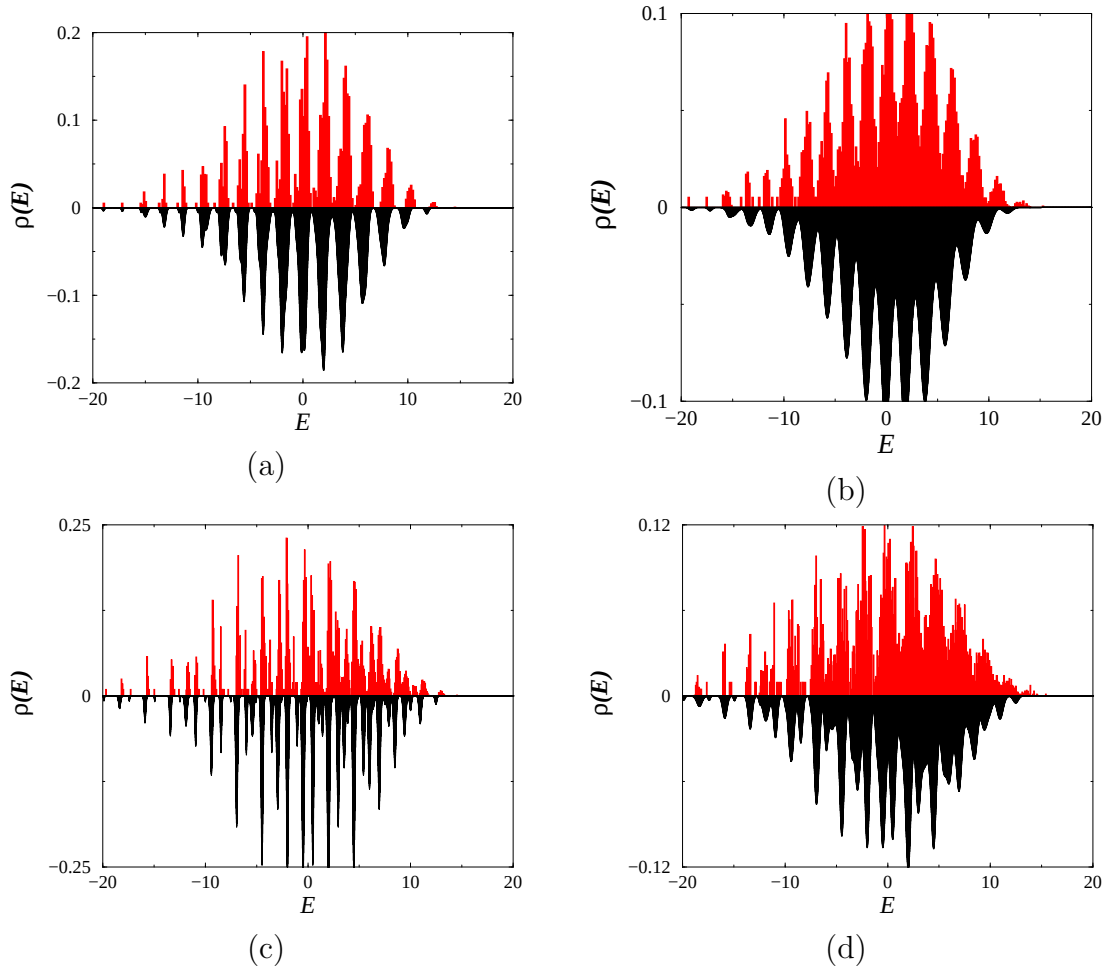


Figure 9. The same as in figure 8 but with different values of α and λ : (a) $\alpha = 0.9$, $\lambda = 0.3$; (b) $\alpha = 0.9$, $\lambda = 0.5$; (c) $\alpha = \sqrt{5} - 1$, $\lambda = 0.3$; (d) $\alpha = \sqrt{5} - 1$, $\lambda = 0.5$.

4. Conclusion

We investigate spectral density of one-dimensional spin chains. As a typical example we consider the quantum Ising model in transverse and longitudinal fields. When all coupling constants are of the same order, the spectral density in the bulk is well described by the Gaussian whose parameters are calculated from the knowledge of the two first moments of the full Hamiltonian. This Gaussian shape of the density is typical for many-body models with short-range interactions in thermodynamic limit when the number of particles tends to infinity. For large but finite number of particles, there are two main types of corrections to such asymptotic result. The first corresponds to power corrections which can be calculated from the third and higher moments of the full Hamiltonian. The second corrections are of a different nature. They are related with strong degeneracies of unperturbed spectrum in certain limits of coupling constants. For a small deviations from these limits the degeneracies are lifted and finite-width peaks appear. We demonstrate that in the leading approximation these peaks can be described by a superposition of different Gaussians functions with parameters computed from the

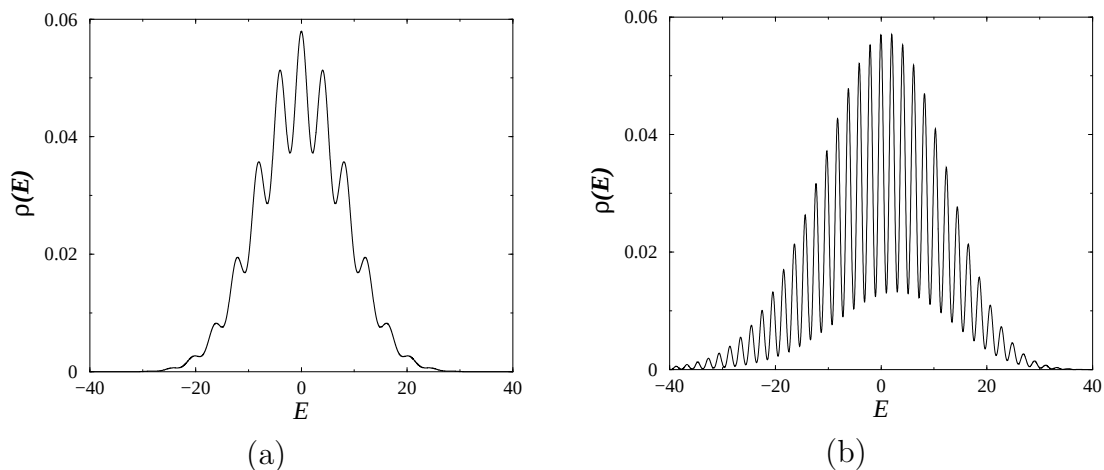


Figure 10. Predictions for spectral density for the quantum Ising model with $N = 64$ spins and: (a) formula (36) with $\alpha = 0$, $\lambda = \frac{1}{4}$. (b) Formula (74) with $\alpha = 1$, $\lambda = \frac{1}{3}$.

first and the second moments of the Hamiltonian projected to certain sub-spaces. The resulting formulae are simple but agree well with numerical calculations in the bulk. The reason of peaks existence is the application of perturbation theory for many-body systems. Usually (see e.g. [24], [25]) one argues that for many-body systems with arbitrary small interactions perturbation series cannot be applied due to exponentially dense spectrum of unperturbed states. For systems considered this conclusion is not correct because by construction these models may have strong degeneracies.

The existence of many peaks in spectral density is quite robust phenomenon. Though for very large number of spins these peaks disappear, for number of spins accessible in today numerical calculations and reasonable coupling constants the density does contain clear peaks. For example, in figure 10 we present predictions for spectral densities of the Ising model with $N = 64$ spins which is far beyond dimensions reachable in direct diagonalization. It is clearly seen that density is not a smooth Gaussian-type function but, instead, contains numerous identifiable peaks.

Despite the fact that we consider only the Ising model in two fields our results should be valid for a large class of models with local interactions e.g. the Bose-Hubbard model where spectral density also have pronounced peaks at certain limits of coupling constant [23]. In general, peaks in spectral densities may and will influence many physical (and statistical) properties of models considered. In particular, they may alter deduction of large N behaviour from finite N calculations. We think that further investigation of such mesodynamics (as opposite to thermodynamics) phenomena are of importance.

Acknowledgments

The authors are grateful to Guillaume Roux for numerous discussions and for pointing out Ref. [23]. YYA is supported by the CFM foundation.

Appendix A. The spectrum of the Ising model

The purpose of this Appendix is to discuss in detail the construction of energy levels $\{E_p, 0 \leq p \leq 2^N - 1\}$ for the Ising model in transverse field (5) with finite value of the number of spins N . This construction is rarely discussed in literature mostly due to the interest in the thermodynamic limit $N \rightarrow \infty$.

As it is well known, the Ising model in transverse field is integrable by the Jordan-Wigner transformation which maps the spin system into a quadratic fermion problem (see e.g. [16], [17])

$$a_n = \left(\prod_{j=1}^{n-1} \sigma_j^z \right) \sigma_n^+ , \quad a_n^\dagger = \left(\prod_{j=1}^{n-1} \sigma_j^z \right) \sigma_n^- , \quad \sigma_n^z = 1 - 2a_n^\dagger a_n , \quad \sigma_n^\pm = \frac{1}{2}(\sigma_n^x \pm i\sigma_n^y) . \quad (\text{A.1})$$

Here a_n and $a_n^\dagger$ are fermionic annihilation and creation operators (spin up corresponds to the absence of fermion).

When one imposes periodic boundary conditions for spin operators ($\sigma_{N+1}^\alpha = \sigma_1^\alpha$, $\alpha = x, y, z$), boundary conditions for fermions have to be fixed as follows

$$a_{N+1} = -\mathcal{P}a_1 , \quad (\text{A.2})$$

where $\mathcal{P}$ is conserved spin-parity operator

$$\mathcal{P} = \prod_{n=1}^N \sigma_n^z = (-1)^{\mathcal{N}_f} \quad (\text{A.3})$$

and $\mathcal{N}_f$ is the total number of a -fermions

$$\mathcal{N}_f = \sum_{n=1}^N a_n^\dagger a_n . \quad (\text{A.4})$$

To diagonalize the resulting fermionic Hamiltonian one has first to perform the Fourier transform of a_n , i.e. introduce new fermionic operators, b_k

$$b_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikn} a_n . \quad (\text{A.5})$$

From boundary conditions it follows that values of k have to be quantized,

$$k_j = \frac{\pi}{N} \begin{cases} 2j, & \mathcal{P} = -1 \\ 2j+1, & \mathcal{P} = 1 \end{cases} , \quad j = 0, 1, \dots, N-1 . \quad (\text{A.6})$$

Notice that $\mathcal{N}_f = \sum_k b_k^\dagger b_k$.

After such Fourier transform the Ising Hamiltonian takes the form

$$\mathcal{H} = 2 \sum_k (\lambda - \cos k) \left(b_k^\dagger b_k - \frac{1}{2} \right) + i \sum_k (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger - b_{-k} b_k) \sin k . \quad (\text{A.7})$$

The last step consists in performing a Bogoliubov transformation which mixed b_k and $b_{-k}^\dagger$ operators ($b_{-j} \equiv b_{2N-j-1}$)

$$\eta_k = \cos \theta_k b_k - i \sin \theta_k b_{-k}^\dagger, \quad \tan 2\theta_k = \frac{\sin k}{\cos k - \lambda}. \quad (\text{A.8})$$

In terms of these η_k operators the Hamiltonian is diagonalized,

$$\mathcal{H} = \sum_j e_j \left(n_j - \frac{1}{2} \right), \quad n_j = \eta_{k_j}^\dagger \eta_{k_j}, \quad (\text{A.9})$$

and e_j are determined in (7). The spectrum of the Ising chain is obtained by adding excitations with different impulsions to the ground state energy

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda_k. \quad (\text{A.10})$$

As the parity is an integral of motion, the number of excitations added has to be chosen carefully in order to fulfill the condition (A.3).

Anti-periodic boundary conditions

Anti-periodic boundary conditions mean that momenta of excitations are proportional to odd integers (see (A.6)). From the above discussion it follows that the spin-parity $\mathcal{P} = 1$. Then for anti-periodic boundary conditions the total number of excitations has to be even.

By definition, the Bogoliubov vacuum, $|\Psi_0^{\text{ap}}\rangle$, is given by the condition that $\eta_k |\Psi_0^{\text{ap}}\rangle = 0$. As $\sin k \neq 0$ for all these allowed values of k , the Bogoliubov vacuum in terms of b operators has the form

$$|\Psi_0^{\text{ap}}\rangle = \prod_{k>0} \left(\cos \theta_k + i \sin \theta_k b_k^\dagger b_{-k}^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{A.11})$$

where $|0\rangle$ is the b vacuum, i.e. $b_k |0\rangle = 0$. Therefore $|\Psi_0^{\text{ap}}\rangle$ is composed with an even number of b particles created by pairs $b_k^\dagger b_{-k}^\dagger$ of opposite non-zero momenta. Consequently, in order to fulfil the relation (A.3) one has to consider addition of all combination of even number of excitations to E_0 to reconstruct half of the eigen-energies. The other half comes from the sector of parity $\mathcal{P} = -1$ which corresponds to periodic boundary conditions.

Periodic boundary conditions

Excitations momenta are now given by even integers as in (A.6) and the total number of excitations has to be odd (for even N).

In this sub-space $\sin k = 0$ for $k = 0$ and π , i.e. for $j = 0$ and $j = N/2$ (for even N). Hamiltonian (A.7) is diagonal for b fermions with these two values of k and their energies are

$$E_0 = 2(\lambda - 1)(b_0^\dagger b_0 - \frac{1}{2}), \quad E_\pi = 2(1 + \lambda)(b_\pi^\dagger b_\pi - \frac{1}{2}). \quad (\text{A.12})$$

Therefore, the Bogoliubov transformation (A.8) has to be performed only over all other values of momenta.

If $\lambda > 1$, the number of excitations of momenta 0 and π have to be zero in the lowest energy state and the Bogoliubov vacuum is

$$|\Psi_0^p\rangle = \prod_{\substack{k>0 \\ k\neq\pi}} \left(u_k + iv_k b_k^\dagger b_{-k}^\dagger \right) |0\rangle . \quad (\text{A.13})$$

This vacuum contains even number of b particles and only odd number of excitations (i.e. vacuum energy itself is not in the spectrum) is allowed.

If $\lambda < 1$, energy of the excitation with momentum 0 is negative, therefore it should not be included in the ground state (with $\eta_0 = b_0^\dagger$). The vacuum now has the form

$$|\Psi_0^p\rangle \equiv b_0^\dagger \prod_{\substack{k>0 \\ k\neq\pi}} \left(u_k + iv_k b_k^\dagger b_{-k}^\dagger \right) |0\rangle . \quad (\text{A.14})$$

Such vacuum contains odd number of b fermions and one can add only even number of excitations.

Finally, for positive spin parity one has to add odd number of excitations when $|\lambda| > 1$ and even number of excitations when $|\lambda| < 1$.

Appendix B. Calculation of the first two moments of the Ising Hamiltonian in the fixed- n sub-space

The full Hamiltonian of the Ising model in two fields (4) is by construction the sum of two Hamiltonians

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 , \quad (\text{B.1})$$

where $\mathcal{H}_0$ is determined by (47) and $\mathcal{H}_1$ by (52).

Our purpose is to calculate the first and the second moments of this Hamiltonian in the sub-space of states with fixed number of spins up. The total number of such states is C_N^n where n is the number of spins up. Any of such states can be represented as a sequence of k groups with n_j spins up followed by m_j spins down (see figure B1). We indicate such state by $\Psi_{n,k}$. Notice that there exist many states with fixed values of n and k .

By construction all n_j and m_j are bigger or equal to 1, $n_j \geq 1$, $m_j \geq 1$, and their sum is fixed

$$\sum_{j=1}^k n_j = n, \quad \sum_{j=1}^k m_j = m, \quad n + m = N . \quad (\text{B.2})$$

Hamiltonian $\mathcal{H}_0$ is diagonal in this basis and in $\mathcal{H}_1$ (see (52)) only the term $\sin^2 \phi \sum_n \hat{\sigma}_n^z \hat{\sigma}_{n+1}^z$ gives non-zero contribution to the first moment since other terms flip spins. Therefore in any state with fixed n and k

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{n,k} = \sqrt{\lambda^2 + \alpha^2} (N - 2n) - (N - 4k) \sin^2 \phi , \quad (\text{B.3})$$

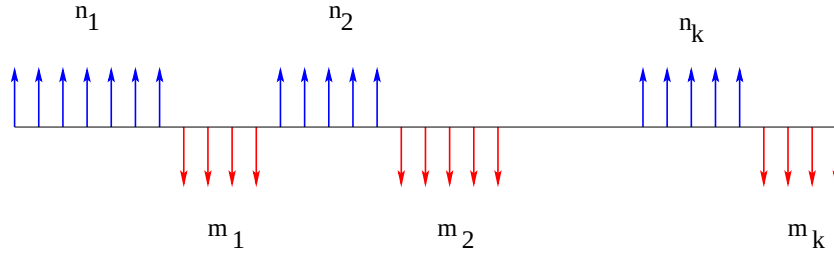


Figure B1. Typical structure of a state with different directions of spins. Blue arrows up indicate spins with $\sigma^z = 1$ and red arrow down indicate spins with $\sigma^z = -1$.

where ϕ is as in (48) and $\langle \dots \rangle_{n,k}$ denotes $\langle \Psi_{n,k} | \dots | \Psi_{n,k} \rangle$.

The next step is to calculate the variance in the subspace with fixed n . It means that in the intermediate states (i.e. in $\langle \Psi_{\sigma'} | \mathcal{H}_1 | \Psi_{\sigma} \rangle$) one has to take into account only those states $\Psi_{\sigma'}$ which have exactly the same number n of spins up as in Ψ_{σ} . By examining $\mathcal{H}_1$ it appears that only the term $\hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x$ may conserve n . It is evident that only the flipping of boundary spins separating blocks of spins down and up does not change energy. The number of such transition is $2k$ where k is the number of groups of spins in the same directions. Therefore,

$$\langle \mathcal{H}^2 \rangle_{n,k} - \langle \mathcal{H} \rangle_{n,k}^2 \equiv \sigma_{n,k}^2 = 2k \cos^4 \phi. \quad (\text{B.4})$$

The last step consists in finding the number of states with fixed values of n and k which we denote by $f(n, k)$. It can be calculated as follows.

The number of cases when $n_1 + n_2 + \dots + n_k = n$ and $n_j \geq 1$ are well known (and can easily be obtained for instance by a generating function method)

$$\mathcal{N}(n, k) = C_{n-1}^{k-1}. \quad (\text{B.5})$$

The same is true for m_j

$$\mathcal{N}(m, k) = C_{m-1}^{k-1}. \quad (\text{B.6})$$

Total number of possibilities is the product of these two expressions. But it corresponds to a fixed initial point. Summing over all points is equivalent to multiplication by N . Doing this we get cyclic permuted configurations k times, therefore, the result has to be divided by k . It gives

$$f(n, k) = \frac{N}{k} C_{n-1}^{k-1} C_{N-n-1}^{k-1}. \quad (\text{B.7})$$

This formula is valid provided $k \neq 0$. There is two cases with $k = 0$. One with $n = N$ when all spins are up and one with $n = 0$ when all spins are down. When one uses this formula for calculating the sum over all k of a polynomial of k the constant term gives C_N^n which is the correct answer for $n = 0$ and $n = N$. Other terms are powers of k and are absent when $k = 0$. Therefore one can sum over k from 1 to n and then sum over all n from 0 to N .

The above formulae has been calculated for states with fixed value of n and k . But the unperturbed energy (50) depends only on n , so to get the first two moments of the Hamiltonian in the sub-space of fixed n one has to sum over all possible k

$$\langle \mathcal{H} \rangle_n = \frac{1}{C_N^n} \sum_{k=0}^n f(n, k) \langle \mathcal{H} \rangle_{n,k}, \quad \sigma_n^2 = \frac{1}{C_N^n} \sum_{k=0}^n f(n, k) \sigma_{n,k}^2 \quad (\text{B.8})$$

Using the relations

$$\sum_{k=1}^n f(n, k) = C_N^n, \quad \sum_{k=1}^n k f(n, k) = \frac{n(N-n)}{N-1} C_N^n \quad (\text{B.9})$$

one finds that the first moment of the Ising Hamiltonian and its variance calculated in the sub-space with n spins up are

$$\langle \mathcal{H} \rangle_n = \sqrt{\lambda^2 + \alpha^2} (N - 2n) - (N - 4\bar{k}(n)) \sin^2 \phi \quad (\text{B.10})$$

$$\sigma_n^2 = 2\bar{k}(n) \cos^4 \phi \quad (\text{B.11})$$

where $\bar{k}(n)$ is the mean value of k over states with fixed n

$$\bar{k}(n) \equiv \frac{1}{C_N^n} \sum_{k=1}^n k f(n, k) = \frac{n(N-n)}{N-1} \quad (\text{B.12})$$

Appendix C. More careful approach by using the XX model

The Hamiltonian of the Ising model in two fields contains terms of different nature. There exists a part of this Hamiltonian which does not change the total number of spins up, n , and the rest which changes this number. When we are interested in the splitting of initially degenerated levels, these two parts act differently. The latter can be taken into account in the usual perturbation series as it has been done in Appendix E. The principal problem is the n conserving part as no simple perturbation expansion is possible. The standard approach is to diagonalise this part to find correct energies and eigenfunctions in the zeroth order. What we did is to avoid the direct diagonalisation. Our main point is that, though we do not know in general how eigenvalues split exactly, we do know the first and the second moment of n -conserving Hamiltonian and as has been discussed in previous Sections the distribution of eigenvalues of projected Hamiltonian has to be close to the Gaussian function. To check it analytically it is necessary to calculate high moments of this projected Hamiltonian in the limit $N \rightarrow \infty$ and see if they correspond to the Gaussain values. We are unaware of direct combinatorial proof of this statement. But for the Ising model in two fields it can be done by using the XX-model. Indeed, for the Ising model the projected Hamiltonian in the leading order has the form (cf. (47) and (52))

$$\mathcal{H}_n = -\sqrt{\lambda^2 + \alpha^2} \sum_p \hat{\sigma}_p^z - \cos^2 \phi \sum_p [\hat{\sigma}_p^x \hat{\sigma}_{p+1}^x]_n \quad (\text{C.1})$$

where $[\dots]_n$ denotes the n -conserving part of the corresponding expression. But it is easy to check that

$$[\sigma_p^x \sigma_{p+1}^x]_n = \frac{1}{2} [\sigma_p^x \sigma_{p+1}^x + \sigma_p^y \sigma_{p+1}^y] \quad (\text{C.2})$$

under conditions that the total z -spin is n .

The last model is the well known XX-model (see e.g. [16])

$$\mathcal{H}_n = -\cos^2 \phi \left(\lambda' \sum_p \sigma_p^z + \sum_p \frac{1}{2} [\sigma_p^x \sigma_{p+1}^x + \sigma_p^y \sigma_{p+1}^y] \right), \quad \lambda' = \frac{\sqrt{\lambda^2 + \alpha^2}}{\cos^2 \phi} \quad (\text{C.3})$$

which has an exact solution. It conserves the total z -spin and can be solved by the Wigner-Jordan transformation. The resulting energies are

$$E = \cos^2 \phi \sum_{n_j} 2e_j \left(n_j - \frac{1}{2} \right) \quad (\text{C.4})$$

where for $\lambda' > 1$, $e_j = \lambda' - \cos \phi_j$ and $n_j = 0, 1$. Of course, one has to fix the total number of excitations, $\sum_j n_j = n$

The discussion can be performed as above and using (31) and (32) one concludes that, indeed, the moments of the Hamiltonian (C.1) are Gaussian with the first moment

$$\langle E \rangle = \sqrt{\lambda^2 + \alpha^2} (N - 2n) \quad (\text{C.5})$$

and the variance

$$\sigma_n^2 \equiv \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{2n(N - n)}{N - 1} \cos^4 \phi \quad (\text{C.6})$$

which are the same as what we have used above.

Appendix D. Calculations of variances for the Ising model in two fields with $\alpha = 1$ and small λ

Hamiltonian $\mathcal{H}_1^{(1)}$ given by (69) induces transitions with $n \rightarrow n$, $n \rightarrow n \pm 2$, $k \rightarrow k$, and $k \rightarrow k \pm 1$. Direct inspections show that there exist 3 possible type of transitions which do not change energy (60). They correspond to (a) $n \rightarrow n + 2$ and $k \rightarrow k + 1$, (b) $n \rightarrow n - 2$ and $k \rightarrow k - 1$, and (c) $n \rightarrow n$ and $k \rightarrow k$. These possibilities are schematically indicated in figure D1.

The simplest way of finding the corresponding variances is the use of generating function formalism. We present in details the calculations only for the transition $n \rightarrow n - 2$ and $k \rightarrow k - 1$ indicated in figure D1a. Other cases are similar and we shall give only the final results.

The transition $n \rightarrow n - 2$ and $k \rightarrow k - 1$ appears any times when $n_j = 2$ (see figure D1a). Therefore, it is necessary to find the total number of groups of only two nearby spins in a sequence of k groups and n_j spins up such that

$$\sum_{j=1}^k n_j = n, \quad n_j \geq 1. \quad (\text{D.1})$$

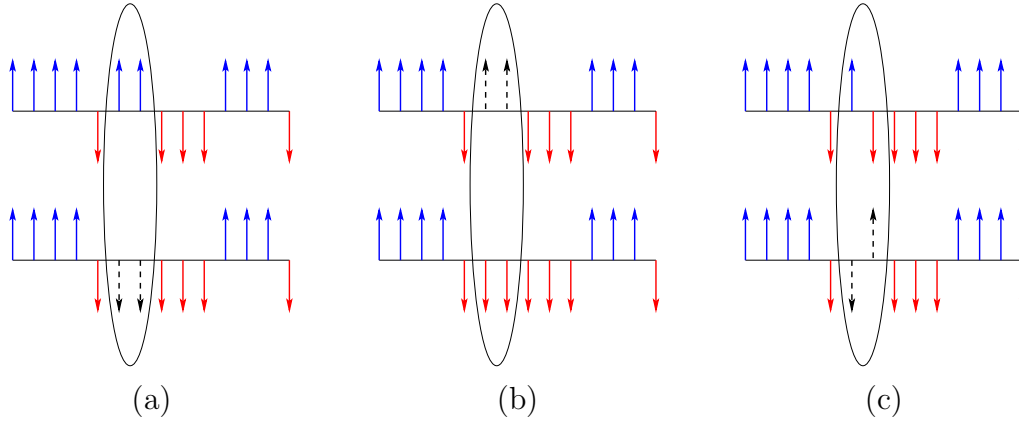


Figure D1. Two-spins flip transitions which do not change unperturbed energy (60): (a) $n \rightarrow n - 2$ and $k \rightarrow k - 1$, (b) $n \rightarrow n + 2$ and $k \rightarrow k + 1$, (c) $n \rightarrow n$ and $k \rightarrow k$. For clarity the inverted spins are encircled.

The total number of all partitions satisfying (D.1) is C_{n-1}^{k-1} .

Consider partitions (D.1) when there exist exactly p groups of nearby two spins, $n_j = 2$ up and all other groups have either $n_i \geq 3$ or $n_i = 1$. Let $F_p(x)$ be the generating function of such events

$$F_p(x) = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_k} x^{n_1 + n_2 + \dots + n_k}, \quad (\text{D.2})$$

where the summation is done by imposing all required restrictions. To find it one has to choose first p indices from k indices and put for them $n_j = 2$. All remaining $k - p$ indices have to be either 1 or any number greater or equal 3. It gives

$$F_p(x) = C_k^p x^{2p} \left(x + \frac{x^3}{1-x} \right)^{k-p}. \quad (\text{D.3})$$

The number of states with p groups of two spins up equals the coefficient, $A_p(n)$, in front of x^n term in series on x of this function,

$$F_p(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(p) x^n \quad (\text{D.4})$$

which can be expressed through the binomial coefficients.

The total contribution of transitions $n \rightarrow n - 2$ and $k \rightarrow k - 1$ is, thus, the sum over all p

$$N_2(n, k) = \sum_{p=0}^k p A_n(p). \quad (\text{D.5})$$

To find this sum it is convenient to first calculate the sum

$$\sum_{p=0}^k e^{sp} C_k^p x^{2p} \left(x + \frac{x^3}{1-x} \right)^{k-p} = \left(x^2 e^s + x + \frac{x^3}{1-x} \right)^k, \quad (\text{D.6})$$

and then differentiate it by s , and put in the result $s = 0$. It leads to the statement that $N_2(n, k)$ is the coefficient of x^n of the function

$$F_1(x) = kx^2 \left(\frac{x}{1-x} \right)^{k-1}. \quad (\text{D.7})$$

Using the relation

$$C_{-m}^r = (-1)^r C_{m+r-1}^{m-1} \quad (\text{D.8})$$

one obtains

$$N_2(n, k) = k C_{n-3}^{k-2}. \quad (\text{D.9})$$

The full answer is the product of this quantity and $N/k C_{m-1}^{k-1}$ (cf. Appendix B)

$$N_a(n, m; k) = N C_{n-3}^{k-2} C_{m-1}^{k-1}. \quad (\text{D.10})$$

Transition $n \rightarrow n+2$ and $k \rightarrow k+1$ correspond to the inversion of two nearby spins when there exist a group of spins down such that $m_j \geq 3$ as in figure D1b. This transition is the inverse of the transition $n \rightarrow n-2$ and $k \rightarrow k-1$ discussed above (cf. figure D1a and figure D1b). The total number of such events can be calculated as above by using the corresponding generating function. The result is

$$N_b(n, m; k) = N_a(n+2, m-2; k+1) = N C_{n-1}^{k-1} C_{m-3}^k. \quad (\text{D.11})$$

Transitions $n \rightarrow n$ and $k \rightarrow k$ are possible in 4 closely related cases: (i) $m_j = 1$, $n_{j+1} \geq 2$, (ii) $m_j = 1$, $n_j \geq 2$, (iii) $n_j = 1$, $m_j \geq 2$, (iv) $n_j = 1$, $m_{j-1} \geq 2$. The calculations are straightforward and the total contribution of all 4 above possibilities is

$$N_c(n, m; k) = 2N [C_{m-2}^{k-1} C_{n-2}^{k-2} + C_{n-2}^{k-1} C_{m-2}^{k-2}]. \quad (\text{D.12})$$

Appendix E. Correction terms

Expression (58) is just the dominant contributions for fixed α and small λ . Correction terms include the transitions between states with different unperturbed energies and can be calculated within the usual perturbation series. In the leading order

$$\Delta E_\sigma = \sum_f \frac{|\mathcal{H}_{\sigma f}|^2}{E_\sigma - E_f}, \quad (\text{E.1})$$

where the summation is done over all possible final states such that $E_f \neq E_\sigma$.

The Hamiltonian $\mathcal{H}_1$ given by (52) contains two terms which give contributions to the mean energy. The first one

$$\mathcal{H}^{(1)} = -\frac{\lambda^2}{\alpha^2 + \lambda^2} \sum_n \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x \quad (\text{E.2})$$

changes two near-by spins and is of the second order in λ . The second term

$$\mathcal{H}^{(2)} = -\sin \phi \cos \phi \sum_n \hat{\sigma}_n^x (\hat{\sigma}_{n+1}^z + \hat{\sigma}_{n-1}^z) \quad (\text{E.3})$$

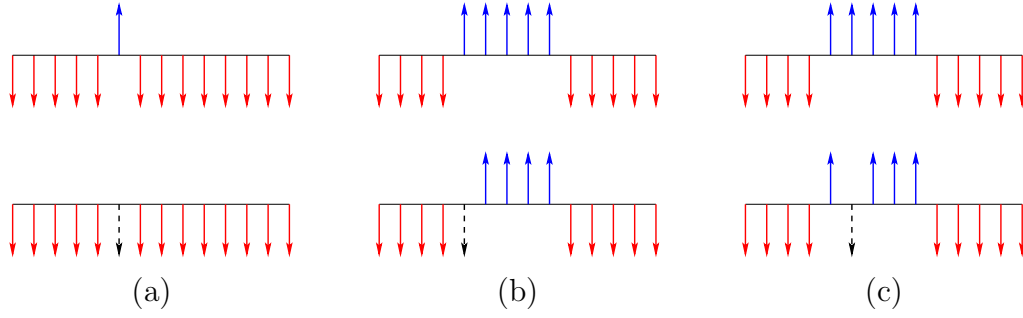


Figure E1. One-spin flip transitions with $n \rightarrow n - 1$ and: (a) $k \rightarrow k - 1$, (b) $k \rightarrow k$, (c) $k \rightarrow k + 1$.

flips only one spin and is of the first order in λ . Therefore up to the second order in λ the contribution to the mean energy is connected only with $\mathcal{H}^{(2)}$.

In figure E1 all possible transitions with $n \rightarrow n - 1$ induced by one spin flips are indicated graphically. All these transitions change the unperturbed energy (59) provided that $\alpha \neq \pm 2$.

Transitions (b) vanish as the two nearby spins are opposite. The total contribution of transitions (a) and (c) together with the corresponding transitions related with flips of spins down is given by the following expression

$$\Delta E_{n,k} = \sin^2 \phi \cos^2 \phi \left[\sum_{n_j=1} \frac{4}{E_{n,k}^{(0)} - E_{n-1,k-1}^{(0)}} + \sum_{n_j \geq 2} \frac{4(n_j - 2)}{E_{n,k}^{(0)} - E_{n-1,k+1}^{(0)}} \right. \\ \left. + \sum_{m_j=1} \frac{4}{E_{n,k}^{(0)} - E_{n+1,k-1}^{(0)}} + \sum_{m_j \geq 2} \frac{4(m_j - 2)}{E_{n,k}^{(0)} - E_{n+1,k+1}^{(0)}} \right]. \quad (\text{E.4})$$

Here $E_{n,k}^{(0)} = \alpha(N - 2n) + 4k - N$ is the unperturbed energy (for further convenience calculations here are performed at arbitrary $\alpha \neq \pm 2$).

Calculating the denominators one gets

$$\Delta E_{n,k} = \frac{2\alpha^2\lambda^2}{(\alpha^2 + \lambda^2)^2} \left[\sum_{n_j=1} \frac{1}{2 - \alpha} - \sum_{n_j \geq 2} \frac{n_j - 2}{2 + \alpha} + \sum_{m_j=1} \frac{1}{2 + \alpha} - \sum_{m_j \geq 2} \frac{m_j - 2}{2 - \alpha} \right] \\ = \frac{2\alpha^2\lambda^2}{(\alpha^2 + \lambda^2)^2} \left[\frac{2\alpha}{4 - \alpha^2} \left(\sum_{n_j=1} 1 - \sum_{m_j=1} 1 \right) - \frac{1}{2 + \alpha} \sum_{n_j \geq 1} (n_j - 2) - \frac{1}{2 - \alpha} \sum_{m_j \geq 1} (m_j - 2) \right]. \quad (\text{E.5})$$

The calculation of the number of one spin up, $n_j = 1$, which we denoted by $N_1(n, k)$, can be performed exactly as it was done in Appendix D for the case $n_j = 2$ (cf. (D.9)) and one finds that

$$N_1(n, k) = k C_{n-2}^{k-2}. \quad (\text{E.6})$$

Therefore, in the second order in λ the change of energy $E_{n,m;k}$ is

$$\Delta E_{n,m;k}(\alpha, \lambda) = \frac{2\alpha^2\lambda^2 N}{(\alpha^2 + \lambda^2)^2} \left[\left(\frac{2k-n}{2+\alpha} + \frac{2k-m}{2-\alpha} \right) \frac{1}{k} C_{n-1}^{k-1} C_{m-1}^{k-1} + \frac{2\alpha}{4-\alpha^2} (C_{n-2}^{k-2} C_{m-1}^{k-1} - C_{n-1}^{k-1} C_{m-2}^{k-2}) \right], \quad (\text{E.7})$$

and the total contribution to the mean energy when $\alpha = 1$ is

$$\Delta E_R = \frac{1}{\mathcal{N}_R} \sum_{2k-n=R} \Delta E_{n,N-n;k}(1, \lambda). \quad (\text{E.8})$$

where $\mathcal{N}_R$ is the total number of states with fixed R given by (61).

- [1] E. P. Wigner, *Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions*, Ann. of Math., **62**, 548 (1955).
- [2] E. P. Wigner, *On the distribution of the roots of certain symmetric matrices*, Ann. of Math., **67**, 325 (1958).
- [3] M. L. Mehta, *Random matrices*, Second Ed., Academic Press, (1991).
- [4] D. Voiculescu, *Limit laws for random matrices and free products*, Invent. Math. **104**, 201 (1991).
- [5] J. French and S. Wong, *Validity of random matrix theories for many-particle systems*, Phys. Lett. B **33**, 449 (1970).
- [6] J. French and S. Wong, *Some random-matrix level and spacing distributions for fixed-particle-rank interactions*, Phys. Lett. B **35**, 5 (1971).
- [7] A. Gervois, *Level densities for random one- or two-body potentials*, Nucl. Phys. A **184**, 507 (1972).
- [8] T. A. Brody, J. Flores, J. B. French, P. A. Mello, A. Pandey, S. S. M. Wong, *Random-matrix physics: spectrum and strength fluctuations*, Reviews of Modern Physics, **53**, 385-480 (1981).
- [9] O. Bohigas and J. Flores, *Two-body random hamiltonian and level density*, Phys. Lett. B **34**, 261 (1971).
- [10] O. Bohigas and J. Flores, *Spacing and individual eigenvalue distributions of two-body random hamiltonians*, Phys. Lett. B **35**, 383 (1971).
- [11] B. V. Bronk, *Accuracy of the semicircle approximation for the density of eigenvalues of random matrices*, J. Math. Phys. **5**, 215 (1964).
- [12] H. A. Bethe, *An attempt to calculate the number of energy levels of a heavy nucleus*, Phys. Rev. **50**, 332 (1936).
- [13] H. A. Bethe, *Nuclear physics B: nuclear dynamics, theoretical*, Rev. Mod. Phys. **9**, 69 (1937).
- [14] P. Pfeuty, *The one-dimensional Ising model with a transverse field*, Annals of Physics, **57**, 79 (1970).
- [15] S. Sachdev, *Quantum phase transitions* (Camb. Univ. Press, 1999).
- [16] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, Annals of Physics **16**, 407 (1961).
- [17] D. C. Mattis, *The many body problem* (World Scientific, Singapore, 1994).
- [18] A. B. Zamolodchikov, *Integrals of motion and S-matrix of the (scaled) $T = T_c$ Ising-model with magnetic-field*, Int. J. Mod. Phys. A **4**, 4235 (1989).
- [19] R. Coldea et al., *Quantum Criticality in an Ising Chain: Experimental Evidence for Emergent E_8 Symmetry* Science, **327**, 177 (2010).
- [20] Y. Y. Atas, E. Bogomolny, O. Giraud, G. Roux, *The distribution of the ratio of consecutive level spacings in random matrix ensembles*, Phys. Rev. Lett. **110**, 084101 (2013).
- [21] R. B. Griffiths, *A proof that the free energy of a spin system is extensive*, J. Math. Phys. **5**, 1215 (1964).
- [22] J. P. Keating, N. Linden, and H. J. Wells, *Spectra and eigenstates of spin chain models*, in preparation (2013)

ANALYSE SPECTRALE DES CHAÎNES DE SPINS QUANTIQUES

*Passait une gazelle, occupée à brouter.
 “Es tu sœur de Layla ? Demandai je. On le dit...
 Image de Layla, tu es pleine de vie
 Quand malade est Layla : c’est contre vérité.
 Mais soit : si ma Layla n’est pas vraiment gazelle,
 C’est la gazelle, alors qui l’a prise en modèle”*

Poème de Majnûn et Layla

Sommaire

3.1 Introduction et position du problème	106
3.1.1 Plan du chapitre	108
3.2 Classification fondamentale des matrices aléatoires à spectre réel	108
3.2.1 Distribution des valeurs propres	109
3.2.2 Un petit détour sur le calcul de la densité d’états	111
Méthode du gaz de Coulomb	111
3.3 Méthodes numériques utilisées en théorie des matrices aléatoires	115
3.3.1 Méthode naïve	115
3.3.2 Formulation tridiagonale	115
3.3.3 Algorithme Monte-Carlo	115
3.4 Distribution de l’espacement d’énergie	117
3.4.1 Distribution de l’espacement pour des nombres tirés de manière uniforme dans $[0, 1]$	117
3.4.2 Ansatz de Wigner pour la distribution de l’espacement dans les ensembles gaussiens invariants	118
3.5 Conjectures reliées à la distribution de l’espacement	120
3.5.1 Conjecture de Berry-Tabor pour les systèmes intégrables	120
3.5.2 Conjecture BGS pour les systèmes chaotiques	121
3.6 La procédure d’unfolding	122
3.6.1 Problèmes posés par la procédure d’unfolding	123
3.7 Statistique du rapport de l’espacement entre niveaux d’énergie	124
3.7.1 Cas de variables poissoniennes	124
3.7.2 Ensembles gaussiens invariants	124
3.7.3 Analogie du “surmise” de Wigner	125
3.7.4 Précision de l’approximation	127
3.8 Application aux chaînes de spins quantiques	127
3.9 Zéros de la fonction zêta de Riemann	128
3.10 Choix de la variable sans dimension et distribution du k recouvrement	130

3.10.1 Cas poissonien	131
3.10.2 $k = 1$ recouvrement pour les ensembles gaussiens invariants	132
3.11 Conclusion et perspectives	132

3.1 Introduction et position du problème

Avec l'essor de la physique nucléaire au début des années 50, les physiciens ont cherché à donner une description de la structure des gros noyaux atomiques en se basant sur des résultats expérimentaux obtenus par spectroscopie à résonance neutronique [RCH⁺72]. Le type de résultats expérimentaux obtenus est représenté sur la figure 3.1. Les pics que l'on observe correspondent aux niveaux d'énergie pour les noyaux de ^{232}Th et ^{238}U . L'énergie de Fermi typique des noyaux lourds est de l'ordre de 33 Mev [LR06]. Comme on peut l'observer, la figure présentée se réfère donc au spectre de basse énergie et l'espacement entre niveaux semble constant (aux fluctuations près). Au début du chapitre 2, nous avons vu que ceci avait permis à Bethe de décrire le

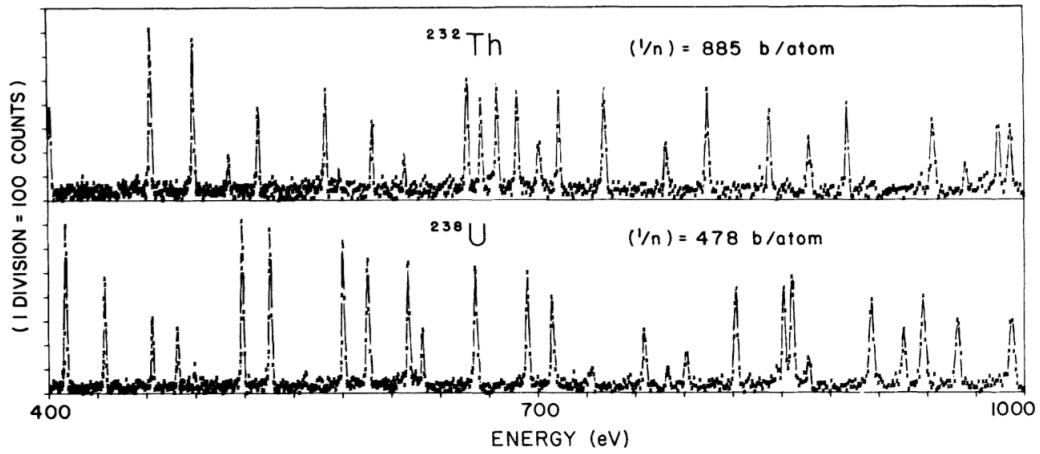


FIGURE 3.1 – Spectre d'excitation du thorium 232 et de l'uranium 238 obtenus par résonance neutronique. Figure tirée de [RCH⁺72].

spectre de basse énergie par un modèle de nucléons indépendants dans un puits de potentiel moyen, c'est-à-dire un modèle de champ moyen [Bet36]. Les niveaux dont l'énergie est de l'ordre de l'énergie de Fermi sont beaucoup plus rapprochés les uns des autres et font intervenir les interactions entre nucléons. Au demeurant, ces interactions sont trop complexes pour être décrites simplement en termes d'états individuels comme dans le cas des états peu excités. Une description exacte du spectre devient donc impossible et une description statistique des niveaux d'énergie s'impose. De même que Gibbs et Boltzmann avaient abandonné le point de vue déterministe pour décrire les propriétés d'un gaz constitué d'un grand nombre d'atomes, Wigner proposa de modéliser les propriétés spectrales du Hamiltonien très complexe d'un noyau atomique par celles d'une matrice aléatoire, c'est-à-dire une matrice dont les éléments sont des coefficients aléatoires [Wig58, Wig93]. Comme certaines constantes du mouvement liées à des quantités globales conservées telles que le spin total sont connues, le Hamiltonien prend une forme bloc diagonale et chaque bloc est indexé par un nombre quantique associé à une quantité conservée. L'idée de Wigner consiste à modéliser chaque bloc par une matrice aléatoire H de grande taille à coefficients indépendants. Le gros noyau est ainsi représenté par une "boîte noire" à l'intérieur de laquelle les nucléons interagissent de manière aléatoire. La théorie des matrices aléatoires s'est révélée être une bonne description du comportement statistique des niveaux d'énergie très excités des gros noyaux atomiques. Il se trouve en effet que les espacements entre niveaux d'énergie des noyaux sont bien décrits par les écarts entre valeurs propres d'une matrice aléatoire¹. En particulier, les niveaux d'énergie des noyaux se repoussent et ce comportement est aussi observé pour les valeurs propres d'une matrice aléatoire. La structure de la matrice aléatoire ainsi que la distribution de probabilité des entrées de la matrice doivent évidemment suivre certaines prescriptions imposées par des symétries physiques telles que l'invariance par translation dans le temps ou par changement de coordonnées. Comme nous le verrons dans la suite, ceci amènera à la classification fondamentale

1. Dans la suite, nous utiliserons de manière équivalente les termes niveaux d'énergie et valeurs propres.

des ensembles gaussiens invariants. Cette description a connu un grand succès dans le cadre de la physique nucléaire [SN86]. De nos jours, la théorie des matrices aléatoires est une branche active à part entière de la recherche en physique théorique avec des ramifications dans plusieurs disciplines telle que la théorie des nombres [BK96, Bog07, H⁺76, Mon73, Odl87], le chaos quantique [BT77b, BGS84] ou encore la finance [LCBP99].

Une des grandeurs qui permet d'étudier et caractériser les propriétés spectrales des niveaux d'énergie est la distribution de l'espacement des états d'énergie notée $P(s)$. Si l'on pose $s_i = E_{i+1} - E_i$, l'espacement entre deux niveaux successifs, la densité de probabilité des s_i est donnée par $P(s)ds = \frac{1}{N} \# \{i; s \leq s_i \leq s + ds\}$. Par exemple dans la figure 3.1, on peut calculer empiriquement les espacements successifs entre pics de résonance, faire l'histogramme de cette quantité pour obtenir $P(s)$. Le premier résultat analytique pour cette quantité a été obtenu par Wigner dans le cadre des matrices aléatoires. Wigner a obtenu son résultat en calculant la distribution de l'espacement des valeurs propres pour les ensembles gaussiens de matrices aléatoires de taille 2×2 [Wig58]. Ce résultat porte le nom de "surmise" de Wigner. Bien que les Hamiltoniens décrivant les noyaux lourds ne soient pas des matrices 2×2 , ce calcul simple s'est révélé être en très bon accord avec les résultats expérimentaux pour la distribution de l'espacement ! Fort de ce succès, cette mesure s'est vite imposée comme la mesure de "référence" pour caractériser les propriétés spectrales des spectres de Hamiltonien et a été largement utilisée depuis lors. Par la suite, deux conjectures importantes établissant un lien entre l'intégrabilité de systèmes classiques et la statistique des espacements des niveaux d'énergie des systèmes quantiques correspondant ont vu le jour [BT77b, BGS84]. Nous reviendrons plus en détail sur ces deux conjectures dans la suite au moment venu. La distribution de l'espacement de niveaux a été beaucoup étudiée pour les ensembles gaussiens de matrices aléatoires et beaucoup de résultats analytiques sont connus pour cette mesure [Meh04]. En particulier, il a été montré que pour l'ensemble GUE des matrices aléatoires gaussiennes unitaires de taille $N \times N$, la distribution asymptotique de l'espacement d'énergies, i.e. pour $N \rightarrow \infty$, s'exprimait comme

$$P_\infty(s) = \frac{1}{s^2} (\pi s \sigma'(\pi s) - \sigma(\pi s) + \sigma^2(\pi s)) \exp \left(\int_0^{\pi s} \frac{\sigma(t)}{t} dt \right) \quad (3.1)$$

avec $\sigma(s)$ la solution de l'équation de Painlevé V (voir [Meh04] pour plus de détails). Le résultat de Wigner pour des matrices 2×2 s'avère être une très bonne approximation du résultat asymptotique (3.1).

En pratique l'obtention de la distribution de l'espacement des niveaux d'énergie nécessite une procédure de régularisation sur l'ensemble du spectre appelée "unfolding"² [SN86]. Cette procédure est rendue nécessaire par le fait que les densités d'états de différents modèles ne sont généralement pas uniformes. Il existe en effet dans le spectre des régions où les valeurs propres sont très proches les unes des autres et d'autres régions de basse densité où l'espacement entre valeurs propres est grand. Il apparaît donc clairement que la forme de la distribution de l'espacement obtenue empiriquement, dépend fortement de l'endroit dans le spectre où l'on fait l'histogramme des données. Afin de remédier à ce problème, une technique consiste à trouver une transformation du spectre qui rend la densité d'états uniforme. Si on note $\{E_i\}_{0 \leq i \leq N-1}$ les valeurs propres d'une matrice de taille $N \times N$ découlant d'un certain Hamiltonien, la technique la plus utilisée dans la littérature pour "unfold" le spectre consiste à définir les nouvelles variables $\tilde{E}_i = \tilde{N}(E_i)$ où $\tilde{N}(E_i)$ est la partie lisse de la fonction de comptage comptant le nombre de valeurs propres plus petites ou égales à E_i [Meh04, BG84, Haa10, Por65]. On montre alors que l'espacement moyen de ces nouveaux niveaux est égal à 1, ce qui permet une comparaison avec les prédictions de la théorie des matrices aléatoires. La forme de la fonction de comptage $\tilde{N}(E)$ est connue pour la plupart des systèmes intégrables. Pour les billards, par exemple, nous avons vu qu'elle était donnée par le terme de Weyl (2.12), ce qui permet "d'unfold" le spectre assez facilement [BH76]. De même, le nombre de zéros de la fonction zêta de Riemann plus petit ou égal à une certaine valeur est aussi connu, ce qui permet d'implémenter la procédure d'unfolding [Tit86, BK96, KS00]. Cependant, il arrive parfois que la partie lissée de la densité d'états³ ne soit pas connue et on se contente alors en pratique d'un lissage numérique. Par exemple, on peut faire une moyenne locale dans la densité d'états ou une interpolation polynomiale de la densité d'états [SGRZ99]. La statistique spectrale doit évidemment être indépendante de la technique utilisée pour "unfold" le spectre ce qui n'est pas du tout évident à première vue. Cette approche numérique de "l'unfolding" n'est pas du tout contrôlable et stable (bien qu'elle ait donnée de bons résultats jusqu'à présent⁴) puisqu'elle peut introduire des effets non physiques dans la statistique spectrale suivant la méthode d'unfolding utilisée. En ajoutant à cela le manque de données numériques pour les systèmes quantiques à plusieurs corps où la taille de l'espace de Hilbert croît exponentiellement avec le nombre de degrés de liberté, ceci à amener l'introduction d'autres grandeurs dont l'étude statistique se passe de la procédure d'unfolding.

2. Ce terme se traduit par déploiement ou déroulement en français mais dans la suite nous utiliserons le terme anglais.

3. La fonction de comptage lissée $\tilde{N}(E)$ est par définition la version intégrée de la densité d'états lissée.

4. Il suffit pour cela de regarder le nombre d'articles traitant de la statistique de l'espacement des niveaux d'énergie pour s'en rendre compte. La plupart du temps, les auteurs n'indiquent même pas la technique utilisée pour unfold le spectre.

C'est dans ce contexte que très récemment, une nouvelle mesure permettant de se passer de la procédure "d'unfolding" a été introduite par Oganessian et Huse [OPH09, OH07]. Au lieu de regarder la distribution de l'espacement des niveaux d'énergie, ils ont proposé de regarder plutôt la distribution du rapport d'espacements successifs. De manière assez intuitive, le fait de prendre le rapport d'espacements successifs annule la dépendance en la densité locale. L'unique résultat connu pour cette nouvelle mesure concernait le cas de variables poissoniennes. En ce qui concerne les ensembles de matrices aléatoires, aucune prédictions théorique n'était connue et les résultats provenant de modèles variés étaient comparés aux simulations numériques pour de larges matrices aléatoires [KRBL10, OH07, PH10, CFIM12]. En se basant sur un raisonnement analogue à celui de Wigner pour la distribution de l'espacement, nous avons dérivé des formules simples pour la distribution du rapport d'espacements successifs pour les trois ensembles fondamentaux de matrices aléatoires [ABGR13].

3.1.1 Plan du chapitre

Nous présentons dans ce chapitre les résultats théoriques obtenus pour la distribution du rapport d'espacements dans les trois ensembles gaussiens invariants. Nous introduisons tout d'abord les trois ensembles de matrices aléatoires qui vont être utilisés dans ce chapitre. Nous nous intéressons ensuite à quelques exemples qui permettent d'introduire les deux conjectures importantes reliées à la distribution de l'espacement des niveaux d'énergie. Nous regardons ensuite les méthodes numériques utilisées en théorie des matrices aléatoires et nous arrêtons sur la procédure d'unfolding. Les limites de cette technique sont ensuite relevées et nous montrons la nécessité d'introduire une mesure indépendante de la densité d'états locale. Comme nous l'avons souligné dans l'introduction, pratiquement aucun résultat théorique n'était connu pour la distribution du rapport d'espacements successifs et notre principale contribution a été de trouver des résultats théoriques simples pour les trois ensembles gaussiens invariants. En suivant un argument à la Wigner, nous dérivons des formules simples pour la distribution du rapport d'espacement d'énergies successifs. Ces formules sont ensuite comparées aux résultats obtenus par diagonalisation exacte d'une chaîne de spins puis à la statistique des zéros de la fonction zêta de Riemann. Finalement, nous discutons une généralisation possible de la mesure du rapport d'espacements d'énergie et présentons quelques questions qu'il serait intéressant de regarder plus en détail. Les différents résultats discutés dans ce chapitre peuvent être retrouvés dans les deux articles [ABGR13] (qui est reproduit à la fin du chapitre) et [ABG⁺13].

3.2 Classification fondamentale des matrices aléatoires à spectre réel

La structure des noyaux atomiques constitués d'un grand nombre de nucléons est très complexe. Afin de décrire les interactions entre nucléons, Wigner a proposé dans les années 50 de modéliser le Hamiltonien par une matrice dont les coefficients sont tirés suivant une certaine distribution de probabilité. En mécanique statistique, la description d'un gaz se fait par l'abandon de la vision déterministe consistant à résoudre les équations de Hamilton pour la position et l'impulsion de chaque particule. La vision probabiliste consiste à associer une mesure de probabilité (la mesure de Gibbs Boltzmann) à chaque état de configuration du gaz. De la même manière, la complexité du Hamiltonien d'un noyau atomique constitué d'un grand nombre de nucléons contraint d'abandonner l'idée de résoudre l'équation de Schrödinger. L'idée de Wigner consiste à associer un Hamiltonien aléatoire choisi parmi un ensemble de matrices aléatoires vérifiant certaines symétries physiques. En cela l'idée de Wigner n'est pas si différente de l'idée de Gibbs ou Boltzmann (voir figure 3.2). Suivant les

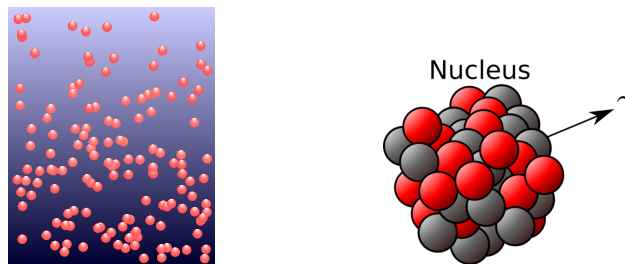


FIGURE 3.2 – Un gaz constitué d'un grand nombre de particules est décrit par l'approche probabiliste de Gibbs-Boltzmann. Les détails microscopiques du gaz parfait ne l'empêche pas de vérifier la loi des gaz parfaits $pV = nkT$. De la même manière, l'approche de la théorie des matrices aléatoires permet d'observer des comportements "universels" dans la statistique des niveaux d'énergie des noyaux lourds peu importe les détails de ces noyaux.

symétries physiques sous-jacente, on distingue habituellement trois types de symétrie pour les matrices aléatoires, initialement introduits par Dyson [Dys04b, Meh04] (voir [Por65] pour les articles fondateurs et [GMGW98] pour une synthèse récente). La construction des différents ensembles de matrices aléatoires se fait en imposant deux conditions. Nous suivrons en grande partie le raisonnement présenté dans le livre de Mehta pour introduire les différents ensembles gaussiens invariants [Meh04]. En premier lieu, la distribution des entrées doit être factorisable, c'est-à-dire que l'on considère des entrées $(H_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$ indépendantes

$$\mathcal{P}(\mathbf{H}) = \prod_{ij} P_{ij}(H_{ij}) \quad (3.2)$$

où $\mathcal{P}(\mathbf{H})$ est la distribution de probabilité jointe des entrées de la matrice H . La deuxième condition impose que la distribution de probabilité des entrées doit être indépendante de la base dans laquelle on se place. Autrement dit, elle doit être invariante par rotation

$$\mathcal{P}(\mathbf{H}) = \mathcal{P}(X\mathbf{H}X^{-1}) \quad (3.3)$$

où la structure de la matrice de rotation X dépend de la structure de la matrice H . On distingue alors trois types d'ensembles de matrices [Meh04]

- l'Ensemble Gaussien Orthogonal (GOE) est constitué des matrices réelles symétriques ($H^T = H$) munies de la mesure

$$\mathcal{P}(\mathbf{H})d\mathbf{H} = \prod_i P_{ii}(H_{ii}) \prod_{i < j} P_{ij}(H_{ij}) \prod_i dH_{ii} \prod_{i < j} dH_{ij} \quad (3.4)$$

invariante par une transformation orthogonale $H' = O^T H O$. Les éléments de matrice H_{ij} avec $i \leq j$ sont des variables aléatoires indépendantes.

- l'Ensemble Gaussien Unitaire (GUE) est l'ensemble des matrices complexes hermitiennes ($H^\dagger = H$) avec la mesure

$$\mathcal{P}(\mathbf{H})d\mathbf{H} = \prod_i P_{ii}(H_{ii}) \prod_{i < j} P_{ij}(H_{ij}, H_{ij}^*) \prod_i dH_{ii} \prod_{i < j} d(\operatorname{Re} H_{ij}) d(\operatorname{Im} H_{ij}) \quad (3.5)$$

invariante sous les transformations unitaires $H' = U^\dagger H U$ et telles que les éléments indépendants de la matrice H sont des variables aléatoires indépendantes.

- l'Ensemble Gaussien Symplectique (GSE) est constitué de l'ensemble des matrices $2N \times 2N$ quaternion-réelles ($H = H^\mu \sigma_\mu$ avec σ_μ les matrices de Pauli, H^0 une matrice $N \times N$ réelle symétrique et H^i des matrices réelles antisymétriques pour $1 \leq i \leq 3$) munies de la mesure adéquate invariante par transformations symplectiques $H' = S^{-1} H S$. Les éléments indépendants de la matrice H sont des variables aléatoires indépendantes.

On peut montrer que la condition d'invariance par rotation de $\mathcal{P}(\mathbf{H})$ et de $d\mathbf{H}$, ainsi que la condition d'indépendance des entrées de la matrice H imposent la forme gaussienne pour $\mathcal{P}(\mathbf{H})$

$$\mathcal{P}(\mathbf{H}) = \exp(-\alpha \operatorname{Tr} H^2), \quad (3.6)$$

avec α réel positif [Meh04]. La construction des ensembles gaussiens invariants est schématisé sur la figure 3.3. Suivant les propriétés de symétrie et d'invariance du système que l'on étudie, la statistique spectrale sera décrite par l'un de ces trois ensembles de matrices aléatoires. Par exemple, les systèmes ayant une invariance par renversement du temps ont une statistique⁵ GOE ou GSE si on a affaire à des fermions en l'absence d'invariance par rotation. Généralement, les systèmes n'ayant pas cette invariance possèdent une statistique GUE [Meh04].

3.2.1 Distribution des valeurs propres

Connaissant la distribution de probabilité des entrées de la matrice aléatoire H , la question que l'on se pose maintenant est de connaître la distribution de probabilité des valeurs propres $\{E_i\}_{1 \leq i \leq N}$ de la matrice H . À titre d'exemple, nous faisons le calcul pour des matrices 2×2 de l'ensemble GOE, puis donnons la formule générale pour les trois ensembles de matrices aléatoires. Considérons donc une matrice réelle symétrique 2×2 dont les éléments indépendants H_{11} , H_{12} et H_{22} sont distribués de manière gaussienne

$$\mathcal{P}(H_{11}, H_{12}, H_{22}) \propto \exp[-\alpha(H_{11}^2 + H_{12}^2 + H_{22}^2)], \quad (3.7)$$

5. Lorsque nous écrivons qu'un système à une statistique d'un type donnée, on signifie par là que les niveaux d'énergie de ce système satisfont la statistique en question. Dans la suite, nous utiliserons beaucoup ce raccourci de langage.

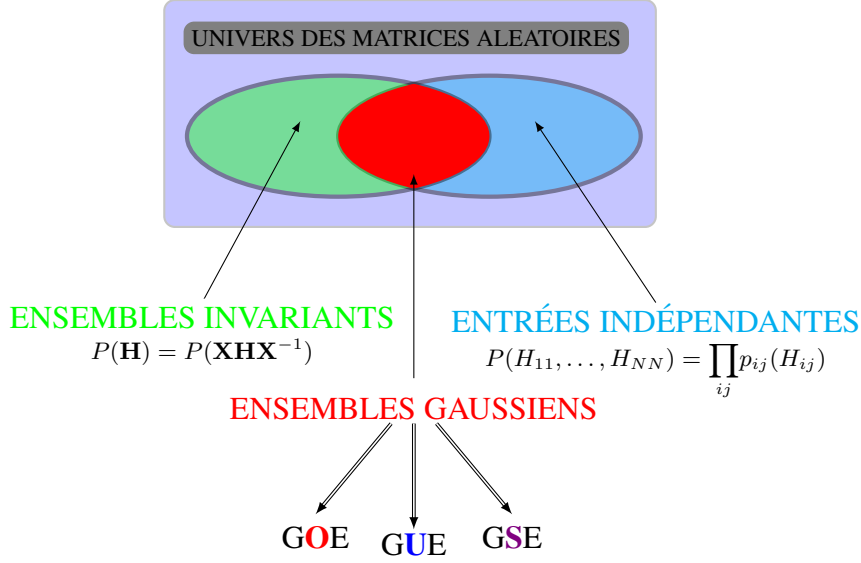


FIGURE 3.3 – Classifications fondamentales des ensembles de matrices aléatoires. La construction des différents ensembles de matrices aléatoires se fait en imposant deux conditions : *i*) la distribution des entrées doit être factorisable, *ii*) elle doit être indépendante de la base dans laquelle on se place. Ces deux conditions imposent aux entrées de la matrice d'être distribuées suivant une loi gaussienne [Meh04]. Les ensembles GOE, GUE et GSE sont respectivement constitués des matrices réelles symétriques (invariantes par transformations orthogonales), des matrices hermitiennes (invariantes par transformations unitaires) et des matrices de quaternions (invariantes par transformations symplectiques).

avec α une constante positive. La distribution de probabilité (3.7) des entrées de la matrice H est factorisable, i.e. les éléments sont indépendants. Comme la matrice H est symétrique réelle, il existe une transformation orthogonale $O(\theta)$ qui diagonalise le hamiltonien H :

$$H = O^T D O, \quad (3.8)$$

avec

$$O = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad D = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

où E_1 et E_2 sont les valeurs propres de H . La mesure de probabilité se transforme ainsi sous l'effet de la rotation

$$\mathcal{P}(H_{11}, H_{12}, H_{22}) dH_{11} dH_{12} dH_{22} = \mathcal{P}(E_1, E_2, \theta) |J(E_1, E_2, \theta)| dE_1 dE_2 d\theta, \quad (3.10)$$

avec J le Jacobien de la transformation

$$J(E_1, E_2, \theta) = \frac{\partial(H_{11}, H_{12}, H_{22})}{\partial(E_1, E_2, \theta)}. \quad (3.11)$$

Il est facile de voir que le Jacobien de cette transformation est donné par $|E_2 - E_1|$. En écrivant l'invariance de la mesure de probabilité par la transformation orthogonale, il vient la distribution de probabilité des valeurs propres

$$P(E_1, E_2) \propto |E_2 - E_1| \mathcal{P}(E_1, E_2) = |E_2 - E_1| e^{-\alpha(E_1^2 + E_2^2)}. \quad (3.12)$$

Dans le cas général d'une matrice $N \times N$ dont les éléments indépendants sont des variables gaussiennes centrées de variance σ^2 , la distribution de probabilité jointe des valeurs propres est donnée par [Meh04]

$$P_\beta(E_1, E_2, \dots, E_N) = B_N(\beta) \prod_{i < j} |E_i - E_j|^\beta \exp \left(-\frac{1}{4\sigma^2} \sum_i E_i^2 \right) \quad (3.13)$$

où $\beta = 1, 2, 4$ pour l'ensemble GOE, GUE et GSE respectivement. Cet indice est appelé indice de Dyson et apparaît de manière naturelle dans la distribution jointe. Les constantes $B_N(\beta)$ et σ s'obtiennent en imposant

les conditions de normalisation des distributions de probabilité. En particulier, $B_N(\beta)$ s'obtient par le calcul d'une intégrale de Selberg [Meh04].

Le produit qui apparaît dans (3.13) est d'origine purement géométrique puisqu'il provient du Jacobien de la transformation qui diagonalise la matrice H . Ce terme crée des corrélations fortes entre valeurs propres et couple les valeurs propres les unes aux autres. La distribution jointe des valeurs propres serait tout simplement gaussienne sans ce terme. Comme on peut le voir, les valeurs propres des matrices aléatoires "n'aiment pas" être trop proches les unes des autres puisque la distribution (3.13) s'annule lorsque deux valeurs propres sont arbitrairement proches l'une de l'autre. Ce résultat sera intuitif lorsque nous approcherons la distribution jointe des valeurs propres des matrices aléatoires par la formulation du gaz de Coulomb. En écrivant (3.13) sous la forme d'un poids de Boltzmann, nous verrons en effet que les valeurs propres peuvent être vues comme les positions de charges positives contraintes de se déplacer sur la ligne réelle dans un potentiel d'interaction Coulombien $2D$.

3.2.2 Un petit détour sur le calcul de la densité d'états

On définit la densité d'états moyenne comme

$$\rho_N(E) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(E - E_i) \right\rangle = \langle \rho(E, N) \rangle \quad (3.14)$$

où la valeur moyenne est prise sur les différentes réalisations de valeurs propres E_i de matrices aléatoires, $\langle (\cdots) \rangle = \int \prod_i dE_i (\cdots) P_\beta(E_1, E_2, \dots, E_N)$. La quantité $\rho_N(E) dE$ donne la probabilité de trouver une valeur propre dans l'intervalle $[E, E + dE]$. Par définition, la densité $\rho_N(E)$ est la densité marginale d'une valeur propre,

$$\rho_N(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE_2 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dE_N P_\beta(E, E_2, \dots, E_N). \quad (3.15)$$

De la même manière, on peut introduire la densité à deux points définie par

$$\rho_N^{(2)}(E, E') = \frac{1}{N(N-1)} \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(E - E_i) \delta(E' - E_j) \right\rangle. \quad (3.16)$$

La densité à deux points est la distribution marginale de deux valeurs propres :

$$\rho_N^{(2)}(E, E') = \int_{-\infty}^{\infty} dE_3 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dE_N P_\beta(E, E', E_3, \dots, E_N). \quad (3.17)$$

Méthode du gaz de Coulomb

On se propose de faire le calcul de la densité d'états asymptotique $N \rightarrow \infty$ en utilisant la méthode du gaz de Coulomb. Réécrivons donc la distribution de probabilité jointe des valeurs propres (3.13) comme un poids de Boltzmann à température inverse β ⁶

$$P_\beta(E_1, E_2, \dots, E_N) = B_N(\beta) \prod_{i < j} |E_i - E_j|^\beta \exp \left(-\frac{\beta}{2} \sum_i E_i^2 \right) = \frac{1}{Z_N(\beta)} e^{-\beta \mathcal{H}[\{E_i\}]} \quad (3.18)$$

avec

$$\mathcal{H}[\{E_i\}] = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N E_i^2 - \sum_{i < j} \ln |E_i - E_j|, \quad (3.19)$$

et

$$Z_N(\beta) = \int \prod_i dE_i e^{-\beta \mathcal{H}[\{E_i\}]} = B_N(\beta)^{-1}. \quad (3.20)$$

Si l'on interprète les énergies E_i comme les positions de N particules sur une ligne, alors la distribution jointe (3.18) correspond à la densité de probabilité des positions des particules à l'équilibre thermodynamique en contact avec un réservoir à température inverse β . L'énergie effective de ces particules est décrite par le Hamiltonien (3.19) et $Z_N(\beta)$ est la fonction de partition associée. L'énergie $\mathcal{H}[\{E_i\}]$ comprend un terme de répulsion

6. Nous utilisons ici la convention $\beta/2$ dans la définition de la distribution jointe des valeurs propres.

logarithmique $-\ln(E_i - E_j)$ qui est exactement l'interaction de Coulomb entre deux charges de même signe en dimension 2. Les valeurs propres E_i peuvent donc être vues comme les positions des charges d'un gaz de Coulomb contraintes de rester sur l'axe réel dans un potentiel quadratique confinant $E^2/2$ et soumises à un terme répulsif logarithmique. Cette réécriture de la probabilité jointe des valeurs propres a été introduite en premier par Dyson [Dys04a, Dys04c] et permet en pratique d'obtenir des échantillons de valeurs propres en utilisant les simulations Monte-Carlo [Viv11].

Il est possible de montrer que dans la limite thermodynamique, les valeurs propres se comportent typiquement comme [Meh04]

$$|E_{typ}| \sim \sqrt{N}. \quad (3.21)$$

En assumant alors le comportement d'échelle suivant pour la densité définie en (3.14)

$$\rho(E, N) = \frac{1}{\sqrt{N}} \varphi\left(\frac{E}{\sqrt{N}}\right) \quad (3.22)$$

il vient que dans la limite continue⁷ ($N \rightarrow \infty$)

$$\mathcal{H}[\{E_i\}] = N^2 \hat{\mathcal{H}}[\varphi] - N^2 \frac{\ln N}{4} + o(N^2) \quad (3.23)$$

où la fonctionnelle $\hat{\mathcal{H}}[\varphi]$ s'écrit

$$\hat{\mathcal{H}}[\varphi] = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi(x) \frac{x^2}{2} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dx' \varphi(x) \varphi(x') \ln |x - x'|. \quad (3.24)$$

Par conséquent, l'énergie effective $\mathcal{H}[\{E_i\}]$ est d'ordre N^2 pour N grand et on peut écrire la probabilité de la configuration $\{E_i\}$ comme

$$P(E_1, E_2, \dots, E_N) = \frac{1}{Z'_N(\beta)} e^{-\beta N^2 \mathcal{H}[\varphi]} \quad (3.25)$$

avec $Z'_N(\beta) = N^{-\beta N^2/4} Z_N(\beta)$. Dans la limite thermodynamique, la densité "rescalée" $\varphi(x)$ décrit donc la configuration typique des charges E_i à température nulle et doit donc minimiser l'énergie effective du gaz de Coulomb (ie maximiser la probabilité $P_\beta(E_1, E_2, \dots, E_N)$). Notons $\varphi^*(x)$ la densité continue qui minimise l'énergie effective (3.24).

La densité moyenne $\varphi^*(x)$ doit minimiser l'énergie effective (3.24) avec la contrainte de normalisation $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x) dx = 1$. L'équation de minimisation fonctionnelle par rapport à φ s'écrit

$$0 = \frac{\delta \left[\hat{\mathcal{H}}[\varphi] + \lambda_0 \left(\int \varphi(x) dx - 1 \right) \right]}{\delta \varphi(x)} \Bigg|_{\varphi=\varphi^*} = \frac{x^2}{2} - \int_{-\infty}^{\infty} dx' \varphi^*(x') \ln |x - x'| + \lambda_0 \quad (3.26)$$

où le multiplicateur de Lagrange λ_0 a été introduit pour tenir compte de la condition de normalisation de la densité. La densité d'équilibre asymptotique satisfait donc l'équation intégrale

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' \varphi^*(x') \ln |x - x'| = \frac{x^2}{2} + \lambda_0. \quad (3.27)$$

Il existe plusieurs techniques pour résoudre ce type d'équations intégrales : on peut par exemple utiliser un théorème dû à Tricomi qui permet d'exprimer la solution comme la partie principale d'une intégrale [Tri85]. On peut aussi utiliser la méthode de la résolvante plus connue chez les mathématiciens sous le nom de méthode de la transformée de Stieltjes de la densité $\varphi^*(x)$. Ces deux techniques sont présentées en détails dans la thèse de Céline Nadal [Nad11]. Nous proposons ici une autre technique que nous avons utilisée dans le contexte de l'étude de la diffraction par des objets en dimension deux. Cette technique a été développée par Latta dans les années 50 et permet de passer d'une équation intégrale à une équation différentielle sous certaines conditions sur la fonction $\varphi^*(x)$ [Lat56]. Cette méthode est détaillée dans l'Annexe E. Réécrivons donc à cet effet l'équation intégrale comme

$$\int_{-a}^a dx' \varphi^*(x') \ln |x - x'| = \frac{x^2}{2} + \lambda_0 \quad (3.28)$$

7. Pour dériver ce résultat, nous avons utilisé la formule $\sum_{i=1}^N f(E_i) = N \int \rho_N(E) f(E) dE$ et le fait que dans la limite thermodynamique $\rho_N^{(2)}(x, x') \simeq \rho_N(x) \rho_N(x')$.

où nous avons restreint l'intégrale au support de la densité $\varphi^*(x)$ et où nous avons utilisé la symétrie autour de l'origine. Il n'est a priori pas évident en première considération que la densité doit être à support compact. Cependant, on peut partir de cette hypothèse et vérifier que c'est bien le cas après coup. Comme on s'attend à ce que la densité soit continue dans la limite thermodynamique, il s'ensuit qu'elle doit s'annuler aux bords du support $\varphi^*(\pm a) = 0$. Définissons l'ensemble des fonctions $\{\varphi_k\}$ solutions des équations intégrales

$$\Gamma\varphi_k = \int_{-a}^a \ln|x-t|\varphi_k(t)dt = x^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.29)$$

Il vient alors que

$$\varphi^*(x) = \frac{1}{2}\varphi_2(x) + \lambda_0\varphi_0(x). \quad (3.30)$$

En suivant la procédure expliquée en Annexe E, on trouve que

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\pi \ln\left(\frac{a}{2}\right) \sqrt{a^2 - x^2}}. \quad (3.31)$$

Pour ce qui est des solutions $\varphi_1(x)$ et $\varphi_2(x)$, nous allons montrer qu'il n'est pas nécessaire de réutiliser la méthode de Latta puisqu'on peut trouver une équation de récurrence qui va relier ces fonctions à $\varphi_0(x)$. En utilisant (E.4), on a

$$\Gamma'x\varphi_k = kx^k - \int_{-a}^a \varphi_k(t)dt \quad (3.32)$$

où Γ' indique la dérivation par rapport à x . En intégrant on trouve que

$$\Gamma x\varphi_k = \frac{k}{k+1}x^{k+1} - \alpha_k x + \beta_k \quad (3.33)$$

avec

$$\alpha_k = \int_{-a}^a \varphi_k(t)dt \quad (3.34)$$

et β_k une constante d'intégration. Notons que $\alpha_{2k+1} = 0$ puisque la fonction $\varphi_k(x)$ possède la même parité que la fonction x^k . Il s'ensuit que les fonctions $\varphi_k(x)$ satisfont la relation de récurrence

$$x\varphi_k(x) = \frac{k}{k+1}\varphi_{k+1}(x) - \alpha_k\varphi_1(x) + \beta_k\varphi_0(x), \quad (3.35)$$

avec $\varphi_0(x)$ donnée par (3.31). En faisant $k = 0$ dans la relation de récurrence (3.35), on obtient

$$\varphi_1(x) = \frac{(\beta_0 - x)}{\alpha_0}\varphi_0(x). \quad (3.36)$$

avec

$$\alpha_0 = \frac{1}{\ln\left(\frac{a}{2}\right)} \text{ et } \beta_0 = 0. \quad (3.37)$$

La fonction $\varphi_1(x)$ doit être impaire, et comme $\varphi_0(x)$ est une fonction paire, ceci entraîne forcément que $\beta_0 = 0$. On en déduit donc que

$$\varphi_1(x) = -\frac{x}{\pi\sqrt{a^2 - x^2}}. \quad (3.38)$$

On peut vérifier que cette fonction satisfait bien $\Gamma\varphi_1 = x$. En faisant maintenant $k = 1$ dans la relation de récurrence (3.35), on obtient

$$\varphi_2(x) = 2x\varphi_1(x) - 2\beta_1\varphi_0(x) \quad (3.39)$$

En appliquant l'opérateur intégral Γ , on trouve que la constante β_1 est donnée par

$$\beta_1 = \int_{-a}^a t\varphi_1(t) \ln|x-t|dt - \frac{x^2}{2} = -\frac{a^2}{4} \left(1 + \ln\left(\frac{a^2}{4}\right)\right). \quad (3.40)$$

Noter qu'à première vue, il n'est pas du tout évident que β_1 soit une constante! On a donc

$$\varphi_2(x) = \frac{2}{\pi\sqrt{a^2 - x^2}} \left(\frac{a^2 \left(1 + \ln\left(\frac{a^2}{4}\right)\right)}{4 \ln\left(\frac{a}{2}\right)} - x^2 \right). \quad (3.41)$$

Finalement, en utilisant (3.30) et les relations que nous venons d'établir, nous trouvons que la densité $\varphi^*(x)$ qui minimise la fonctionnelle s'écrit

$$\varphi^*(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{a^2 - x^2}} \left(\frac{a^2 \left(1 + \ln\left(\frac{a^2}{4}\right) \right)}{4 \ln\left(\frac{a}{2}\right)} - x^2 + \frac{\lambda_0}{\ln\left(\frac{a}{2}\right)} \right). \quad (3.42)$$

Le multiplicateur de Lagrange λ_0 se trouve en imposant la condition de normalisation de la densité $\int \varphi^*(x) dx = 1$, on a

$$\lambda_0 = \ln\left(\frac{a}{2}\right) - \frac{a^2}{4}. \quad (3.43)$$

D'où :

$$\varphi^*(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{a^2 - x^2}} \left(1 + \frac{a^2}{2} - x^2 \right). \quad (3.44)$$

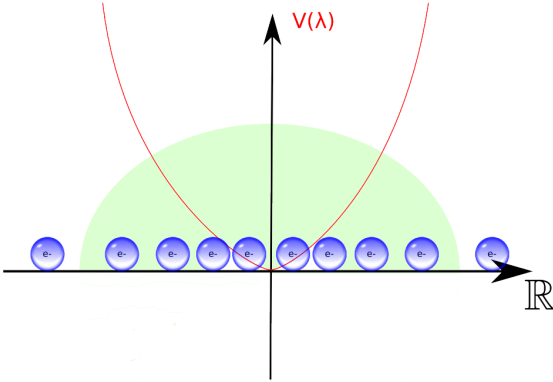
Ce résultat est en accord avec celui trouvé par les autres techniques que l'on a mentionnées plus haut et que l'on peut retrouver dans [Nad11, Viv11]. En imposant maintenant la condition d'annulation de la densité aux bords du support, $\varphi^*(\pm a) = 0$, on obtient

$$a = \sqrt{2}. \quad (3.45)$$

Finalement, la densité moyenne asymptotique ($N \gg 1$) des valeurs propres est donnée par

$$\rho_N(E) \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \varphi^*\left(\frac{E}{\sqrt{N}}\right) \text{ où } \varphi^*(x) = \frac{\sqrt{2 - x^2}}{\pi} \text{ pour } x \in [-\sqrt{2}, \sqrt{2}]. \quad (3.46)$$

La densité moyenne $\rho_N(E)$ des valeurs propres des ensembles de matrices aléatoires est donc continue et à support fini dans la limite thermodynamique. Ce résultat est connu sous le nom de **demi-cercle de Wigner**.



Intuitivement, c'est bien ce à quoi l'on s'attend. À température nulle, le potentiel quadratique confinant tend à attirer toutes les charges près du minimum à l'origine mais, du fait de la présence du potentiel logarithmique répulsif, les charges ne peuvent toutes se concentrer à l'origine. De même, les charges de Coulomb (ie les valeurs propres) ne peuvent pas non plus trop s'éloigner de l'origine en raison du confinement. C'est la compétition entre ces deux interactions, l'une confinante et l'autre répulsive, qui est à l'origine du support compact des valeurs propres et de la forme particulière de la densité. La densité moyenne donne accès au moment des valeurs propres dans la limite N grand

FIGURE 3.4 – Loi du demi-cercle de Wigner. Les charges de Coulomb (ie les valeurs propres) sont confinées par le potentiel harmonique et s'accumulent au minimum du potentiel, près de l'origine.

Les moments d'ordre impair sont nuls par parité de la densité et on a

$$\langle E^{2k} \rangle \sim \frac{(2N)^k \Gamma(k + 1/2)}{\sqrt{\pi} \Gamma(k + 2)} \text{ pour } N \gg 1. \quad (3.48)$$

Originellement, c'est en calculant empiriquement les premiers moments de larges matrices aléatoires que la loi du demi-cercle de Wigner a été découverte [Wig93].

Notons au passage que pour l'ensemble GUE avec $\beta = 2$, il est possible d'obtenir exactement la densité d'états moyenne pour n'importe quelle taille de matrices N en utilisant l'arsenal des polynômes orthogonaux [Meh04, Viv11]. On a

$$\rho_N(E) = \frac{1}{N\sqrt{2\pi}} e^{-E^2/2} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{2^j j!} H_j^2 \left(\frac{E}{\sqrt{2}} \right) \quad (3.49)$$

où les $H_k(x)$ sont les polynômes de Hermite [AS64].

3.3 Méthodes numériques utilisées en théorie des matrices aléatoires

De manière assez basique, il existe trois techniques permettant d'obtenir des échantillons de valeurs propres de matrices aléatoires. Chacune de ces méthodes possèdent ses avantages et ses inconvénients.

3.3.1 Méthode naïve

La première méthode que nous qualifierons de naïve, consiste à remplir des matrices de taille $N \times N$ (en faisant attention aux symétries de cette dernière suivant l'ensemble que l'on étudie) avec des variables aléatoires gaussiennes puis à utiliser des algorithmes de diagonalisation afin d'obtenir les valeurs propres. Par exemple, pour les matrices GOE, on utilise des sous-programmes de diagonalisation de matrices symétriques réelles. Le nombre d'éléments indépendants à garder en mémoire dans les trois ensembles gaussiens est de l'ordre de N^2 pour N grand. L'espace de stockage des matrices croît donc très vite avec la taille des matrices. L'un des inconvénients de cette méthode est le temps de calcul nécessaire à la diagonalisation qui croît typiquement comme N^3 .

3.3.2 Formulation tridiagonale

De nombreux algorithmes de calcul des valeurs propres utilisent une étape de réduction sous la forme d'une matrice tridiagonale. Partant d'une matrice aléatoire appartenant à l'un des trois ensembles gaussiens, on peut se demander quelle est la distribution de probabilité des éléments de la matrice après avoir été mise sous forme tridiagonale. Notons $N(0, 1)$ des variables aléatoires gaussiennes standards (de moyenne nulle et variance 1) et χ_k des variables aléatoires distribuées suivant la racine carrée d'une loi chi carrée⁸. Dumitriu et Edelman ont introduit l'ensemble des matrices tridiagonales [DE02]

$$H_\beta = \begin{pmatrix} N(0, 1) & \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{(N-1)\beta} & & & \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{(N-1)\beta} & N(0, 1) & \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{(N-2)\beta} & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{2\beta} & N(0, 1) & \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_\beta \\ & & & \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_\beta & N(0, 1) \end{pmatrix}$$

et ont montré que la distribution jointe des valeurs propres de cet ensemble de matrices était exactement donnée par celle des ensembles gaussiens invariants (3.13)! Comme la matrice est symétrique, il ne faut garder en mémoire que les éléments diagonaux et ceux au-dessus de la diagonale par exemple, ce qui fait $2N - 1$ éléments indépendants (au lieu de N^2 comme nous l'avons vu dans la méthode précédente). De plus, comme il existe des algorithmes spécialisés pour la diagonalisation des matrices tridiagonales dans la plupart des bibliothèques standards, cette méthode est de ce fait beaucoup plus rapide et efficace que la technique naïve. La majeure partie de nos résultats a été obtenue en utilisant cette technique. Notons aussi qu'avec cette technique l'indice de Dyson β peut prendre n'importe quelle valeur entière. D'autres formes tridiagonales ont par la suite été trouvées pour les ensembles de Wishart-Laguerre et Jacobi [ES08].

3.3.3 Algorithme Monte-Carlo

Il s'agit certainement de la méthode la plus efficace pour échantillonner les valeurs propres des matrices aléatoires. Elle est basée sur l'analogie avec le gaz d'électrons bidimensionnel plongé dans un potentiel harmonique et soumis au potentiel répulsif logarithmique que nous avons détaillé plus haut. L'origine de cette analogie vient de la réécriture de la probabilité jointe des valeurs propres comme un poids de Boltzmann

$$P_\beta(E_1, E_2, \dots, E_N) = \frac{1}{Z_N(\beta)} e^{-\beta \mathcal{H}[\{E_i\}]} \quad (3.50)$$

avec le Hamiltonien

$$\mathcal{H}[\{E_i\}] = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N E_i^2 - \sum_{i < j} \ln |E_i - E_j|. \quad (3.51)$$

8. Si $\{z_1, z_2, \dots, z_k\}$ sont k variables gaussiennes standards $N(0, 1)$ alors la somme de leur carrée $W = \sum_{p=1}^k z_p^2$ est distribuée suivant une loi chi carrée de paramètre k , $W \sim \chi_k^2$.

Nous présentons ici les étapes importantes du fonctionnement de l'algorithme Monte-Carlo. Une étude détaillée peut être trouvée dans [Nad11].

- L'algorithme est initialisé par une configuration $\mathcal{C} = \{E_1^{(0)}, E_2^{(0)}, \dots, E_N^{(0)}\}$ aléatoire. Nous savons que le comportement typique des valeurs propres pour N grand est donné par $|E_{typ}| \sim \sqrt{N}$ et que la densité est à support fini pour N grand (une valeur propre ne peut pas être arbitrairement loin de l'origine). Afin d'assurer une convergence plus rapide vers le régime stationnaire, il est préférable d'initialiser l'algorithme avec une configuration telle que $E_i^{(0)} \in [-\sqrt{2N}, \sqrt{2N}]$.
- On choisit ensuite au hasard, avec une loi uniforme, une valeur propre $E_j^{(0)}$ et on propose de la modifier comme $E_j^{(0)} \rightarrow E_j^{(0)} + \epsilon$, avec ϵ une variable aléatoire gaussienne centrée de variance σ^2 . Cette variance est adaptée empiriquement de façon à avoir un taux de rejet de 50%. Les autres valeurs propres E_i restent inchangées.
- La nouvelle configuration proposée $\{E'_i\}$ est acceptée (respectivement rejetée) avec la probabilité Metropolis p (respectivement $q = 1 - p$)

$$p = \min \left(1, \frac{P_\beta(E_1^{(0)}, E_2^{(0)}, \dots, E_j^{(0)} + \epsilon, \dots, E_N^{(0)})}{P_\beta(E_1^{(0)}, E_2^{(0)}, \dots, E_j^{(0)}, \dots, E_N^{(0)})} \right) = \min \left(1, e^{-\beta(\mathcal{H}[\{E'_i\}] - \mathcal{H}[\{E_i\}])} \right). \quad (3.52)$$

- On peut montrer que la chaîne de Markov ainsi engendrée par ce processus converge vers une loi stationnaire $P_\beta(E_1, E_2, \dots, E_N)$. Après un grand nombre d'itérations, on génère donc des configurations de valeurs propres $(E_1, E_2, \dots, E_N)$ approximativement distribuées suivant la loi $P_\beta(E_1, E_2, \dots, E_N)$.
- Une fois que le régime stationnaire est atteint, on peut commencer à tracer les histogrammes des quantités qui nous intéressent comme la densité par exemple. Le régime stationnaire est atteint après une période de thermalisation et le nombre d'itérations Q nécessaire à la thermalisation se détermine empiriquement (voir figure 3.5). Du fait qu'à chaque itération on ne modifie la position que d'une seule valeur propre (ou charge), il vient que les configurations successives générées aux étapes j et $j + 1$ sont fortement corrélées. Il n'est pas nécessaire de garder les configurations engendrées à chaque itération et on choisit de garder une configuration sur t après Q itérations. On ne garde donc que les configurations obtenues aux itérations $t, Q + t, Q + 2t, \dots$. L'ensemble des configurations retenues forment l'échantillonnage numérique de la distribution jointe des valeurs propres (3.13). On construit alors à partir de cet échantillonnage les histogrammes des quantités qui nous intéressent comme la densité ou tout autre fonction des valeurs propres.

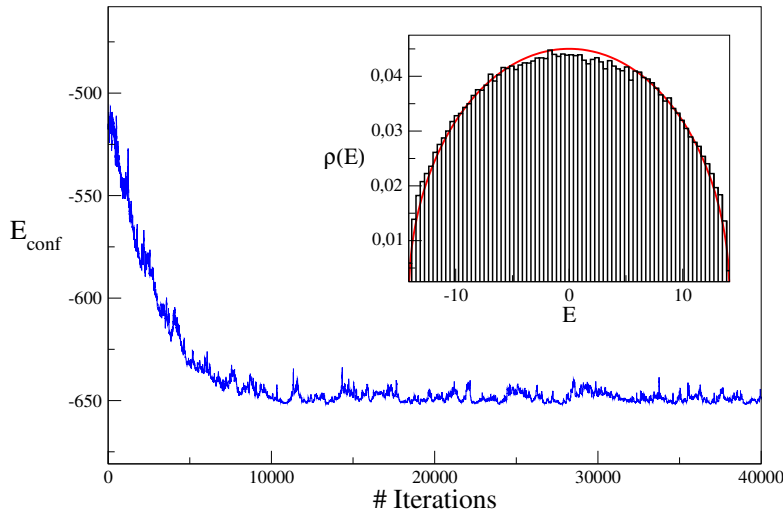


FIGURE 3.5 – Évolution de l'énergie des configurations (3.51) au cours de l'algorithme Monte-Carlo. Au bout de $Q = 10000$ itérations, le système a plus ou moins thermalisé et les valeurs propres peuvent être échantillonnées toutes les $t = 500$ itérations. Encadré : densité d'états obtenues en faisant l'histogramme des 374900 valeurs propres échantillonnées. Les résultats ont été obtenus pour $N = 50$ charges de Coulomb (ie valeurs propres) à la température $\beta = 2$ (i.e. dans l'ensemble GUE). En rouge, la loi du demi-cercle de Wigner (3.46).

3.4 Distribution de l'espacement d'énergie

Une des grandeurs qui caractérise le mieux le comportement des niveaux d'énergie et qui permet d'étudier leur propriétés spectrales est la distribution des distances entre premiers voisins. Soit un ensemble ordonné de valeurs propres $\{E_i\}_{1 \leq i \leq N}$ obtenues soit par diagonalisation du Hamiltonien d'un problème quantique (par exemple une chaîne de spins), soit par l'une des trois méthodes explicitées plus haut si on s'intéresse aux matrices aléatoires. On définit les espacements successifs entre valeurs propres par $s_i = E_{i+1} - E_i$. La distribution de probabilité des s_i est donnée par

$$P(s)ds = \frac{1}{N-1} \# \{i; s \leq s_i \leq s + ds\}. \quad (3.53)$$

Afin de faciliter la comparaison entre les statistiques provenant de problèmes variés, on prendra pour convention de toujours imposer les conditions de normalisation

$$\int_0^\infty P(s)ds = 1 \text{ et } \int_0^\infty sP(s)ds = 1. \quad (3.54)$$

3.4.1 Distribution de l'espacement pour des nombres tirés de manière uniforme dans $[0, 1]$

On se propose ici de déterminer la distribution de probabilité de l'espacement pour des variables aléatoires tirées de manière uniforme dans $[0, 1]$. L'argument que nous allons développer peut être retrouvé dans [Meh04]. Soit X une séquence ordonnée de $N \gg 1$ nombres aléatoires distribués uniformément

$$X = \{E_1, E_2, \dots, E_N\}, \quad E_i \in [0, 1]. \quad (3.55)$$

On définit l'ensemble S des distances entre premiers voisins :

$$S = \{S_1, S_2, \dots, S_{N-1}\}, \quad (3.56)$$

avec $S_i = E_{i+1} - E_i$. La valeur moyenne des S_i donne l'espacement moyen D qui sera pris égal à 1 par la condition de normalisation (3.54). Raisonnons tout de même dans le cas général où l'espacement moyen D n'est pas fixé⁹. La distribution des espacements $P(s)ds$ donne la probabilité d'observer un espacement dans l'intervalle $[s, s+ds]$. Comme les variables aléatoires E_i ne sont pas corrélées, il s'ensuit que la probabilité que E_i tombe dans l'intervalle $[E, E+dE]$ est indépendante de E . Déterminons la probabilité d'observer un espacement S correspondant à la probabilité d'avoir une valeur propre en une position arbitraire E , puis aucune autre dans l'intervalle $[E, E+S]$ et une dans l'intervalle $[E+S, E+S+dS]$. En divisant l'intervalle d'énergie S en k parties égales, la probabilité de ne pas observer de valeurs propres dans l'intervalle S est égale au produit des probabilités de ne pas avoir de valeurs propres dans chacune des k parties, ie $(1 - \rho S/k)^k$ puisque les variables E_i ne sont pas corrélées, et où $\rho = D^{-1}$ est le nombre moyen de valeurs propres dans l'intervalle unité. En faisant tendre k vers l'infini, on a

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left(1 - \rho \frac{S}{k}\right)^k = e^{-\rho S}. \quad (3.57)$$

Il vient alors que la probabilité de ne pas avoir de valeur propre dans $[E, E+S]$ et une dans $[E+S, E+S+dS]$ est donnée par le produit de la probabilité (3.57) par la probabilité ρdS d'observer une valeur propre dans l'intervalle $[S, S+dS]$

$$e^{-\rho S} \rho dS.$$

En termes des variables $s = \rho S = S/D$, on obtient finalement

$$P(s)ds = e^{-s}ds, \quad (3.58)$$

qui est normalisé comme il se doit. Remarquons que l'argument que nous venons de développer tient pour toute distribution de valeurs propres non-corrélées. La distribution (3.58) est caractérisée par une absence de répulsion de niveaux, i.e. $P(0) \neq 0$, et une décroissance exponentielle pour $s \gg 1$ (voir figure 3.6). Elle est connue sous le nom de loi de Poisson.

9. En pratique, les spectres d'énergies provenant de modèles variés n'ont pas forcément un espacement moyen égal à 1.

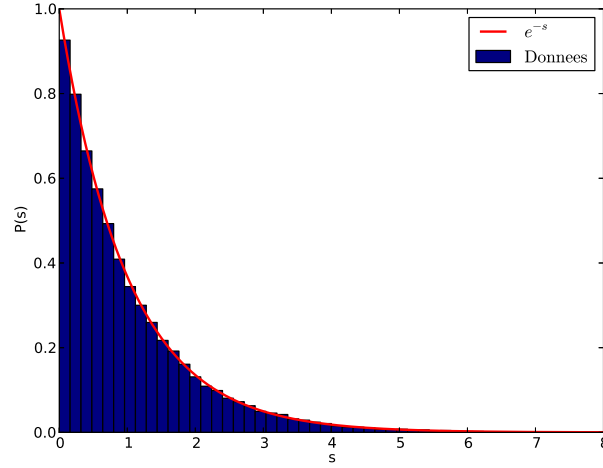


FIGURE 3.6 – Distribution de Poisson pour l’espacement entre deux variables aléatoires de loi uniforme dans $[0, 1]$. Résultats numériques obtenus pour $N = 60000$ tirages.

3.4.2 Ansatz de Wigner pour la distribution de l’espacement dans les ensembles gaussiens invariants

L’argument développé plus haut dans le cadre de variables non corrélées ne tient plus pour les ensembles gaussiens invariants du fait de la forte corrélation engendrée par le terme Vandermonde dans la distribution jointe des valeurs propres (3.13). La distribution des espacements est définie par

$$P(s) = \left\langle \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \delta(s - s_j) \right\rangle, \quad s_j = E_{j+1} - E_j \quad (3.59)$$

où les crochets indiquent la moyenne sur les réalisations de valeurs propres des matrices aléatoires, $\langle (\dots) \rangle = \int \prod_i dE_i (\dots) P_\beta(E_1, E_2, \dots, E_N)$. Il est extrêmement difficile de calculer cette valeur moyenne comme on peut le constater en utilisant l’expression de la distribution jointe des valeurs propres (3.13). La difficulté du calcul vient en majeure partie du terme $\prod_{i < j} |E_i - E_j|^\beta$ qui couple fortement les valeurs propres les unes aux autres. Comme le calcul pour N général est beaucoup trop compliqué, Wigner a proposé de faire le calcul de la distribution d’espacement des valeurs propres pour le cas de matrices 2×2 dans les trois ensembles gaussiens. Le résultat obtenu s’avère être en très bon accord avec les simulations numériques de **grandes** matrices aléatoires et est connu sous le nom de “surmise” de Wigner pour la distribution d’espacement d’énergie. Nous le détaillons dans ce qui suit. Le calcul pour des matrices 2×2 se réduit au calcul d’une intégrale double et on a

$$P_W(s) \propto \int_{E_1 \leq E_2} |E_2 - E_1|^\beta e^{-\frac{\beta}{2}(E_1^2 + E_2^2)} \delta(s - (E_2 - E_1)) dE_1 dE_2 = a_\beta s^\beta e^{-b_\beta s^2} \quad (3.60)$$

où β est l’indice de Dyson, a_β et b_β sont des constantes de normalisation déduites des conditions (3.54). Il n’est pas très difficile de montrer que

$$a_\beta = \frac{2}{\Gamma\left(\frac{\beta+2}{2}\right)} \left(\frac{\Gamma\left(\frac{\beta+2}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\beta+1}{2}\right)} \right)^{\beta+2}, \quad c_\beta = \left(\frac{\Gamma\left(\frac{\beta+2}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\beta+1}{2}\right)} \right)^2. \quad (3.61)$$

Explicitement, pour $\beta = 1, 2, 4$, on obtient les distributions de Wigner-Dyson

$$\begin{aligned} \text{GOE} : \quad P_W(s) &= \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right) \\ \text{GUE} : \quad P_W(s) &= \frac{32}{\pi^2} s^2 \exp\left(-\frac{4}{\pi} s^2\right) \\ \text{GSE} : \quad P_W(s) &= \frac{2^{18}}{3^6 \pi^3} s^4 \exp\left(-\frac{64}{9\pi} s^2\right). \end{aligned} \quad (3.62)$$

L'intuition de Wigner s'avère être une bonne description de la répulsion de niveaux observée dans les expériences de diffraction de neutrons comme le montre la figure 3.7. Pour les trois ensembles gaussiens, la distribution de

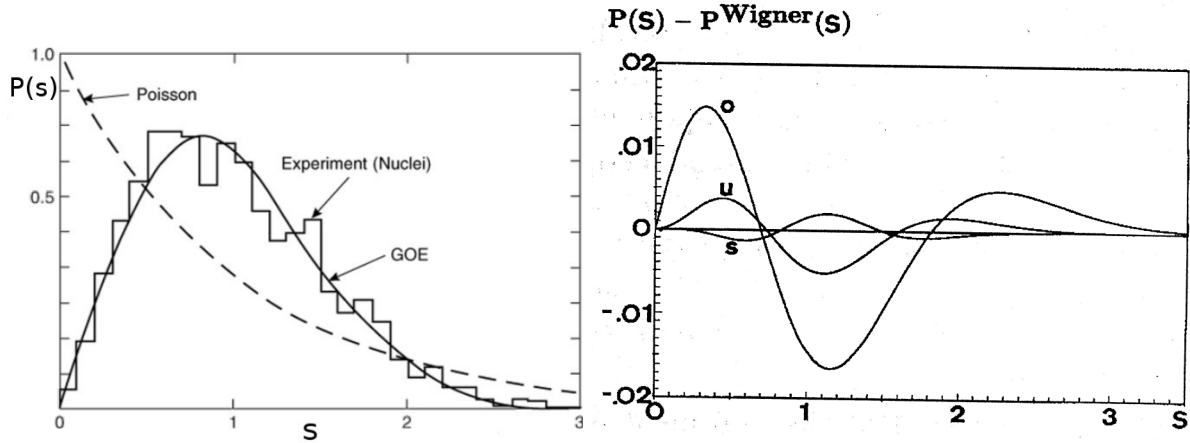


FIGURE 3.7 – À gauche : distribution de l'espacement de niveaux d'énergie d'un noyau atomique. En trait plein, la prédiction de Wigner (3.62) pour l'ensemble GOE. (Figure de gauche tirée de [BHP83]). À droite : différence entre la distribution de l'espacement d'énergie pour $N \rightarrow \infty$ et le “surmise” de Wigner (3.62) pour les trois ensembles gaussiens invariants. Le “surmise” de Wigner est une bonne approximation du résultat asymptotique. (Figure de droite tirée de [Haa10]).

l'espacement d'énergie se caractérise par une répulsion de niveaux pour $s \ll 1$ et une décroissance exponentielle pour $s \gg 1$. Plus tard, il a été possible d'obtenir l'expression exacte de la distribution de l'espacement pour des tailles de matrices $N \rightarrow \infty$. Par exemple, pour l'ensemble GUE ($\beta = 2$) le résultat asymptotique s'exprime en fonction de la solution de l'équation de Painlevé V comme nous l'avons vu dans l'introduction de ce chapitre (voir formule (3.1) et [Meh04] pour une démonstration détaillée de ce résultat). Comme on peut l'observer sur la figure 3.7 (à droite), le “surmise” de Wigner (pour $N = 2$) constitue une bonne approximation du résultat asymptotique (pour $N \rightarrow \infty$) dans les trois ensembles gaussiens!

Bien que le résultat obtenu pour des matrices 2×2 soit déjà en très bon accord avec le résultat asymptotique, il est tout-à-fait naturel et légitime de se demander si la précision ne peut pas être améliorée en considérant non pas des matrices 2×2 mais des matrices 3×3 . En effet, rien n'empêche de faire un tel calcul encore faisable “à la main”. On a

$$P_\beta(s) \propto \int \frac{1}{2} \left[\delta(s - (E_2 - E_1)) + \delta(s - (E_3 - E_2)) \right] P_\beta(E_1, E_2, E_3) dE_1 dE_2 dE_3 \quad (3.63)$$

avec que $E_1 \leq E_2 \leq E_3$. On peut montrer que

$$P_\beta(s) \propto s^\beta \int_0^\infty y^\beta (s+y)^\beta e^{-(s^2 + sy + y^2)} dy. \quad (3.64)$$

Pour les valeurs entières de β , l'intégrale peut être calculée et s'exprime en fonction de la fonction d'erreur complémentaire. Les expressions exactes dans les trois ensembles gaussiens peuvent être retrouvées dans notre papier [ABG⁺13]. Nous ne les détaillerons pas ici, nous présentons uniquement les résultats numériques obtenus. Dans la figure 3.8, nous avons tracé la différence entre les prédictions analytiques pour les petites tailles de

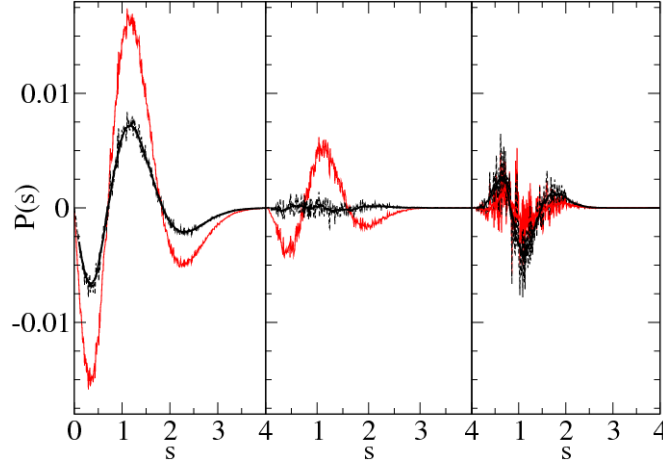


FIGURE 3.8 – Différence entre les prédictions analytiques pour de petites taille de matrices $n \times n$ et la distribution de l’espacement obtenue numériquement par diagonalisation de matrices de taille $N = 1000$ (de gauche à droite : GOE, GUE, GSE). En rouge, le “surmise” de Wigner avec $n = 2$ et en noir l’expression intégrale (3.64) obtenues pour des matrices de tailles $n = 3$. Résultats numériques obtenus par diagonalisation de 160000 réalisations de matrices aléatoires pour GOE et GUE, 20000 pour GSE.

matrices $N = 2$ (correspondant au “surmise” de Wigner) et $N = 3$ et les résultats numériques de simulations de grandes matrices de taille $N \gg 1$. Comme on peut l’observer dans le cas GUE, l’expression (3.64) avec $\beta = 2$ réduit considérablement l’erreur de l’approximation. Évidemment, on peut continuer à essayer d’améliorer les résultats en calculant la distribution de l’espacement pour des matrices de taille 4×4 (puis 5×5 et ainsi de suite) mais le calcul devient très vite laborieux et la précision atteinte est déjà largement suffisante pour distinguer en pratique les statistiques. De plus, les expressions du “surmise” de Wigner pour la distribution de l’espacement sont beaucoup plus simple que celles obtenues pour des tailles de matrices supérieures.

3.5 Conjectures reliées à la distribution de l’espacement

L’une des grandes raisons pour laquelle la distribution de l’espacement des niveaux d’énergie a suscité un tel effort de recherche est que la prédiction de Wigner décrit très bien les comportements expérimentaux observés (voir figure 3.7). Cela a donc poussé les physiciens à obtenir plus de résultats théoriques sur cette quantité [Meh04]. Plus tard, de nombreuses simulations numériques ont permis de proposer deux conjectures importantes reliant la statistique spectrale des niveaux d’énergie d’un Hamiltonien à la nature intégrable ou chaotique du modèle étudié. En pratique, on étudie seulement la statistique des niveaux associés aux éléments des représentations irréductibles des groupes de symétries du système étudié. Autrement dit, si des symétries du système sont connues, on étudie alors les niveaux indépendamment dans chacun des blocs de symétrie, chaque bloc étant associé à un nombre quantique conservé. Par exemple, lorsque nous étudierons les niveaux de la chaîne de spins avec conditions aux bords périodiques, nous regarderons la statistique des niveaux dans chacun des blocs de symétries de l’opérateur de translation (voir Chapitre 1).

3.5.1 Conjecture de Berry-Tabor pour les systèmes intégrables

La première conjecture due à Berry et Tabor stipule que les valeurs propres des systèmes quantiques dont la version classique est intégrable¹⁰ sont distribuées suivant une loi poissonnienne [BT77b]

$$P(s) = e^{-s}. \quad (3.65)$$

10. Par intégrable, nous entendons les systèmes dont le nombre de constantes du mouvement indépendantes est au moins supérieur au nombre de degrés de liberté du système.

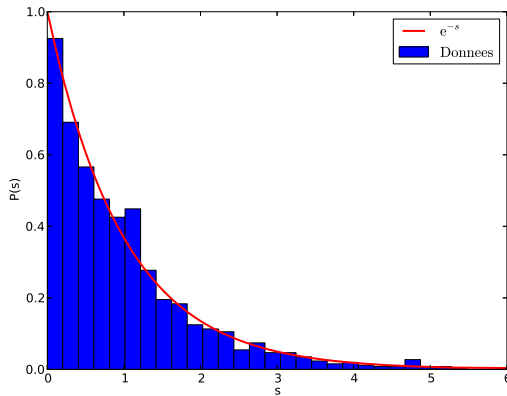


FIGURE 3.9 – Densité de probabilité de l'espace en énergie pour un rectangle de côtés incommensurables $a = 1$ et $b = 5^{1/4}$. L'histogramme a été obtenu en prenant en compte 1262 niveaux d'énergie compris entre $E_{min} = 200$ et $E_{max} = 50000$.

La conjecture de Berry-Tabor est vraie uniquement pour des systèmes intégrables “génériques”. En effet, il existe plusieurs exemples de systèmes intégrables dont la statistique n'est pas poissonnienne : c'est le cas par exemple des oscillateurs harmoniques [BT77b, PBG89].

3.5.2 Conjecture BGS pour les systèmes chaotiques

Nous avons vu que la complexité des interactions entre nucléons dans les noyaux lourds a poussé à introduire l'approche non déterministe des matrices aléatoires pour la description des niveaux d'énergie. De la même manière, il paraît raisonnable de décrire la statistique des niveaux d'énergie des systèmes chaotiques par les matrices aléatoires. Pour les systèmes quantiques à contrepartie classique chaotique, la conjecture BGS (Bohigas-Giannoni-Schmit) [BGS84] prévoit que la statistique des niveaux tombe dans l'un des ensembles fondamentaux de matrices aléatoires (GOE, GUE ou GSE) suivant les symétries du système étudié. Il existe de nombreuses simulations numériques qui viennent conforter cette conjecture. Par exemple, nous présentons la distribution de l'espace pour le modèle du billard de Sinaï sur la figure 3.10. Le billard de Sinaï est un billard carré de côté a au centre duquel on a placé un disque impénétrable de rayon $R < a$. Ce modèle est non intégrable et comme on peut l'observer, la statistique des niveaux d'énergie est bien décrite par la prédiction des matrices aléatoires [BGS84] ! La conjecture BGS est vraie de manière “générique” et constitue donc une signature du chaos au niveau des fluctuations locales dans le spectre d'énergie. Cependant, il peut arriver que des systèmes,

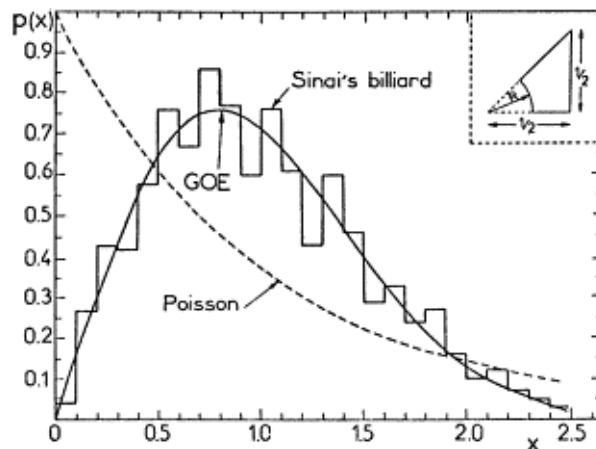


FIGURE 3.10 – Distribution de l'espace d'énergie pour un billard de Sinaï. En trait plein, la prédiction de Wigner pour l'ensemble GOE. Figure tirée de [BGS84].

dont la dynamique classique sous-jacente est complètement chaotique, présentent une distribution de niveaux poissonnienne [BGS97, BLS96]. Il existe aussi des systèmes avec des statistiques intermédiaires dont une étude détaillée peut être retrouvée dans la thèse d'Olivier Giraud [Gir02].

3.6 La procédure d'unfolding

Jusqu'à présent, nous avons présenté des figures pour la distribution de l'espacement en passant par-dessus une étape très importante dont les détails et les origines sont peu discutés dans la littérature. On se propose d'essayer d'expliquer de manière détaillée ici la nécessité de la procédure d'unfolding pour la distribution de l'espacement. Quelques subtilités liées à cette procédure sont discutées récemment dans [GMRnR02, MLSF11]. Donnons-nous un ensemble de valeurs propres ordonnées $\{E_i\}$ soit obtenues par la diagonalisation d'un Hamiltonien, soit directement construites à partir d'une formule analytique (ce qui est le cas pour les billard par exemple, voir (2.16)). Définissons la séquence des espacements

$$s_i = E_{i+1} - E_i, \quad (3.66)$$

et construisons en leur histogramme. Si nous voulons comparer le résultat aux prédictions de la théorie des matrices aléatoires, il faut que les conditions de normalisation

$$\int_0^\infty P(s)ds = 1, \quad \int_0^\infty sP(s)ds = 1, \quad (3.67)$$

soient respectées. A priori, ces conditions ne sont pas vérifiées en raison du fait que les densités de niveaux d'énergie ne sont pas uniformes. Par exemple, pour les matrices aléatoires nous avons vu que la densité de valeurs propres suit la loi du demi-cercle de Wigner [Meh04]. Les valeurs propres des matrices aléatoires appartenant aux ensembles gaussiens invariants sont confinées dans le support $|\lambda_i| \lesssim \sqrt{2\beta N}$ avec N la taille de la matrice et β l'indice de Dyson défini plus haut. En raison du potentiel harmonique confinant et du terme de répulsion logarithmique dans la distribution jointe des valeurs propres pour ces ensembles de matrices aléatoires, les valeurs propres sont regroupées autour de l'origine et se raréfient près des bords du support (voir figure 3.11). Il s'ensuit que l'histogramme des espacements dépend fortement de la fenêtre d'énergie où l'on regarde et est biaisé par la non uniformité de la densité d'états. Pour une fenêtre d'énergie donnée, les valeurs propres dans le centre du

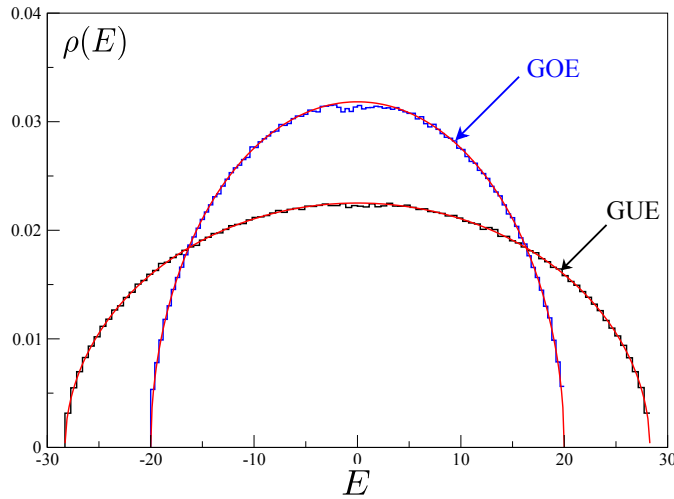


FIGURE 3.11 – Loi du semi-cercle de Wigner pour les valeurs propres de matrices aléatoires dans les ensembles GOE et GUE. Les résultats numériques ont été obtenus par la diagonalisation de 5000 réalisations de matrices tridiagonales de taille 200×200 (voir 3.3.2 pour la forme exacte des matrices tridiagonales).

spectre apportent une contribution plus importante que celles sur les bords. Pour rétablir l'égalité et observer des comportements « universels », il faut effectuer une opération sur le spectre appelée unfolding. Cette procédure uniformise le spectre en renormalisant **localement** par la densité d'états¹¹. La technique généralement utilisée

11. Notons que l'approche naïve qui consisterait à diviser la densité d'états par la moyenne des espacements empirique $\langle s \rangle = \frac{1}{N-1} \sum_i s_i$ ne règle pas le problème. En effet, bien que les conditions de normalisation (3.67) soient, par définition bien vérifiées,

dans la littérature pour uniformiser le spectre consiste à travailler sur les nouvelles variables $\tilde{E}_i$ reliées aux anciennes via :

$$\tilde{E}_i = \bar{N}(E_i) \quad (3.68)$$

où $\bar{N}(\lambda)$ est la partie lisse de la densité intégrée. Montrons que cette transformation s'obtient naturellement en cherchant une transformation $f(E)$ du spectre telle que la distribution des espacements des nouvelles variables

$$\tilde{E}_i = f(E_i), \quad (3.69)$$

vérifie les conditions (3.67). Nous nous inspirons de l'argument présenté dans [Haa10]. Considérons une petite fenêtre d'énergie $[E - \Delta E/2, E + \Delta E/2]$ et écrivons la condition d'uniformité locale de la densité de niveaux

$$1 = \frac{\Delta \tilde{E}}{\Delta N} = \frac{1}{\Delta N} (f(E + \Delta E/2) - f(E - \Delta E/2)) = \frac{\Delta E}{\Delta N} f'(E),$$

où ΔN est le nombre de niveaux d'énergie contenus dans la fenêtre ΔE . En introduisant la densité locale lissée

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{\Delta N}{\Delta E}, \quad (3.70)$$

on trouve que

$$f(E) \propto \int_{E_{\min}}^E \tilde{\rho}(E') dE' = \bar{N}(E), \quad (3.71)$$

ce qu'il fallait démontrer. Une fois l'unfolding réalisé, on peut comparer des spectres venant de problèmes variés aux prédictions de la théorie des matrices aléatoires.

3.6.1 Problèmes posés par la procédure d'unfolding

La méthode d'unfolding proposée plus haut est parfaitement adaptée aux modèles pour lesquels la densité de niveaux est connue (ce qui est le cas pour les billards par exemple). Elle fonctionne aussi très bien pour les modèles où une approximation analytique de la densité de niveaux est disponible. On peut par exemple utiliser les formules multi gaussiennes pour la densité d'états que nous avons obtenues pour les modèles de chaînes de spins (voir Chapitre 2). Dans le cas contraire, on peut recourir à un lissage numérique de la densité d'états lorsque la quantité de données est suffisante. Suivant la méthode de lissage utilisée, ceci peut introduire des effets non-physiques et non contrôlables dans l'analyse statistique du spectre.

L'intérêt actuel suscité par les modèles quantiques de particules sur réseaux [KRBL10, RS10, SR10, CARK12] a mis en avant les limites de cette procédure. De manière générique, le nombre d'états de tels systèmes croît exponentiellement avec la taille du système : les méthodes de lissage de la densité d'états deviennent donc inefficaces en raison de la quantité limitée de données accessibles. Il est donc naturel que ce soit dans ce domaine que soit apparue une nouvelle mesure permettant de se passer de la procédure d'unfolding. Oganessian et Huse [OH07] ont proposé de regarder les propriétés statistiques de la quantité

$$\tilde{r}_n = \frac{\min(s_n, s_{n-1})}{\max(s_n, s_{n-1})} = \min\left(r_n, \frac{1}{r_n}\right), \quad r_n = \frac{s_n}{s_{n-1}}, \quad s_n = E_{n+1} - E_n. \quad (3.72)$$

Intuitivement, on s'attend à ce que cette quantité soit indépendante de la densité de niveaux, celle-ci se simplifiant par le fait de prendre le rapport d'espacements successifs. Comme nous le verrons plus loin, ceci est effectivement le cas (voir figure 3.12). La procédure d'unfolding devient donc inutile et aucune opération sur le spectre ne doit être effectuée. Une telle mesure permet donc une comparaison plus transparente et plus directe avec les résultats numériques. C'est pour cette raison que cette quantité est apparue fréquemment dans plusieurs travaux récents. Par exemple, dans le domaine des "quenches" quantiques, les outils de la théorie des matrices aléatoires et du chaos quantique ont été utilisés pour étudier la limite intégrable/non-intégrable de la dynamique de particules sur réseau [KRBL10, SR10, CARK12]. Elle apparaît aussi dans l'étude des propriétés de localisation [OPH09, OH07] des systèmes de N particules en interaction.

Malgré son rôle de plus en plus important joué dans le domaine des systèmes quantiques de N particules, il n'existait jusqu'à présent aucune prédiction théorique pour la distribution du rapport d'espacements successifs dans les trois ensembles de matrices aléatoires. Les statistiques étaient comparées aux résultats de simulations

cette approche ne fait que "rescaler" **globalement** les valeurs propres. L'histogramme des espacements reste biaisé par la non uniformité de la densité d'états.

numériques pour de grandes matrices aléatoires. De telles formules sont importantes pour pouvoir distinguer les dynamiques intégrables/non-intégrables de manière efficace. Nous basant sur un raisonnement analogue à celui de Wigner pour la distribution de l'espacement, nous avons réussi à obtenir des formules simples en parfait accord avec les résultats numériques provenant de domaines variés. Nous donnerons comme application possible de nos formules, l'étude des propriétés spectrales des chaînes d'Ising quantiques et des zéros de la fonction zêta de Riemann [ABGR13].

3.7 Statistique du rapport de l'espacement entre niveaux d'énergie

Comme nous l'avons décrit précédemment, si l'on s'intéresse à la distribution de l'espacement des niveaux d'énergie il faut d'abord effectuer l'unfolding de la séquence qui est une étape assez délicate et encombrante. Une manière de pallier ce problème consiste à s'intéresser plutôt à la distribution du rapport des espacements successifs. On définit donc la séquence¹²

$$r_n = \frac{s_{n+1}}{s_n}, \quad (3.73)$$

avec $s_n = E_{n+1} - E_n$. L'étude des propriétés spectrales de cette quantité ne nécessite aucune transformation sur le spectre : il s'agit là des grands intérêts et avantages de cette mesure sur la distribution de l'espacement.

3.7.1 Cas de variables poissonniennes

Nous voulons calculer la densité de probabilité $P(r)$ des rapports d'espacement successifs

$$P(r)dr = \frac{1}{\#r_i} \# \{i; r \leq r_i \leq r + dr\}, \quad (3.74)$$

donnant la probabilité d'observer un rapport d'espacements autour de r à dr près. Nous avons montré que pour le cas de variables aléatoires distribuées de manière poissonnienne, les espacements étaient aussi des variables de Poisson. Il s'ensuit que le calcul de la distribution du rapport d'espacements est assez simple à faire dans ce cas puisque les variables ne sont pas corrélées, on a [OH07]

$$P(r) = \frac{1}{N-2} \int_0^\infty ds_1 \cdots ds_{N-1} e^{-s_1 - s_2 - \cdots - s_{N-1}} \sum_{j=1}^{N-2} \delta\left(r - \frac{s_{j+1}}{s_j}\right) = \frac{1}{(1+r)^2}. \quad (3.75)$$

3.7.2 Ensembles gaussiens invariants

La distribution du rapport d'espacements a été introduite car elle permet de se passer de la procédure d'unfolding sur le spectre. De manière intuitive, l'unfolding correspond à une renormalisation des états d'énergies par la densité locale. En prenant le rapport d'espacements successifs plutôt que les espacements, la renormalisation se produit automatiquement et la procédure d'unfolding n'est plus nécessaire. Cette mesure est localement indépendante de la densité d'états comme le montre la figure 3.12 sur laquelle nous avons tracé la distribution du rapport d'espacements obtenue en faisant l'histogramme dans différentes parties du spectre pour l'ensemble GOE. Ces résultats ont été obtenus **sans unfolding**. Si nous avons fait la même chose pour la distribution de l'espacement, nous aurions obtenu des courbes différentes suivant la fenêtre d'énergie étudiée. En effet, dans le centre du spectre les valeurs propres sont très proches les unes des autres alors que sur les bords celles-ci sont éloignées de sorte que les valeurs moyennes d'espacement vérifient $\langle s \rangle_{bulk} < \langle s \rangle_{edge}$. Nous aurions donc observé des courbes de forme similaire mais centrées sur des valeurs moyennes différentes (on peut retrouver une illustration de ce propos dans [KRBL10]).

La question qui nous a intéressé a été de savoir s'il était possible d'obtenir une forme analytique pour la distribution du rapport d'espacements dans les ensembles gaussiens de matrices aléatoires. Nous connaissons la densité de probabilité jointes des valeurs propres pour les ensembles gaussiens invariants¹³ [Meh04]

$$P_\beta(E_1, E_2, \dots, E_N) = \frac{1}{Z_N(\beta)} \prod_{j < k} |E_j - E_k|^\beta \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N E_i^2\right), \quad (3.76)$$

12. Par simplicité, nous préférons utiliser ici cette définition du rapport d'espacements plutôt que celle définie en (3.72). La définition faisant intervenir le minimum en (3.72) donne une distribution uniquement définie sur le support $[0, 1]$ tandis qu'avec notre définition, la distribution est à support sur $\mathbb{R}^+$. Les deux définitions sont cependant équivalentes à une fonction thêta de Heaviside près.

13. Notons que nous n'utilisons pas la même convention (3.18) utilisée plus haut. Évidemment les deux représentations sont équivalentes à une renormalisation des valeurs propres près ($E_i \rightarrow \sqrt{\beta} E_i$) et par redéfinition de la constante de normalisation.

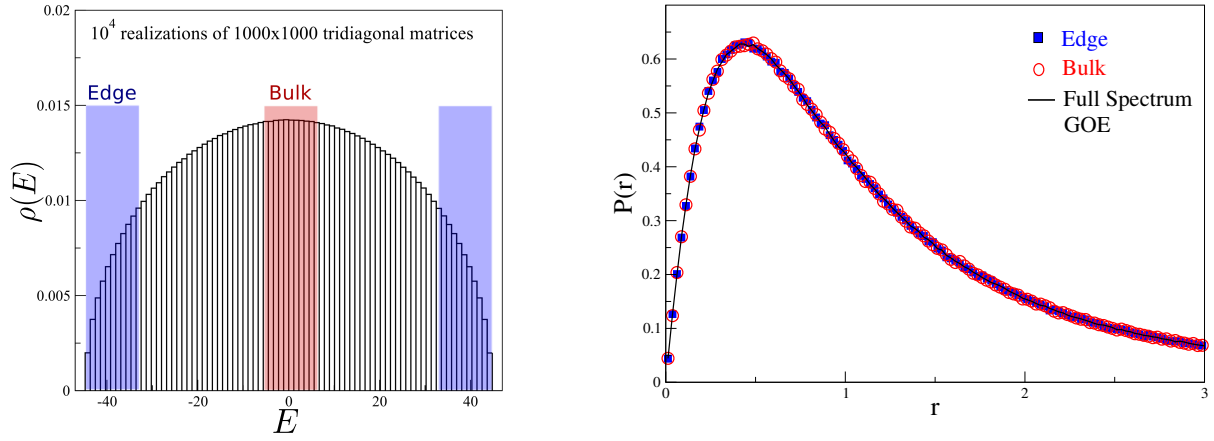


FIGURE 3.12 – Distribution du rapport d'espacements successifs d'énergies $P(r)$ obtenu en faisant l'histogramme des données (sans unfolding) dans le centre du spectre (en rouge) et sur les bords (en bleu). La courbe en trait plein noir correspond au traitement des données sur tout l'ensemble du spectre. Données obtenus par diagonalisation de 10^4 matrices tridiagonales de taille 1000×1000 dans l'ensemble GOE (voir 3.3.2 pour la forme des matrices tridiagonales).

où $Z_N(\beta)$ est une constante de normalisation connue

$$Z_N(\beta) = \frac{(2\pi)^{N/2}}{N!} \prod_{j=1}^N \frac{\Gamma\left(1 + \frac{\beta}{2}j\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{\beta}{2}\right)}. \quad (3.77)$$

En théorie il est donc possible de calculer (3.74) pour les différents ensembles gaussiens invariants en utilisant la formule

$$P_{\beta,N}(r) = \frac{1}{N-2} \left\langle \sum_{j=1}^{N-2} \delta(r - r_j) \right\rangle \quad (3.78)$$

où la moyenne est effectuée avec (3.76). De prime abord cependant, l'évaluation d'une telle intégrale est impossible pour une taille $N \gg 1$. En se rappelant que Wigner a été confronté au même problème pour la distribution de l'espacement, nous décidons de suivre l'idée du “surmise” de Wigner qui lui avait permis d'obtenir des formules simples en bon accord avec les résultats expérimentaux. Notre approche va donc consister à faire le calcul le plus simple possible pour les valeurs de taille de matrices N accessibles et faisables à la main. Le nombre minimal de valeurs propres nécessaires pour définir un rapport d'espacements est $N = 3$. Tout comme Wigner avait calculé la distribution de l'espacement pour des matrices 2×2 , nous allons calculer (3.78) pour des matrices de taille 3×3 et comparer aux résultats numériques pour de larges valeurs de N et vérifier la précision de l'approximation.

3.7.3 Analogie du “surmise” de Wigner

On se propose donc de calculer exactement $P_{\beta,3}(r)$ que l'on notera plus simplement ¹⁴ $P_{\beta}(r)$. On a

$$P_{\beta}(r) = \iiint_{E_1 \leq E_2 \leq E_3} dE_1 dE_2 dE_3 P_{\beta}(E_1, E_2, E_3) \delta\left(r - \frac{E_3 - E_2}{E_2 - E_1}\right), \quad (3.79)$$

où $P_{\beta}(E_1, E_2, E_3)$ est la distribution jointe de trois valeurs propres dans l'ensemble gaussien d'indice β . Intégrons sur E_2 pour commencer. Utilisant la propriété

$$\delta(g(z)) = \sum_i \frac{\delta(z - z_i)}{|g'(z_i)|}, \quad g(z_i) = 0, \quad (3.80)$$

14. La notation utilisée est la même que celle pour la distribution jointe des valeurs propres (3.76) mais le risque de confusion est minime puisqu'il s'agit dans un cas d'une fonction de plusieurs variables de l'énergie et d'une fonction d'une seule variable sans dimension dans l'autre cas.

on a

$$P_\beta(r) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE_1 \int_{E_1}^{+\infty} dE_3 P_\beta \left(E_1, \frac{E_3 + rE_1}{1+r}, E_3 \right) \frac{(E_2 - E_1)^2}{E_1 - E_3}. \quad (3.81)$$

On fait ensuite le changement de variable $E_3 = t + E_1$ et en utilisant l'expression (3.76), on arrive à

$$P_\beta(r) = \frac{r^\beta}{(1+r)^{2\beta+2}} \int_0^{+\infty} dt t^{3\beta+1} \exp \left(-t^2 \frac{(1+r+r^2)}{3(1+r)^2} \right) = c_\beta \frac{(r+r^2)^\beta}{(1+r+r^2)^{\frac{3}{2}\beta+1}},$$

où c_β est une constante de normalisation donnée par

$$c_\beta^{-1} = \int_0^{+\infty} \frac{(r+r^2)^\beta}{(1+r+r^2)^{\frac{3}{2}\beta+1}} dr. \quad (3.82)$$

En particulier pour les différents ensembles gaussiens qui nous intéressent, on a

$$P_{\text{GOE}}(r) = \frac{27}{8} \frac{(r+r^2)}{(1+r+r^2)^{5/2}}, \quad \beta = 1 \quad (3.83)$$

$$P_{\text{GUE}}(r) = \frac{81\sqrt{3}}{4\pi} \frac{(r+r^2)^2}{(1+r+r^2)^4}, \quad \beta = 2 \quad (3.84)$$

$$P_{\text{GSE}}(r) = \frac{729\sqrt{3}}{4\pi} \frac{(r+r^2)^4}{(1+r+r^2)^7}, \quad \beta = 4 \quad (3.85)$$

Ces formules constituent l'un de nos résultats principaux et correspondent à l'analogie du surmise de Wigner mais pour la distribution du rapport d'espacements. Pour des valeurs propres distribuées suivant la loi de Poisson, nous avons trouvé

$$P_{\text{Poisson}}(r) = \frac{1}{(1+r)^2}. \quad (3.86)$$

Notons que contrairement à la distribution de l'espacement qui décroissait exponentiellement vite pour $s \gg 1$, ici la distribution du rapport d'espacements décroît en loi de puissance dans les deux limites asymptotiques

$$P_\beta(r) \sim r^{-\beta}, \quad r \ll 1, \quad (3.87)$$

$$P_\beta(r) \sim r^{-2-\beta}, \quad r \gg 1. \quad (3.88)$$

Ces distributions vérifient la relation fonctionnelle

$$P_\beta(r) = \frac{1}{r^2} P_\beta \left(\frac{1}{r} \right) \quad (3.89)$$

reflétant la symétrie par translation des valeurs propres. Si on appelle $P_\beta(s_1, s_2)$ la probabilité d'observer un espacement de taille s_1 et un autre de taille s_2 , on a

$$\begin{aligned} P_\beta(r) &= \int P_\beta(s_1, s_2) \delta \left(r - \frac{s_1}{s_2} \right) ds_1 ds_2, \\ &= \int_0^\infty P_\beta(rs_2, s_2) s_2 ds_2. \end{aligned} \quad (3.90)$$

On peut montrer que $P_\beta(s_1, s_2) = P_\beta(s_2, s_1)$ est une fonction symétrique pour les ensembles gaussiens et aussi pour les variables poissoniennes [Meh04]. Cette symétrie entraîne la relation fonctionnelle (3.89). De manière plus physique, cette propriété découle du fait que nous aurions tout aussi bien pu choisir $\tilde{r}_n = s_n/s_{n+1} = 1/r_n$ au lieu de r_n lorsque nous avons commencé notre calcul. En supposant que les distributions de ces deux quantités sont les mêmes, on trouve la relation fonctionnelle (3.89).

3.7.4 Précision de l'approximation

Dans la figure 3.13, nous présentons l'allure des distributions du rapport d'espacements pour des matrices 3×3 (analogue du “surmise” de Wigner (3.83)-(3.85)) avec les résultats obtenus pour cette distribution par diagonalisation exacte de matrices de taille $N = 1000$ dans les trois ensembles gaussiens. Comme on peut le voir, l'analogie du “surmise” de Wigner pour $N = 3$ est une bonne approximation du résultat asymptotique! La différence entre le numérique obtenu par simulation numérique avec de grandes matrices et les approximations (3.83)-(3.85), $\delta P(r) = P_{\text{Num}} - P_{\text{Surmise}}(r)$, est tracée sur la figure 3.14. Les formules que nous proposons approchent le résultat asymptotique à $10^{-2} - 10^{-3}$ près. Une forme analytique pour l'ajustement de la différence peut être devinée en imposant le bon comportement asymptotique et la relation fonctionnelle (3.89). Nous proposons la forme

$$\delta P_{\text{fit}}(r) = \frac{C}{(1+r)^2} \left[\left(r + \frac{1}{r} \right)^{-\beta} - c_\beta \left(r + \frac{1}{r} \right)^{-(\beta+1)} \right], \quad (3.91)$$

qui respecte bien la symétrie $r \rightarrow 1/r$ et possède les bons comportements asymptotiques. Il n'y a qu'un seul paramètre d'ajustement C et le coefficient c_β s'obtient grâce à

$$\int_0^\infty \delta P_{\text{fit}}(r) dr = 0. \quad (3.92)$$

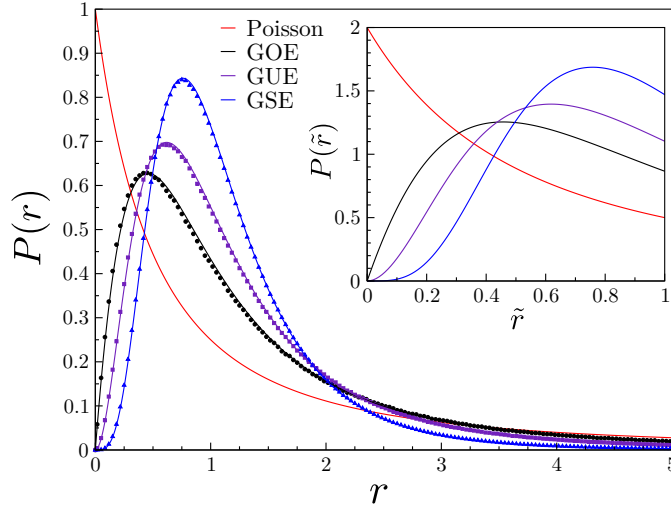


FIGURE 3.13 – Distribution du rapport des espacements successifs des valeurs propres pour des variables poissoniennes et les ensembles de matrices aléatoires. Les courbes en trait plein correspondent aux prédictions (3.83)-(3.85), les points correspondent aux résultats numériques obtenus par la diagonalisation de 10^5 matrices à coefficients aléatoires gaussiens de taille $N = 1000$. Encadré : distribution de probabilité de la quantité (3.72).

3.8 Application aux chaînes de spins quantiques

Comme premier exemple d'application de nos formules, nous commencerons par étudier les propriétés spectrales du modèle de N - spins $1/2$:

$$\hat{H} = - \sum_{n=0}^{N-1} (\hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x + \lambda \hat{\sigma}_n^z + \alpha \hat{\sigma}_n^x), \quad (3.93)$$

avec des conditions aux bords périodiques, $\sigma_{N+k}^{(x,z)} = \sigma_k^{(x,z)}$. Nous avons fait une étude détaillée de la densité d'états de ce modèle dans le Chapitre 2. Nous avons, entre autres, obtenu de bonnes approximations de la densité d'états qui peuvent être utilisées pour étudier la statistique spectrale de l'espacement. Chronologiquement, ces résultats sur la densité d'états ont été obtenus après ceux de ce chapitre. Bien que l'on puisse unfold le spectre grâce à

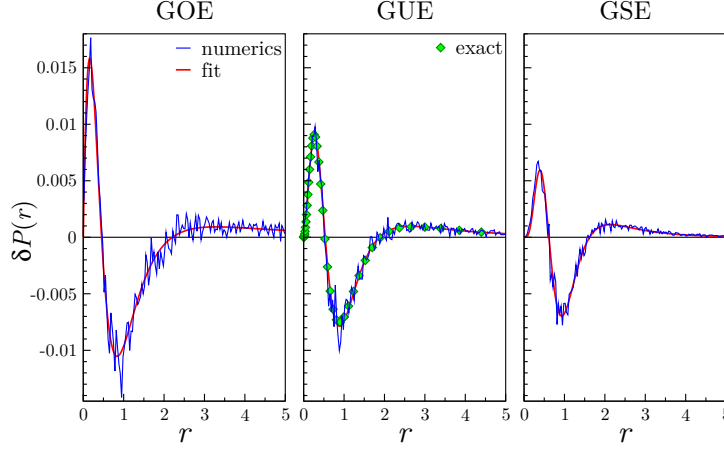


FIGURE 3.14 – En bleu la différence $\delta P(r) = P_{\text{Num}} - P_{\text{Surmise}}(r)$ entre le numérique et les approximations (“surmise”) (3.83)-(3.85). Les résultats numériques ont été obtenus avec les mêmes paramètres que sur la figure 9. En rouge, la fonction d’ajustement (3.91). Pour GUE, les diamants verts correspondent à un calcul asymptotique exact faisant intervenir un déterminant de Fredholm (voir notre article [ABGR13] pour plus de détails).

nos formules, nous présentons nos résultats pour la distribution du rapport d’espacements qui ne nécessite pas d’unfolding, ni la connaissance d’une quelconque approximation de la densité d’états.

Pour $\alpha = 0$, ce modèle se réduit au modèle d’Ising en champ transverse dont nous avons montré l’intégrabilité par la transformation de Jordan Wigner au Chapitre 2. Le coefficient α brise l’intégrabilité. Nous nous attendons donc à observer une transition d’une distribution de probabilité du rapport d’espacements décrite par la prédiction pour des variables de Poisson (3.86) pour le modèle d’Ising intégrable (conjecture de Berry-Tabor) à une description par la prédiction des matrices aléatoires (3.83) dans le cas non-intégrable (conjecture BGS).

Soit $\{E_i\}$ l’ensemble des valeurs propres de (3.93) obtenues par diagonalisation exacte (numérique) comme expliqué au Chapitre 1. L’étude des propriétés spectrales de cette ensemble de valeurs propres nécessite de regarder séparément les différents secteurs de symétries du système. Comme le système est invariant par translation, nous diagonalisons le Hamiltonien (3.93) dans la base des états propres de l’opérateur de translation $\hat{T}$. Dans cette base, le Hamiltonien prend une forme bloc diagonale où chaque bloc est indexé par son impulsion k reliée aux valeurs propres de l’opérateur de translation par $\omega_k = e^{2i\pi k/N}$ (voir section 1.4.2 pour plus de détails sur la symétrie de translation et son implémentation numérique). Il est nécessaire de séparer les différents secteurs de symétries du problème car un mélange statistique mène à un comportement poissonien [Meh04].

Dans la figure 3.15, nous présentons les résultats numériques pour une chaîne de $L = 16$ spins et différentes valeurs des paramètres α et λ . Nous tenons à insister sur le fait qu’aucune procédure d’unfolding n’a été réalisée pour obtenir ces résultats. Pour $\alpha \ll 1$, le modèle se réduit au modèle d’Ising en champ transverse intégrable et la distribution du rapport d’espacements est bien décrite par la prédiction pour des variables de Poisson (3.86). Ceci est en accord avec la conjecture de Berry-Tabor pour les modèles intégrables [BT77b]. En ajoutant un champ longitudinal fini α , on brise l’intégrabilité du système et on voit que la distribution du rapport d’espacements est alors décrite par la prédiction (3.83) pour l’ensemble GOE obtenue en utilisant l’analogie du “surmise” de Wigner. Ceci est en accord avec la conjecture de Bohigas-Giannoni-Schmit puisque le système présente une invariance par renversement du temps [BGS84]. Pour un nombre de spins N pair, les secteurs d’impulsions $k = 0$ et $k = N/2$ présentent une symétrie supplémentaire : la symétrie de réflexion par rapport au centre de la chaîne. Les valeurs propres de cet opérateur de symétrie sont $R = \pm 1$. Si on mélange les énergies de ces deux secteurs de symétrie, on observe alors une statistique poissonienne pour n’importe quelle valeur de α et λ . En séparant les énergies des deux secteurs, on retrouve les bons résultats (voir figure 3.16).

3.9 Zéros de la fonction zêta de Riemann

La fonction zêta de Riemann définie par

$$\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z}, \quad (3.94)$$

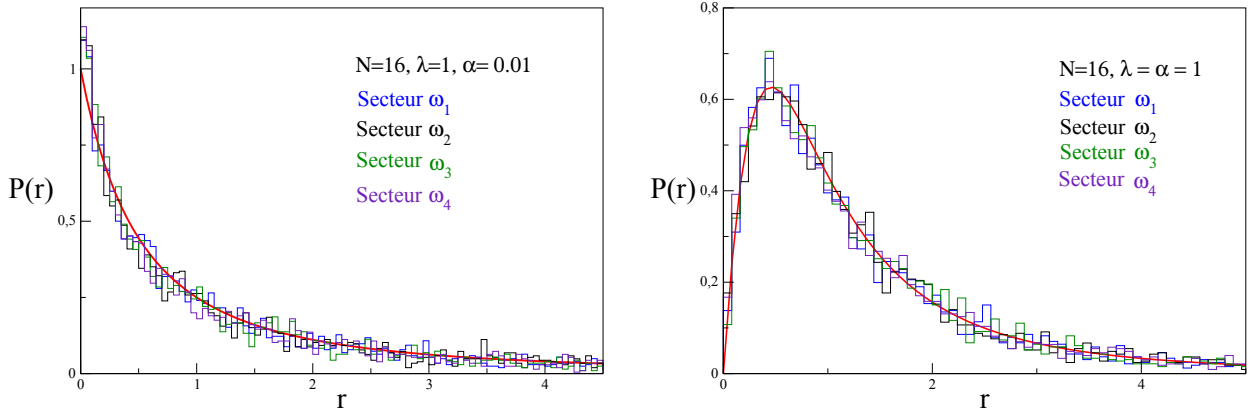


FIGURE 3.15 – Distribution du rapport des espacements successifs des niveaux d’énergie d’une chaîne de $N = 16$ spins pour différentes valeurs de α et λ obtenue sans unfolding et pour différents secteurs d’impulsion ω_k . À gauche : limite intégrable $\alpha \ll 1$, la prédiction (3.86) pour des variables poissoniennes est tracée en rouge. À droite : modèle non intégrable $\alpha = \lambda = 1$, la statistique du rapport d’espacements des niveaux est bien décrite par la prédiction GOE (3.83).

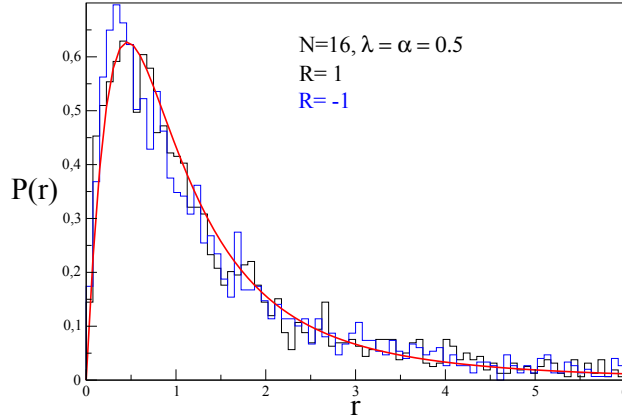


FIGURE 3.16 – Distribution du rapport d’espacements d’énergies pour $N=16$ spins et $\alpha = \lambda = 0.5$ dans le secteur d’impulsion ω_8 ($k = N/2$) et les secteurs associés aux valeurs propres de l’opérateur de réflexion $R = \pm 1$. En rouge, la prédiction GOE (3.83).

joue un rôle très important en théorie des nombres. La distribution des nombres premiers est intimement liée aux zéros non triviaux de la fonction zêta de Riemann. La conjecture de Riemann stipule que les zéros non triviaux de cette fonction sont de la forme [Tit86, Rie92]

$$z_n = \frac{1}{2} + it_n. \quad (3.95)$$

Il est bien connu et vérifié numériquement que les zéros de la fonction zêta de Riemann se comportent comme les valeurs propres de matrices aléatoires de l’ensemble GUE [Ber86, BK96, Bog07]. Nous avons donc vérifié ce fait en calculant la densité du rapport d’espacements et comparé à la prédiction (3.84) pour l’ensemble GUE. Bien que l’unfolding soit facile à implémenter pour les zéros de la fonction zêta de Riemann en raison du fait que la densité de zéros est connue (voir formule (2.34)), la mesure du rapport d’espacements ne nécessite pas

d'unfolding et permet une analyse plus transparente et plus directe des zéros. Les zéros de la fonction zêta peuvent être retrouvés sur la page web de Odlyzko [Odl]. Les résultats pour les zéros dans le haut du "spectre" sont présentés sur la figure 3.17. On observe un excellent accord avec les données "expérimentales".

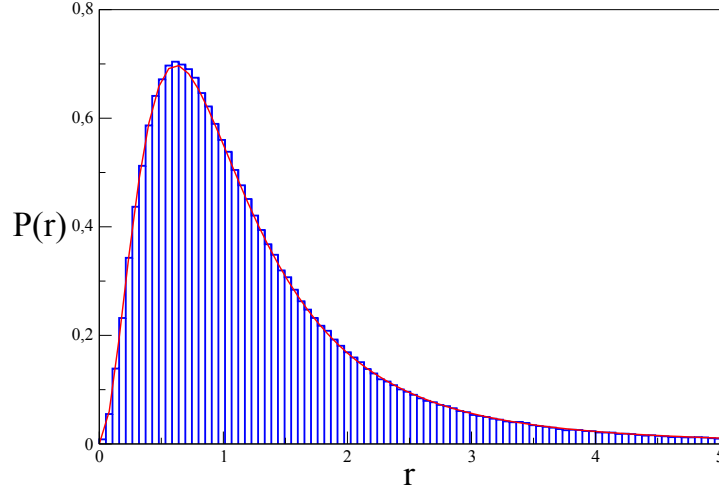


FIGURE 3.17 – Distribution du rapport des espacements successifs des zéros de la fonction zêta de Riemann de partie imaginaire $t_n \in [1100000, 1900000]$. En rouge la prédiction GUE (3.84) pour la distribution du rapport d'espacements. Les zéros ont été pris de la page web [Odl]. Résultats obtenus sans unfolding

3.10 Choix de la variable sans dimension et distribution du k recouvrement

Le choix de la variable sans dimension (3.73) est quelque peu arbitraire. Nous aurions pu tout aussi bien choisir la combinaison

$$r_n = \frac{s_{n+1} + s_{n-1}}{s_n}. \quad (3.96)$$

Les quantités intéressantes sont celles qui font intervenir des rapports de quantités voisines. En effet, la quantité

$$r_n = \frac{s_n}{s_{n+k}} \quad (3.97)$$

avec $k \gg 1$ est clairement dépendante de la densité puisqu'elle fait intervenir des valeurs propres non locales autour de E_k et la procédure d'unfolding redevient alors nécessaire. Bien qu'intéressante en théorie, ces mesures ne sont pas utilisables en pratique sans unfolding. Une quantité simple et intéressante que l'on peut introduire et qui ne nécessite pas d'unfolding est le rapport d'espacements successifs partageant une partie en commun (voir figure 3.18)

$$r_n = \frac{s_{n+1} + s_n}{s_n + s_{n-1}}. \quad (3.98)$$

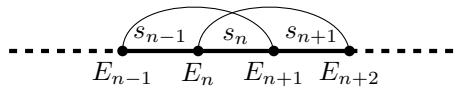


FIGURE 3.18 – Visualisation graphique de la formule (3.98). Recouvrement de l'espacement des niveaux d'énergie.

3.10.1 Cas poissonien

Pour le cas poissonien nous savons que la distribution jointe des espacements est donnée par

$$P(s_1, s_2, \dots, s_n, s_{n+1}) = \exp \left(- \sum_{i=1}^{n+1} s_i \right). \quad (3.99)$$

Notons au passage qu'il s'agit bien d'une fonction invariante par permutations de ces variables : c'est l'argument qui nous a permis de démontrer la relation fonctionnelle (3.89). Il s'en suit que la distribution de probabilité de (3.98) s'écrit

$$p(r) = \int ds_{n-1} ds_n ds_{n+1} e^{-s_{n-1}-s_n-s_{n+1}} \delta \left(r - \frac{s_{n+1} + s_n}{s_n + s_{n-1}} \right). \quad (3.100)$$

Effectuant l'intégration sur s_n , on obtient

$$p(r) = \frac{1}{(r-1)^2} \int ds_{n-1} ds_{n+1} \exp \left(-\frac{1}{r-1} (s_{n+1}r - s_{n-1}) \right) (s_{n+1} - s_{n-1}), \quad (3.101)$$

avec la condition

$$\frac{s_{n+1} - r s_{n-1}}{r-1} \geq 0 \quad (3.102)$$

qui assure la convergence de l'intégrale. Les intégrales s'effectuent de manière assez simple et on trouve finalement

$$p(r) = \begin{cases} \frac{r(2+r)}{(1+r)^2} & \text{si } r < 1, \\ \frac{1+2r}{r^2(1+r)^2} & \text{si } r > 1. \end{cases} \quad (3.103)$$

Notons que cette distribution vérifie aussi la relation fonctionnelle (3.89). Le cas poissonien permet aussi de calculer la distribution de probabilité de la quantité plus générale (voir figure 3.19)

$$r_n^{(k)} = \frac{s_n + s_{n+1} + \dots + s_{n+k}}{s_{n-1} + s_n + \dots + s_{n+k-1}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.104)$$

k est ici le nombre d'espacements en commun : le cas $k = 0$ redonne le rapport d'espacements (3.73) et pour $k = 1$ on retrouve la formule (3.98). Le calcul de la distribution $p(r^{(k)})$ des $r_n^{(k)}$, que nous appelons distribution

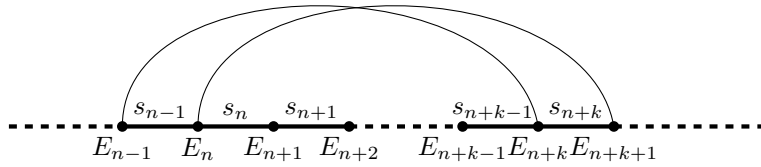


FIGURE 3.19 – Recouvrement de k espacements.

du k recouvrement, se fait de la même manière que précédemment. Le problème consiste à calculer l'intégrale multiple

$$p(r^{(k)}) = \int \prod_{j=n-1}^{n+k} ds_j e^{-s_{n-1}-s_n-\dots-s_{n+k}} \delta \left(r^{(k)} - \frac{s_n + s_{n+1} + \dots + s_{n+k}}{s_{n-1} + s_n + \dots + s_{n+k-1}} \right). \quad (3.105)$$

Le calcul n'est pas difficile et on trouve finalement que

$$p(r^{(k)}) = \begin{cases} \frac{r^k(k+1+kr)}{(1+r)^2} & \text{si } r = r^{(k)} < 1, \\ \frac{k+r(k+1)}{r^{k+1}(1+r)^2} & \text{si } r = r^{(k)} > 1 \end{cases} \quad (3.106)$$

qui vérifie aussi la relation fonctionnelle (3.89). Les résultats numériques pour des variables aléatoires tirées de manière uniforme dans l'intervalle $[0, 1]$, ainsi que pour les valeurs propres d'un billard rectangulaire et les valeurs propres du modèle d'Ising intégrable sont présentées dans la figure 3.20. Les résultats sont en accord avec la conjecture de Berry-Tabor [BT77b].

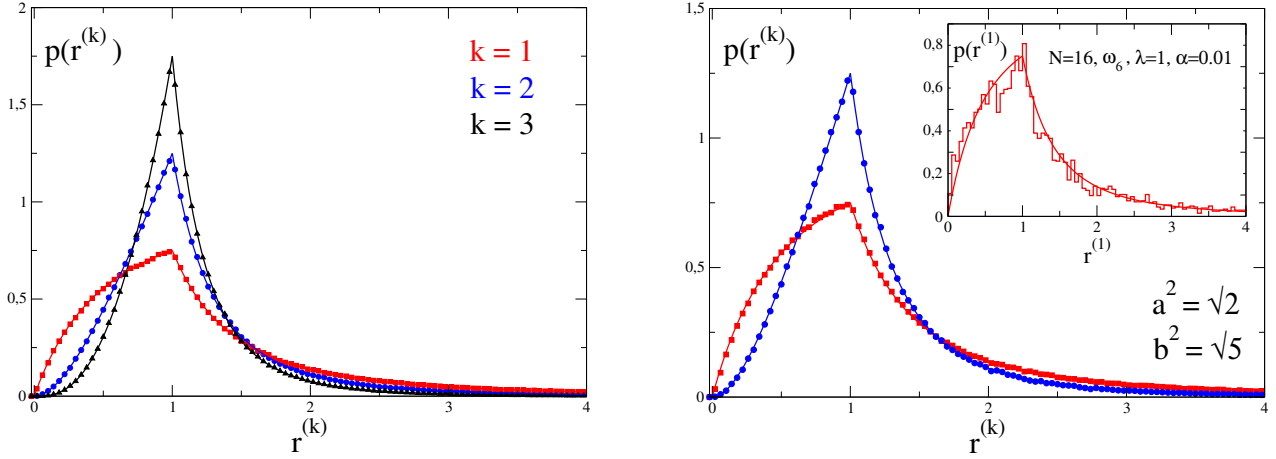


FIGURE 3.20 – Distribution du k -recouvrement pour différentes valeurs k du nombre d’espacements partagés. Les points numériques (figure de gauche) ont été obtenus par le tirage de 10^6 variables aléatoires uniformes dans l’intervalle $[0, 1]$. Les courbes en trait plein correspondent à la formule (3.106) pour les différentes valeurs de k indiquées. La figure de droite correspond aux résultats obtenus pour les valeurs propres d’un billard rectangulaire de côté incommensurable $a = 2^{1/4}$ et $b = 5^{1/4}$. Encadré : Modèle (3.93) pour $N = 16$ spins dans la limite intégrable $\alpha \rightarrow 0$ (i.e. modèle d’Ising) et dans le secteur associé à la valeur propre $\omega_6 = \exp\left(\frac{3i\pi}{4}\right)$ de l’opérateur de translation.

3.10.2 $k = 1$ recouvrement pour les ensembles gaussiens invariants

Le calcul dans le cas des matrices aléatoires gaussiennes est évidemment plus compliqué du fait des corrélations entre les valeurs propres dans la distribution jointe (3.76). Nous ne présenterons pas les détails des calculs que l’on peut retrouver dans notre article [ABG⁺13] et que l’on a reproduit en fin de chapitre. Nous donnons juste l’idée générale qui permet d’obtenir de bonnes approximations de la distribution du k recouvrement dans le cas $k = 1$. Comme le calcul général est trop compliqué, la stratégie consiste à faire le calcul pour une taille de matrice accessible. On refait donc un calcul “à la Wigner”. Le nombre minimum de valeurs propres nécessaires pour définir la quantité (3.98) est $N = 4$. Nous avons donc calculer la quadruple intégrale

$$P_\beta(r) = \iiint \mathrm{d}E_1 \mathrm{d}E_2 \mathrm{d}E_3 \mathrm{d}E_4 P_\beta(E_1, E_2, E_3, E_4) \delta\left(r - \frac{E_4 - E_2}{E_3 - E_1}\right) \quad (3.107)$$

avec $P_\beta(E_1, E_2, E_3, E_4)$ la distribution jointe (3.76) pour 4 valeurs propres. On obtient après intégration

$$P_\beta(r) = (-1)^{\beta+1} \Lambda^{(\beta)}(r) + \Lambda^{(\beta)}(-r), \quad (3.108)$$

avec

$$\Lambda^{(\beta)}(r) = d_\beta \frac{r^{4\beta}}{(1+r^2)^{3\beta+1}} \frac{|r-1|^{2\beta+1}}{(3-2r+3r^2)^{1/2+2\beta}} Q^{(\beta)}\left(r + \frac{1}{r}\right), \quad (3.109)$$

où les d_β sont des constantes fixées par la normalisation et les $Q^{(\beta)}$ sont des polynômes de degré 3β dont les expressions peuvent être retrouvées dans [ABG⁺13]. Cette forme vérifie aussi la relation fonctionnelle (3.89) et se comporte en loi de puissance dans les limites asymptotiques

$$P_\beta(r) \sim r^{3\beta+1} \quad \text{pour } r \ll 1, \quad P_\beta(r) \sim r^{-3\beta-3} \quad \text{pour } r \gg 1. \quad (3.110)$$

Une comparaison entre cette formule et les résultats numériques provenant de la diagonalisation numérique de la chaîne de spins non intégrable peut être retrouvée dans notre article [ABG⁺13].

3.11 Conclusion et perspectives

La nature intégrable ou chaotique d’un système classique se manifeste au niveau quantique par une différenciation dans la statistique des niveaux d’énergie. Les niveaux d’énergie des systèmes classiquement intégrables

se comportent comme des variables poissonniennes (conjecture de Berry-Tabor [BT77b]) tandis que les systèmes classiquement chaotiques présentent une distribution statistique semblable à celles des valeurs propres de matrices à coefficients aléatoires (conjecture de Bohigas-Giannoni-Schmit [BGS84]). La distribution de l'espacement d'énergie est une des mesures spectrales qui a longtemps été utilisée pour distinguer les statistiques. Cependant, afin d'obtenir des résultats sur cette quantité, le spectre du Hamiltonien doit préalablement être "unfolded" en raison de la non uniformité de la densité d'états comme nous l'avons expliqué plus haut. Cet unfolding est facile à implémenter pour les modèles dont la densité d'états est connue exactement (ce qui est le cas pour la plupart des modèles intégrables) et pour les modèles où une approximation de la densité d'états est connue. Dans le cas contraire, on fait alors un lissage numérique de la densité d'états. Comme nous l'avons remarqué plus haut, ceci peut introduire des effets non physiques non contrôlables dans la statistique spectrale suivant la méthode de lissage utilisée. De plus, dans les problèmes quantiques de N corps, la taille de l'espace de Hilbert croît généralement exponentiellement avec le nombre de particules, entraînant un manque de données pour pouvoir faire une statistique. Ces limitations ont amené l'introduction d'une nouvelle mesure se passant de la **procédure d'unfolding** basée sur le rapport d'espacements successifs plutôt que les espacements [OH07]. Cette mesure est indépendante de la densité d'états locale et a été utilisée à maintes reprises ces dernières années dans l'étude des propriétés des systèmes quantiques de N corps en interaction [KRBL10, OPH09, OH07, CFIM12, SR10, CARK12]. Cependant, il n'existait jusqu'à présent aucune prédiction théorique pour cette mesure dans les ensembles de matrices aléatoires et les résultats étaient comparés aux données obtenues par simulations de grandes matrices aléatoires. En suivant l'idée du "surmise" de Wigner pour le calcul de la distribution de l'espacement, nous avons calculé une approximation de la distribution du rapport d'espacements en faisant le calcul pour des matrices 3×3 . Les résultats que nous avons obtenus pour les différents ensembles de matrices aléatoires se sont révélés être de bonnes approximations du résultat asymptotique pour des matrices de tailles $N \gg 1$!

Comme exemple d'applications de nos résultats, nous discutons brièvement les systèmes variés dans lesquels nos formules ont été utilisées. Dans [KH13], les auteurs ont étudié l'évolution de l'entropie d'intrication dans une chaîne de spins 1D non intégrable¹⁵. La non intégrabilité a été observée en utilisant la distribution du rapport d'espacements et des courbes similaires à celles que nous avons obtenues (voir figures 3.15) sont présentées. La distribution du rapport d'espacements a aussi été utilisée dans l'étude des propriétés spectrales des groupements de particules bosoniques et fermioniques dans des potentiels de type Van der Waals [HCC⁺14]. Chavda *et al* se sont quant à eux intéressés à la transition de la statistique de Poisson à la statistique GOE [CDK14].

Du point de vue expérimental, l'analogie qui existe entre l'équation de Schrödinger pour une particule libre dans un billard et l'équation de Helmholtz pour le champ électrique (avec des conditions aux bords de Dirichlet) permet de tester expérimentalement les conjectures de Berry-Tabor et Bohigas-Giannoni-Schmit. Les fréquences propres de la cavité résonnante jouent en effet le rôle des valeurs propres et il est possible de les obtenir expérimentalement en mesurant les éléments de la matrice de diffusion (voir figure 3.21).

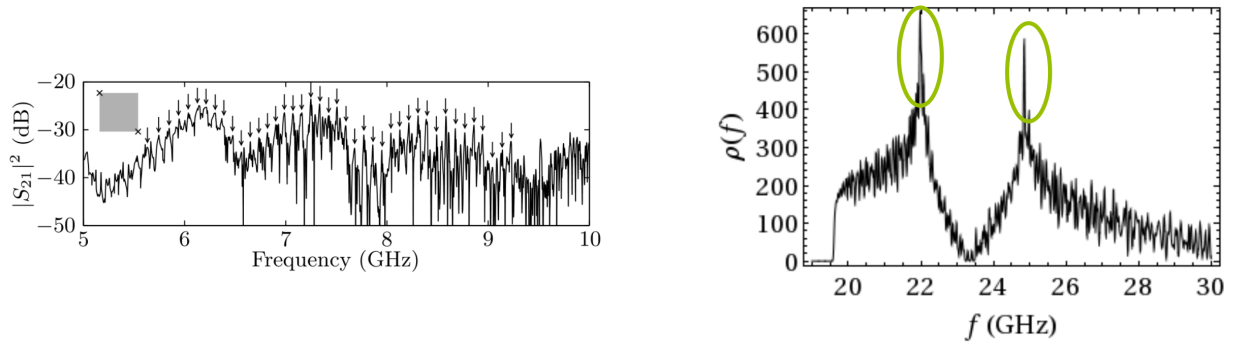


FIGURE 3.21 – Figure de gauche : élément $|S_{21}|^2$ de la matrice de diffusion S . Les pics correspondent aux résonances d'une cavité carrée. Figure tirée de [BBD⁺13]. Figure de droite : Singularité de Van Hove dans la densité en fréquences d'un billard de Dirac rectangulaire modulé périodiquement par des obstacles diffuseurs. Figure tirée de [DIMO⁺13].

La densité d'états est alors donnée par la densité spectrale en fréquences. En étudiant la distribution de

15. Il s'agit en fait exactement du modèle (2.51) que nous avons étudié (à une rotation près). Notons également que l'on trouve dans cet article des figures pour la densité d'états présentant des pics comme ceux que nous avons étudiés au Chapitre 2 (voir figure 4 de [KH13] et notre figure 2.18).

l'espacement entre pics de résonance, il est possible de vérifier expérimentalement la conjecture BGS [GHL⁺92]. Cependant, il peut exister des singularités dans la densité en fréquence autour desquelles il n'est pas possible "d'unfolder" le spectre. La distribution du rapport d'espacements devient alors adaptée et permet d'obtenir de bons résultats (voir [Ric14], ou la distribution du rapport d'espacements est utilisée près des singularités et comparée à notre prédiction théorique pour l'ensemble GOE).

Dans notre article [ABG⁺13], nous avons étendu nos résultats sur la distribution des rapport d'espacements aux ensembles de Laguerre et il a été fait de même pour d'autres ensembles de matrices aléatoires [CK13, Kot14, DR14]. Dans [DR14] par exemple, les auteurs se sont intéressés aux propriétés dynamiques d'un modèle de spins dont les interactions au plus proches voisins sont modulés périodiquement dans le temps avec une période T . Les auteurs ont étudié le comportement des valeurs propres de l'opérateur unitaire $\hat{U} = e^{T\hat{H}/2i\hbar}$ ce qui les a amenés à étendre nos résultats aux ensembles circulaires où la distribution jointe des valeurs propres est donnée par [Meh04]

$$P_\beta(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N) = \frac{1}{Z_N(\beta)} \prod_{i < j} |e^{i\theta_i} - e^{i\theta_j}|^\beta \quad (3.111)$$

avec $\beta = 1, 2, 4$ pour l'ensemble circulaire orthogonale (COE), circulaire unitaire (CUE) et circulaire symplectique (CSE) respectivement. En faisant le calcul pour des matrices 3×3 , les auteurs ont dérivé des formules pour la distribution du rapport d'espacements dans les ensembles circulaires en bon accord avec les résultats numériques. La distribution du rapport d'espacements est utilisée dans des domaines variés car elle permet une comparaison plus transparente et directe avec les données obtenues expérimentalement ou numériquement.

Il est connu que la distribution d'espacement asymptotique $N \rightarrow \infty$ peut s'exprimer en fonction de la solution de l'équation de Painlevé V [Meh04]. Une question intéressante consiste à s'intéresser à la distribution asymptotique du rapport d'espacements. Nous avons réussi à montrer que cette quantité peut s'exprimer comme une combinaison de termes solutions d'équations de type Painlevé [ABGR13] mais une forme explicite du type (3.1) n'a pas encore été trouvée.

Articles II

Distribution of the ratio of consecutive level spacings in random matrix ensembles

Distribution of the Ratio of Consecutive Level Spacings in Random Matrix Ensembles

Y. Y. Atas, E. Bogomolny, O. Giraud, and G. Roux

Université Paris-Sud, CNRS, LPTMS, UMR 8626, Orsay F-91405, France

(Received 21 December 2012; published 21 February 2013)

We derive expressions for the probability distribution of the ratio of two consecutive level spacings for the classical ensembles of random matrices. This ratio distribution was recently introduced to study spectral properties of many-body problems, as, contrary to the standard level spacing distributions, it does not depend on the local density of states. Our Wigner-like surmises are shown to be very accurate when compared to numerics and exact calculations in the large matrix size limit. Quantitative improvements are found through a polynomial expansion. Examples from a quantum many-body lattice model and from zeros of the Riemann zeta function are presented.

DOI: [10.1103/PhysRevLett.110.084101](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.084101)

PACS numbers: 05.45.Mt, 02.10.Yn, 02.50.-r

Random matrix theory (RMT) was introduced half a century ago in order to describe statistical properties of energy levels of complex atomic nuclei [1]. Since then, it has proven to be very useful in a great variety of different fields [2,3].

In quantum chaos [4], RMT accurately accounts for the spectral statistics of systems whose classical counterpart is chaotic. While for quantum Hamiltonians which classical counterpart is integrable, the Berry-Tabor conjecture [5] states that their level statistics follows a Poisson law, Bohigas, Giannoni, and Schmit conjectured [6] that the case of quantum Hamiltonians with chaotic classical dynamics must fall into one of the three classical ensembles of RMT. These three ensembles correspond to Hermitian random matrices whose entries are independently distributed, respectively, as real (GOE), complex (GUE), or quaternionic (GSE) random variables (see Ref. [2] for details).

Universality of RMT means that random matrix ensembles describe energy levels of real systems at a statistical level, and only in a local energy window when the mean level density is set to unity. Different models may and do have very different level densities and to compare usual spectral correlation functions like the nearest-neighbor spacing distribution one has to perform a transformation called unfolding [1,2]. The unfolding procedure consists of changing variables from the true levels, e_n , to new ones, $\tilde{e}_n = \tilde{\mathcal{N}}(e_n)$, where $\tilde{\mathcal{N}}(e)$ is the mean number of levels less than e , obtained either by smoothing over many realizations in the case of disordered systems, or by local smoothing over an energy window large compared to the level spacing, but small compared to variations of $\tilde{\mathcal{N}}(e)$. The unfolded spectrum has automatically a mean level spacing equal to one, and its statistical properties can thus be directly compared with those of RMT. When a functional form of $\tilde{\mathcal{N}}$ is known (as for billiards), or when large enough statistics is available, the unfolding is straightforward and easily implemented.

The situation is different for many-body problems, where $\tilde{\mathcal{N}}(e)$ increases as a stretched exponential function of energy [7] with, in general, unknown lower-order terms, and where it is difficult to calculate a large number of realizations because of an exponential increase of the Hilbert space dimension with the number of particles. In order to circumvent these difficulties which greatly diminish the precision of statistical tests in systems with a large number of particles, Oganessian and Huse [8] proposed a new quantity defined as follows. Let e_n be an ordered set of energy levels and $s_n = e_{n+1} - e_n$ the nearest-neighbor spacings. Oganessian and Huse considered the distribution of the ratios $\tilde{r}_n$ defined by

$$\tilde{r}_n = \frac{\min(s_n, s_{n-1})}{\max(s_n, s_{n-1})} = \min\left(r_n, \frac{1}{r_n}\right), \quad (1)$$

where

$$r_n = \frac{s_n}{s_{n-1}}. \quad (2)$$

This quantity has the advantage that it requires no unfolding since ratios of consecutive level spacings are independent of the local density of states. Such a distribution thus allows a more transparent comparison with experiments than the traditional level spacing distribution. For this reason, many recent works use this quantity in different contexts of many-body systems. As an example let us mention quantum quenches, where the tools of RMT and quantum chaos were used as a phenomenological approach to quantify the distance from integrability on finite size lattices [9–11], and also to investigate numerically many-body localization [8,12]. In these papers the distribution of consecutive level spacing ratios $P(\tilde{r})$ was shown to yield more precise results than the usual spacing distribution $P(s)$.

Although the distribution $P(r)$ plays a more and more important role in the interpretation of numerical data in quantum many-body Hamiltonians, only numerical estimates of it exist, and they are restricted to the GOE

ensemble. RMT predictions for $P(r)$ are lacking. Such predictions are essential, both for understanding its shape for the three RMT ensembles, and for providing accurate estimates with simple formulas that could be used as an efficient tool.

This Letter fills this gap by providing several important results on $P(r)$. First, we compute Wigner-like surmises for all three classical RMT ensembles, which already provide simple analytical formulas in very good agreement with exact numerics and analytical expressions in the large matrix size limit. Second, the remaining small differences are shown to be well fitted to numerical precision by a rather simple polynomial expansion. Results are then applied to examples on a quantum many-body Hamiltonian and to zeros of the Riemann zeta function.

The ratio of consecutive level spacings distribution.—Instead of the quantity (1), we find it more natural to consider directly the ratio of two consecutive level spacings (2) and its probability distribution $P(r)$. Indeed, let $\rho(e_1, e_2, e_3)$ be the probability density of three consecutive levels with $e_1 \leq e_2 \leq e_3$. Assuming translation invariance, $\rho(e_1, e_2, e_3) = P(s_1, s_2)$ where $s_i = e_{i+1} - e_i$. Then,

$$\begin{aligned} P(r) &\equiv \int P(s_1, s_2) \delta\left(r - \frac{s_1}{s_2}\right) ds_1 ds_2 \\ &= \int_0^\infty P(rs_2, s_2) s_2 ds_2. \end{aligned} \quad (3)$$

It is physically natural and can be proved analytically that for all classical RMT ensembles in the bulk of the spectrum (as well as for Poisson variables) the function $P(s_1, s_2)$ is symmetric, that is, $P(s_1, s_2) = P(s_2, s_1)$. This left-right symmetry implies then that the distributions of r_n and $1/r_n$ are the same, so that $P(r)$ satisfies the following functional equation

$$P(r) = \frac{1}{r^2} P\left(\frac{1}{r}\right). \quad (4)$$

Whenever (4) holds, it is equivalent to consider the whole distribution $P(r)$ or to restrict the study to the support $[0, 1]$ by considering the variable $\tilde{r}$ defined in (1), as was done in Ref. [8]. Here we concentrate on the whole distribution $P(r)$; since $P(\tilde{r}) = 2P(r)\Theta(1-r)$, our results can easily be translated to the restricted distribution. The integrable (Poisson) case trivially yields $P(r) = 1/(1+r)^2$. We now address the behavior of $P(r)$ for RMT ensembles.

Wigner-like surmise.—For Gaussian ensembles, the joint probability distribution of N eigenvalues e_i is given by [2]

$$\rho(e_1, \dots, e_N) = C_{\beta, N} \prod_{1 \leq i < j \leq N} |e_i - e_j|^\beta \prod_{i=1}^N e^{-e_i^2/2}, \quad (5)$$

where $C_{\beta, N}$ is a known normalization constant and β is the Dyson index equal to 1 (GOE), 2 (GUE), or 4 (GSE). The exact calculation of $P(r)$ via Eq. (3) requires the

calculation of $P(s_1, s_2)$. Though this calculation is possible from (5) (as shown at the end of this Letter), it ultimately requires the use of numerical methods and is not transparent. Exactly the same problem appears in the calculation of the usual nearest-neighbor spacing distribution, $P(s)$, which is the probability that the distance between two consecutive levels is s . Rather than cumbersome exact calculations, Wigner derived a simple approximate expression for $P(s)$,

$$P_W(s) = a_\beta s^\beta e^{-b_\beta s^2}, \quad (6)$$

with some explicitly known normalization constants a_β and b_β [2]. This formula, called the Wigner surmise, corresponds to the exact result for 2×2 matrices, and is in very good agreement with the exact large- N expressions [13].

In a similar spirit, we obtain a formula for the ratio distribution of two consecutive spacings by performing the exact calculation for 3×3 matrices, starting from the joint distribution (5) for three eigenvalues e_1, e_2, e_3 . If for instance $e_1 \leq e_2 \leq e_3$, the ratio r is given by $(e_3 - e_2)/(e_2 - e_1)$. Consequently, the distribution $P(r)$ in the 3×3 case is proportional to

$$\int_{-\infty}^{\infty} de_2 \int_{-\infty}^{e_2} de_1 \int_{e_2}^{\infty} de_3 \rho(e_1, e_2, e_3) \delta\left(r - \frac{e_3 - e_2}{e_2 - e_1}\right).$$

After the change of variables $x = e_2 - e_1$, $y = e_3 - e_2$, the integration over e_2 is trivial and the remaining integrals read

$$\begin{aligned} &\iint_0^\infty dx dy \delta(rx - y) x^{\beta+1} y^\beta (x+y)^\beta \\ &\quad \times e^{-(1/2)(x^2+y^2) + (1/6)(x-y)^2}. \end{aligned}$$

After performing the integrals, the surmise takes the simple form

TABLE I. Values of useful constants and averages $\langle r \rangle$ and $\langle \tilde{r} \rangle$. Averages $\langle \cdot \rangle_W$ are calculated from Eq. (7), and $\langle \cdot \rangle_{\text{fit}}$ from data in Fig. 1.

Ensembles	Poisson	GOE	GUE	GSE
Z_β	$\dots$	$\frac{8}{27}$	$\frac{4}{81} \frac{\pi}{\sqrt{3}}$	$\frac{4}{729} \frac{\pi}{\sqrt{3}}$
c_β	$\dots$	$2 \frac{\pi-2}{4-\pi}$	$4 \frac{4-\pi}{3\pi-8}$	$8 \frac{32-9\pi}{45\pi-128}$
C	$\dots$	0.233378	0.578846	3.60123
$\langle r \rangle_W$	∞	$\frac{7}{4}$	$\frac{27}{8} \frac{\sqrt{3}}{\pi} - \frac{1}{2}$	$\frac{243}{80} \frac{\sqrt{3}}{\pi} - \frac{1}{2}$
		$= 1.75$	≈ 1.360735	≈ 1.174661
$\langle r \rangle_{\text{fit}}$	$\dots$	1.7781(1)	1.3684(1)	1.1769(1)
$\langle \tilde{r} \rangle_W$	$2 \ln 2 - 1$	$4 - 2\sqrt{3}$	$2 \frac{\sqrt{3}}{\pi} - \frac{1}{2}$	$\frac{32}{15} \frac{\sqrt{3}}{\pi} - \frac{1}{2}$
	≈ 0.38629	≈ 0.53590	≈ 0.60266	≈ 0.67617
$\langle \tilde{r} \rangle_{\text{fit}}$	$\dots$	0.5307(1)	0.5996(1)	0.6744(1)

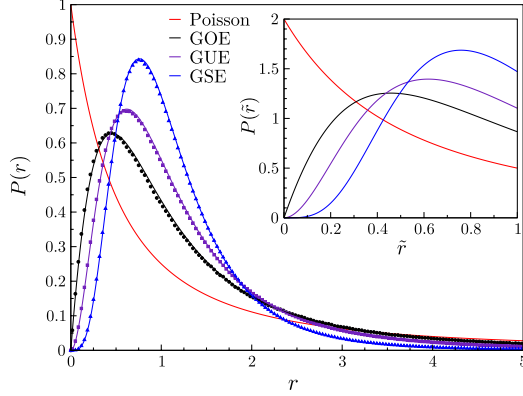


FIG. 1 (color online). Distribution of the ratio of consecutive level spacings $P(r)$ for Poisson and RMT ensembles: full lines are the surmise Eq. (7), points are numerical results obtained by diagonalizing matrices of size $N = 1000$ with Gaussian distributed entries, averaged over 10^5 histograms. Inset: the distribution $P(\tilde{r})$.

$$P_W(r) = \frac{1}{Z_\beta} \frac{(r + r^2)^\beta}{(1 + r + r^2)^{1+(3/2)\beta}}, \quad (7)$$

with Z_β the normalization constant (see values in Table I).

One can check that this result satisfies the symmetry (4). The distribution $P_W(r)$ has the same level repulsion at small r than $P(s)$, namely, $P_W(r) \sim r^\beta$, while for large r the asymptotic behavior is $P_W(r) \sim r^{-(2+\beta)}$, contrary to the fast exponential decay of $P(s)$. This surmise also yields an analytic expression for the mean values $\langle r \rangle_W$ and $\langle \tilde{r} \rangle_W$ widely used in the literature as a measure of chaoticity (see Table I for the exact values).

Comparison with numerics and polynomial fit.—We now investigate the accuracy of the surmise (7) with respect to numerical calculations for large matrix sizes. As illustrated in Fig. 1, the surmise is almost indistinguishable from numerics and can thus be used for practical

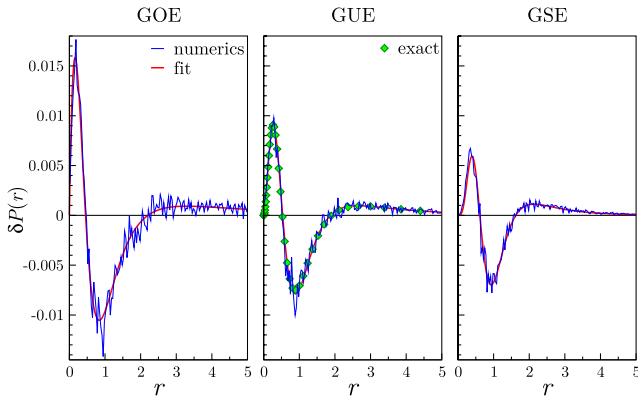


FIG. 2 (color online). Difference $\delta P(r) = P_{\text{num}}(r) - P_W(r)$ between the numerics and the surmise (7), with the same data as in Fig. 1. The fit function is given by Eq. (8). Green diamonds are results of exact calculations obtained from (9) for GUE.

purposes as a reference to discriminate between regular and chaotic dynamics. The absolute difference $\delta P(r) = P_{\text{num}}(r) - P_W(r)$ between numerics and the surmise (7) is plotted in Fig. 2 for the three ensembles, and has a maximum relative deviation of about 5%, similar to the Wigner surmise for $P(s)$ [13].

In order to go beyond the surmise (7), we propose a simple expression which perfectly fits this remaining difference $\delta P(r)$ within our computational accuracy. In order to fulfill Eq. (4), and assuming that $P(r)$ for large N and $P_W(r)$ have the same asymptotic behavior for small and large r , a reasonable ansatz is the following expansion

$$\delta P_{\text{fit}}(r) = \frac{C}{(1+r)^2} \left[\left(r + \frac{1}{r} \right)^{-\beta} - c_\beta \left(r + \frac{1}{r} \right)^{-(\beta+1)} \right], \quad (8)$$

where c_β is easily calculated from the normalization condition $\int_0^\infty \delta P(r) dr = 0$ (see Table I for the exact value). Thus the large- N expression for $P(r)$ can be fitted by the expression $P(r) = P_W(r) + \delta P_{\text{fit}}(r)$ with only one fitting parameter, which is the overall magnitude C of the discrepancy. The best fit C can be found in Table I. The corresponding curves are shown in Fig. 2. Thanks to these very good fits, one can quickly infer accurate predictions for $\langle r \rangle$ and $\langle \tilde{r} \rangle$ and any average weighted by $P(r)$ (see Table I).

Large- N calculation.—We now turn to the exact calculation of $P(r)$ for GUE (i.e., $\beta = 2$) in the limit $N \rightarrow \infty$, following a path similar to the derivation of the exact level spacing distribution $P(s)$.

Our starting point is Eq. 5.4.29 of Ref. [2]. From that equation, one can check that the probability $p(-t, y, t)$ of having three consecutive levels at points $-t, y, t$ can be rewritten as

$$p(-t, y, t) = \det(1 - K) \det[R(x, z)_{x,z=-t,y,t}], \quad (9)$$

where $R(x, y)$ is the resolvent kernel, i.e., the kernel of the operator $(1 - K)^{-1}K$, and $\det(1 - K)$ is the Fredholm determinant of K . Operator K is an integral operator whose action is defined as

$$(Kf)(x) = \int_{-t}^t K(x, y) f(y) dy \quad (10)$$

with the kernel

$$K(x, y) = \frac{\sin \pi(x - y)}{\pi(x - y)}. \quad (11)$$

It is known (see, e.g., Ref. [14]) that for a kernel of this form the resolvent kernel can be written as

$$R(x, y) = \frac{Q(x)P(y) - Q(y)P(x)}{x - y}, \quad (12)$$

with functions $Q(x)$ and $P(x)$ obeying integral equations

$$\begin{aligned} Q(x) - \int_{-t}^t K(x, y)Q(y)dy &= \frac{\sin \pi x}{\pi}, \\ P(x) - \int_{-t}^t K(x, y)P(y)dy &= \cos \pi x. \end{aligned} \quad (13)$$

Function $Q(x)$ and $P(x)$ have many useful properties which allow us to relate the calculation of spectral statistics for standard RMT ensembles to solutions of Painlevé equations (see, e.g., Ref. [14] and references therein). Though this approach is elegant, it still requires numerical resolution of Painlevé equation for $\det(1 - K)$ with subsequent solutions of linear equations for $Q(x)$ and $P(x)$ whose coefficients are determined by that solution.

We find it simpler to use the direct method proposed in Ref. [15] for computing $\det(1 - K)$. It is based on a quadrature method for numerical evaluation of the integrals

$$\int_{-t}^t f(x)dx = \sum_{k=1}^m w_k f(x_k) \quad (14)$$

appearing in the definition (10) of the integral operator K . Such a discretization allows us to approximate the determinant of the integral operator as a finite $m \times m$ determinant

$$\det(1 - K) \approx \det[\delta_{jk} - K(x_j, x_k)w_k] \quad (15)$$

and functions $Q(x)$ and $P(x)$ defined in (13) can be obtained by solving a linear system of m equations. As noted in Ref. [15] the method quickly converges. The result is presented in Fig. 2, where the Clenshaw-Curtis method with up to 60 points of discretization has been used for the discretization (14). Figure 3 (left) shows how the numerical results converge to the analytic large- N calculation. As mentioned previously, the fit

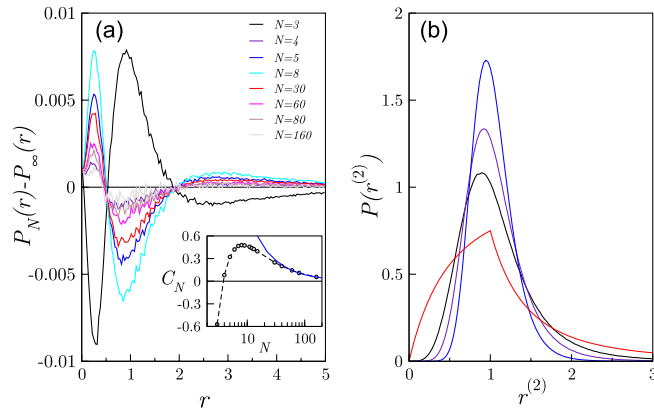


FIG. 3 (color online). (a) $P(r) - P_\infty(r)$ for GUE and various matrix sizes. Inset: constant C_N from the fit (8) as a function of matrix size N (solid line is a fit $1/N$). (b) Density distributions for the overlapping ratio $r_n^{(2)} = (e_{n+2} - e_n)/(e_{n+1} - e_{n-1})$ for Poisson variables and for the three classical RMT ensembles (same color code as in Fig. 1). In the Poisson case it is given by $P(r^{(2)}) = r^{(2)}(r^{(2)} + 2)/(1 + r^{(2)})^2$ for $0 \leq r \leq 1$, and obtained from (4) for $r \geq 1$.

$P(r) = P_W(r) + \delta P_{\text{fit}}(r)$ works well for all N , with an overall N -dependent constant C_N in (8). This constant, which gives the amplitude of the departure from the Wigner-like surmise, asymptotically decreases as $1/N$ (see inset of Fig. 3).

Applications.—To illustrate the above formalism, we investigate the spectral properties of a quantum Ising chain of L spins-1/2 with periodic boundary conditions in transverse field λ and longitudinal field α . The Hamiltonian is given by

$$\hat{H} = - \sum_{n=1}^L (\hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x + \lambda \hat{\sigma}_n^z + \alpha \hat{\sigma}_n^x), \quad \hat{\sigma}_{L+1}^x = \hat{\sigma}_1^x, \quad (16)$$

where $\hat{\sigma}_n^{x,z}$ are the Pauli matrices at site n . This model recently attracted attention due to its experimental realization in cobalt niobate ferromagnet [16]. The Hamiltonian (16) commutes with the operator $\hat{T}$ which translates the state by one lattice spacing and obeys $\hat{T}^L = 1$. Consequently, $\hat{H}$ takes a block diagonal form in the basis of eigenstates of $\hat{T}$, and one has to consider separately each sector of symmetry. The result for one sector is illustrated in Fig. 4. Other symmetry sectors give similar results. As expected, $P(r)$ agrees well with the GOE prediction (7) with $\beta = 1$.

Another example of application is to look at nontrivial zeros of the Riemann zeta function

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}. \quad (17)$$

It is well established that statistical properties of Riemann zeros are well described by the GUE distribution [17].

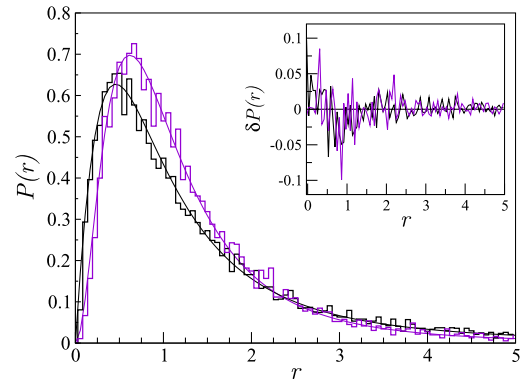


FIG. 4 (color online). Histogram of the ratio of consecutive level spacings $P(r)$. Black: Quantum Ising model in fields $\lambda = \alpha = 0.5$ in sector of eigenvectors of $\hat{T}$ with eigenvalue ω_3 [$\omega_j = \exp(2i\pi j/L)$, $j = 0, 1, \dots, L-1$], for $L = 18$ spins (dimension of eigenspace = 14541). Violet: The same for zeros of Riemann zeta function up the critical line (10^4 levels starting from the 10^{22} th zero, taken from Ref. [18]). Full lines correspond to the Wigner-like surmise Eq. (7) with, respectively, $\beta = 1$ and $\beta = 2$. Inset: Difference between the numerics and these surmises.

The probability distribution of the ratio of two consecutive spacings of these zeros, presented in Fig. 4, is in a perfect agreement with GUE formula (7) with $\beta = 2$.

Conclusion.—The investigation of spectral statistics in many-body problems with a large number of particles attracted wide attention in recent years. The absence of a well-established expression for the mean density of states greatly diminishes the usefulness of standard correlation functions such as the nearest-neighbor spacing distribution. To avoid this problem, a new statistical tool has been proposed in Ref. [8], namely, the distribution of the ratio of two consecutive level spacings.

The main result of the Letter is the derivation of simple approximative formulas for this distribution for classical RMT ensembles. The resulting Wigner-like surmises agree very well with direct numerical calculations. The difference between the surmise and the exact calculations is small and can be fitted by a one-parameter polynomial formula with excellent accuracy.

In the same spirit, several different ratios can be introduced which generalize the quantity (2). Analytic expressions and Wigner-like surmises can be derived in a similar way for the density distributions of these quantities, and will be discussed elsewhere. An example is given in Fig. 3, (right). All these distributions are universal in the sense that they apply without any unfolding or renormalization to spectra ranging from many-body systems to the Riemann zeta function.

Y. Y. A. was supported by the CFM Foundation. G. R. acknowledges support from Grant No. ANR-2011-BS04-012-01 QuDec.

-
- [1] C. E. Porter, *Statistical Theories of Spectra: Fluctuations* (Academic Press, New York, 1965).
 - [2] M. L. Mehta, *Random Matrix Theory* (Springer, New York, 1990).

- [3] G. Akemann, J. Baik, and P. Di Francesco, *The Oxford Handbook of Random Matrix Theory* (Oxford University Press, New York, 2011).
- [4] T. A. Brody, J. Flores, J. French, P. Mello, A. Pandey, and S. Wong, *Rev. Mod. Phys.* **53**, 385 (1981); T. Guhr, A. Müller-Groeling, and H. A. Weidenmüller, *Phys. Rep.* **299**, 189 (1998).
- [5] M. Berry and M. Tabor, *Proc. R. Soc. A* **356**, 375 (1977).
- [6] O. Bohigas, M.-J. Giannoni, and C. Schmit, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1 (1984).
- [7] H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **50**, 332 (1936).
- [8] V. Oganessian and D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **75**, 155111 (2007).
- [9] C. Kollath, G. Roux, G. Biroli, and A. M. Läuchli, *J. Stat. Mech.* (2010) P08011.
- [10] M. Rigol and L. F. Santos, *Phys. Rev. A* **82**, 011604 (2010); L. F. Santos and M. Rigol, *Phys. Rev. E* **82**, 031130 (2010); **81**, 036206 (2010).
- [11] M. Collura, H. Aufderheide, G. Roux, and D. Karevski, *Phys. Rev. A* **86**, 013615 (2012).
- [12] V. Oganessian, A. Pal, and D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **80**, 115104 (2009); A. Pal and D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **82**, 174411 (2010); E. Cuevas, M. Feigel'man, L. Ioffe, and M. Mézard, *Nat. Commun.* **3**, 1128 (2012); G. Biroli, A. C. Ribeiro-Teixeira, M. Tarzia, [arXiv:1211.7334](https://arxiv.org/abs/1211.7334); S. Iyer, V. Oganessian, G. Refael, and D. A. Huse, [arXiv:1212.4159](https://arxiv.org/abs/1212.4159).
- [13] B. Dietz and F. Haake, *Z. Phys. B* **80**, 153 (1990).
- [14] C. A. Tracy and H. Widom, in *Introduction to Random Matrices*, edited by G. F. Helminck, Geometric and Quantum Aspects of Integrable Systems Vol. 424 (Springer, Berlin, Heidelberg, 1993), p. 103.
- [15] F. Bornemann, *Math. Comput.* **79**, 871 (2010).
- [16] R. Coldea, D. A. Tennant, E. M. Wheeler, E. Wawrzynska, D. Prabhakaran, M. Telling, K. Habicht, P. Smeibidl, and K. Kiefer, *Science* **327**, 177 (2010).
- [17] H. L. Montgomery, *Proc. Symp. Pure Math.* **24**, 181 (1973); E. B. Bogomolny and J. P. Keating, *Nonlinearity* **8**, 1115 (1995); **9**, 911 (1995); Z. Rudnick and P. Sarnak, *Duke Math. J.* **81**, 269 (1996); J. P. Keating and N. C. Snaith, *Commun. Math. Phys.* **214**, 57 (2000).
- [18] A. Odlyzko, www.dtc.umn.edu/~odlyzko/.

MULTIFRACTALITÉ DANS LES CHAINES DE SPINS QUANTIQUES

*Une maison, deux êtres, un esprit : voilà le bonheur.
Une maison, deux êtres, deux esprits : voilà le malheur.*

Proverbe kurde

Sommaire

4.1	Introduction	142
4.1.1	Localisation d'Anderson	142
4.1.2	Localisation à plusieurs corps	144
4.2	Plan du chapitre	145
4.3	Cascade Binomiale	145
4.3.1	Dimension multifractale	146
4.4	Multifractalité dans les chaînes de spins	147
4.4.1	La dimension multifractale : une mesure de la localisation dans l'espace de Hilbert	148
4.4.2	Analogie thermodynamique	149
4.4.3	Approche numérique	150
4.5	Modèle d'Ising en champ transverse	152
4.5.1	Calcul des fonctions de corrélations à deux corps	153
4.5.2	Comportements limites	153
	Cas où $\lambda = 0$	153
	Cas où $\lambda \gg 1$	154
4.5.3	Probabilité ferromagnétique en champ λ quelconque	154
4.5.4	Dimension multifractale asymptotique $D_{+\infty}$	155
4.5.5	Dimension multifractale asymptotique $D_{-\infty}$	157
	Somme des dimensions multifractales asymptotiques	158
4.6	Le modèle XY	158
4.6.1	Transformation de Jordan-Wigner	158
4.6.2	Oscillation de parité	159
	Cas où deux pôles se trouvent à l'intérieur du cercle unité	161
4.6.3	Probabilité d'une configuration	163
	Probabilité de la configuration ferromagnétique	163
	Dimension multifractale asymptotique $D_{q \rightarrow +\infty}$	164
	Etat de Néel pour les petites valeurs de λ et matrice de Toeplitz par bloc	164
	Ba-ba sur les matrices de Toeplitz	165
	Fonction génératrice ϕ scalaire	165
	Fonction génératrice Φ matricielle	166
4.6.4	Champ factorisant du modèle XY sur la ligne critique	167

Expression exacte de la dimension multifractale en champ factorisant	169
4.7 Le modèle XXZ	170
4.7.1 Conjecture de Razumov-Stroganov	170
4.7.2 Dimensions multifractales asymptotiques	171
Dimension multifractale D_∞	171
Dimension multifractale $D_{-\infty}$	172
4.7.3 Dimension multifractale en $q = 1/2$	172
Résultats numériques	172
4.8 Le modèle XYZ	173
4.9 Conclusion et perspectives	173

4.1 Introduction

4.1.1 Localisation d'Anderson

Dans un métal, les électrons se déplacent sous l'effet d'un champ électrique extérieur et peuvent être diffusés par des imperfections telles que les lacunes ou les défauts dans la structure cristalline sous-jacente. La première approche quantitative de la conduction dans les métaux est due à Drude [Kit86]. Cette théorie purement classique est basée sur la notion de libre parcours moyen des électrons entre deux collisions dans le métal. Plus le libre parcours moyen est élevé, plus l'électron peut parcourir de longue distance avant d'être diffusé et la conductivité électrique est élevée. L'approche classique du mouvement des électrons permet déjà de se faire une idée sur l'importance des impuretés pour les propriétés de conduction dans les métaux. Expérimentalement, on observe que la conductivité électrique chute avec l'augmentation du degré de désordre dans les échantillons. Évidemment, une description plus correcte du problème nécessite de prendre en compte la nature quantique des électrons donnant lieu à des comportements plus riches et plus complexes. La nature ondulatoire de l'électron influe fortement sur les propriétés de transport puisque la partie diffusée de la fonction d'onde peut interférer (de manière constructive et/ou destructive) avec la partie non diffusée. Du point de vue quantique, l'électron est caractérisé par sa longueur d'onde thermique de de Broglie¹ qui permet de mesurer l'importance des effets quantiques. En comparant cette longueur caractéristique au libre parcours moyen (qui est l'autre longueur caractéristique du problème), on peut savoir si une description quantique s'impose ou si la théorie de Drude est suffisante pour la description des propriétés de transport. Pour les métaux usuels à température ambiante, le libre parcours moyen des électrons est de l'ordre de 100 nm tandis que la longueur d'onde de de Broglie est de l'ordre de 1 nm et une description "à la Drude" est généralement suffisante. Cependant, avec les techniques de refroidissement développées dans la deuxième moitié du 20^e siècle², une description incluant les effets quantiques est devenue indispensable.

Au niveau quantique, l'étude des effets des impuretés sur les propriétés de transport dans les cristaux imparfaits a été initiée par Philip W. Anderson en 1958 [And58]. En principe, plus un métal contient d'impuretés, plus le libre parcours moyen diminue et plus la conductivité baisse. On s'attend donc à une diminution progressive de la conductivité quand la quantité d'impureté augmente. Anderson suggère cependant que si on augmente trop le nombre d'impuretés, la conductivité peut s'annuler complètement. Le modèle considéré par Anderson est donné par [And59]

$$\hat{H} = \sum_i W_i |i\rangle \langle i| + \sum_{\langle i,j \rangle} V |i\rangle \langle j| \quad (4.1)$$

où $|i\rangle$ est une base d'état localisé au site i du réseau considéré, W_i correspond à l'énergie sur site et V décrit la propension qu'ont les électrons de passer du site i au site j (le symbole $\langle i,j \rangle$ indique la sommation sur les sites directement voisins). Le désordre est introduit en considérant les énergies sur sites W_i comme des variables aléatoires tirées suivant une loi de probabilité uniforme dans l'intervalle $[-W/2, W/2]$. Dans le cas unidimensionnel ($d = 1$) et bidimensionnel ($d = 2$), les fonctions d'onde sont localisées pour toutes les valeurs de W/V et pour toutes les énergies. On comprend assez facilement pourquoi la dimension de l'espace joue un rôle essentiel dans les propriétés de transports : plus elle est grande, plus l'électron a des possibilités de

1. La longueur d'onde de de Broglie pour une particule de masse m à la température T est donnée par $\lambda_{th} = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$ avec h la constante de Planck et k_B la constante de Boltzmann.

2. Pour obtenir des effets quantiques plus importants, il faut augmenter la longueur d'onde de de Broglie pour qu'elle devienne plus grande que le libre parcours moyen des électrons dans le métal. Ceci est possible en baissant la température ou en modifiant la relation de dispersion afin d'obtenir une masse effective pour les électrons plus petite.

chemins différents et moins les effets d'interférence quantique sont importants. En dimension $d = 1$, l'électron est confiné sur une droite et n'a que la gauche ou la droite comme choix possible de chemin de diffusion et les effets d'interférence finissent toujours par localiser l'électron. En dimension $d = 2$, l'électron se voit offrir plus de choix de chemins de diffusion possibles mais les effets quantiques sont toujours suffisants pour le localiser³. C'est en dimension $d = 3$ (et supérieure) que l'on observe une transition d'une phase délocalisée métallique vers une phase localisée isolante. Le paramètre conduisant la transition est le degré de désordre divisée par l'amplitude d'effet tunnel W/V . Pour $W/V \ll 1$, seuls quelques états sur les bords du spectre sont localisés et on a affaire à un métal. Par contre pour $W/V > 16.5$, tous les états sont localisés et on se retrouve dans une phase isolante. La transition d'Anderson est une transition de phase du second ordre : elle sépare des états délocalisés à faible désordre d'états localisés à fort désordre et on peut définir une longueur de localisation

$$\xi \propto |W - W_c|^{-\nu} \quad (4.2)$$

qui diverge lorsqu'on atteint le seuil de mobilité $W_c = 16.5$ et où ν est l'exposant critique de la transition. Nous renvoyons le lecteur à l'excellente revue par Janssen pour plus de détails [Jan98].

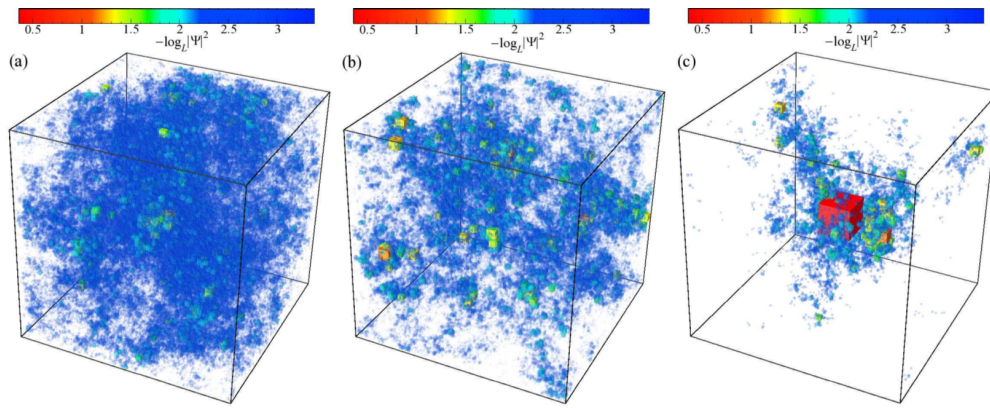


FIGURE 4.1 – Fonctions d'onde du modèle d'Anderson tridimensionnel sur un réseau cubique de taille $L^3 = 120^3$ dans le centre du spectre ($E = 0$). De gauche à droite : passage de la phase métallique à la phase isolante par augmentation du degré de désordre (le terme de *hopping* est pris égal à $V = 1$). (a) $W = 15$, (b) $W = W_c = 16.5$, (c) $W = 18$. Le code couleur est celui indiqué au-dessus de chaque figure et est relié à la valeur de $-\log_L |\psi_i|^2$. Figure tirée de [RVS11].

Sur la figure 4.1, nous présentons l'allure des fonctions d'onde $|\Psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle$ du modèle d'Anderson sur un réseau cubique de taille $L^3 = 120^3$ et dans le centre du spectre $E = 0$. Comme on peut le voir, dans la phase métallique la fonction d'onde s'étale de manière uniforme dans l'espace tandis que dans la phase isolante localisée, la fonction d'onde occupe uniquement une région sur une longueur typique ξ . À la transition $W = W_c = 16.5$, il ne semble pas se produire d'effets exceptionnels *de visu* : la fonction d'onde commence à s'accumuler dans certaines régions mais occupe tout de même une large partie de l'espace disponible.

Une approche plus quantitative consiste à étudier le comportement multifractal de la fonction d'onde. Divisons le système de volume L^d en petits cubes de volume l^d avec d la dimension de l'espace et définissons la mesure de probabilité dans chacun des petits cubes $\mathcal{C}_k$

$$\mu_k = \sum_{j \in \mathcal{C}_k} |\psi_j|^2. \quad (4.3)$$

Soit le moment d'ordre q de la fonction d'onde défini en sommant sur les boîtes k

$$P_q = \sum_k \mu_k^q. \quad (4.4)$$

3. Notons que ce résultat peut être relié (de manière non rigoureuse) à un résultat sur la probabilité $p(d)$ qu'une marche aléatoire sur un réseau d dimensionnel revienne à son point d'origine. En effet, on peut voir l'électron comme effectuant une marche aléatoire avant d'être diffusé par une impureté. Or, il existe un résultat dû à Pólya prouvant que $p(1) = p(2) = 1$ mais $p(d) < 1$ pour $d > 2$ [P6121]. L'électron revient donc à son point d'origine avec une probabilité 1 en dimension $d = 1$ et $d = 2$ entraînant ainsi sa localisation et de ce fait une annulation de la conductivité. En dimension $d > 2$, l'électron a des chances (si le degré de désordre n'est pas très élevé) de ne pas revenir à son point de départ donnant ainsi une conductivité non-nulle.

Il est bien connu que la fonction d'onde du modèle d'Anderson présente un comportement multifractal au point critique [EM00, Jan94, Aok83]. La multifractalité se reflète par le comportement d'échelle pour le moment d'ordre q au point critique

$$\langle P_q \rangle \sim \lambda^{\tau_q}, \quad \lambda \rightarrow 0 \quad (4.5)$$

où les crochets $\langle \dots \rangle$ indique une moyenne sur les réalisations du désordre et $\lambda = l/L$. L'ensemble des exposants τ_q sont des fonctions non linéaire de q et constituent le spectre multifractal. Afin de se faire une idée de la signification physique de cet ensemble d'exposants, il est convenable d'introduire la dimension multifractale D_q et l'exposant d'échelle anormal Δ_q reliés à τ_q par

$$\tau_q = D_q(q-1) = d(q-1) + \Delta_q. \quad (4.6)$$

Dans la phase métallique, la fonction d'onde s'étale de manière uniforme sur tout l'espace, i.e. $|\psi_i|^2 \sim L^{-d}$ et il est assez facile de voir que $\mu_k \rightarrow \lambda^d$. Il s'ensuit que le moment d'ordre q s'exprime comme $P_q \rightarrow \lambda^{d(q-1)}$ et la dimension multifractale tend vers la dimension physique du système $D_q \rightarrow d$. Dans la phase localisée isolante, pour une force de désordre assez élevée, les fonctions d'onde sont localisées et on a $\mu_k \rightarrow \delta_{k,k_0}$. De ce fait, le moment d'ordre q tend vers 1, $P_q \rightarrow 1$, de sorte que la dimension multifractale $D_q \rightarrow 0$. Pour des amplitudes de désordre intermédiaires, la dimension multifractale $D_q \in [0, d]$. D_q constitue un bon indicateur de l'étalement de la fonction d'onde dans l'espace. Au point critique, il a été montré que l'exposant d'échelle anormal satisfait la symétrie [MFME06, RVR08]

$$\Delta_q = \Delta_{q-1}. \quad (4.7)$$

Cette symétrie a aussi été observée au niveau expérimental pour la localisation d'ultrasons dans des réseaux désordonnés [FSP+09]. Des généralisations du modèle d'Anderson ont été introduits et étudiés. Par exemple, on peut considérer des modèles dont le Hamiltonien présente une structure en bande [MFD+96] (ce qui revient à prendre en compte les interactions au-delà du premier voisin) ou considérer des réseaux présentant une structure plus complexe [FOR09, BRTT12]. Le mécanisme de la transition d'Anderson est universel, c'est-à-dire indépendant des détails microscopiques du modèle, de sorte que beaucoup de ces modèles se comportent comme le modèle originel d'Anderson avec une phase délocalisée pour les faibles valeurs d'amplitude de désordre et une phase localisée pour les fortes valeurs de désordre.

4.1.2 Localisation à plusieurs corps

L'étude des opérateurs de Schrödinger aléatoires dont le modèle d'Anderson n'est qu'un exemple, connaît une étude théorique effervescente depuis la fin des années 60. Cependant, ces modèles sont à une seule particule et qui plus est, sans interactions. Les physiciens ont donc commencé à se demander quel pouvait être l'impact des interactions entre électrons sur les propriétés de localisation. En d'autres termes, le phénomène de localisation est-il un phénomène robuste? Il est connu depuis Mott que les interactions non élastiques entre phonons et électrons peuvent engendrer le mécanisme dit de saut de conductivité (*hopping conductivity*), entraînant une conductivité finie (qui peut être très petite) à toute température, même quand les états individuels électroniques sont tous localisés [Mot69]. En utilisant une théorie de perturbation, Basko, Aleiner et Altshuler ont récemment montré que l'interaction électron-électron ne peut pas produire d'effet similaire à moins que la température dépasse une certaine valeur critique. Une transition de phase métal-isolant se produit à cette température qui peut être vue comme une transition de phase d'Anderson entre une phase localisée-délocalisée d'états à plusieurs corps dans l'espace de Fock [BAA06].

Le concept de localisation dans un espace abstrait (l'espace de Hilbert) autre que l'espace réel provoque un regain d'intérêt de nos jours. Il est clair qu'il existe un lien entre les propriétés de localisation et la notion d'ergodicité dans les systèmes quantiques à plusieurs corps et la question de savoir comment un système quantique isolé atteint l'équilibre thermique à partir de conditions initiales génériques est une question ouverte. Pour les systèmes Hamiltonien classiques, la dynamique est complètement déterministe et la mesure au temps t d'une observable pour un ensemble de conditions initiales données ne présentera pas de fluctuations. Les fluctuations sont retrouvées par une moyenne sur les conditions initiales ou une moyenne temporelle. Par contre, les fluctuations sont présentes par nature dans le cas quantique du fait du principe d'incertitude. Il s'ensuit qu'une série de mesures d'une observable génère une distribution de résultats possibles. L'état dans lequel est mesuré cette observable est dit thermal si la distribution obtenue coïncide avec la distribution de Gibbs [Sre94, Deu91].

Dans la phase délocalisée, les niveaux d'énergie sont décrits par la prédiction des matrices aléatoires et la statistique des niveaux correspond généralement au résultat pour l'ensemble gaussien invariant (GOE). La statistique des niveaux est poissonienne dans la phase localisée puisque les fonctions d'onde correspondant à

des énergies très proche l'une de l'autre sont exponentiellement localisées et ont un recouvrement nul. Il semble donc exister une relation générale entre la nature de la statistique des niveaux d'énergie (GOE/Poisson), les propriétés de localisation (délocalisé /localisé) et l'ergodicité (ergodique/peu ergodique) du système à plusieurs particules en considération bien que certains résultats récents montrent un comportement plus riche [BRTT12]. Intuitivement, on s'attend donc à une thermalisation des observables locales dans la phase délocalisée ergodique. L'hypothèse de thermalisation des états propres (ETH, *Eigenstate Thermalization Hypothesis*) stipule que la valeur moyenne d'une observable locale prise sur des états propres d'énergies compris dans la fenêtre ΔE autour de E s'identifie à la moyenne microcanonique à l'énergie E . Cette hypothèse est généralement vérifiée dans la phase délocalisée ergodique pour les états excités mais ne l'est pas dans la phase localisée [AASA96]. L'état fondamental de par son statut et sa structure ne vérifie pas l'ETH mais possède des propriétés très riches. Le but de ce chapitre est d'étudier la structure de l'état fondamental de modèles de chaînes de spins par le biais du formalisme multifractal.

4.2 Plan du chapitre

Le formalisme multifractal permet de caractériser les structures irrégulières apparaissant dans bon nombre de problèmes, que ce soit en physique (comme par exemple avec le modèle d'Anderson 3D au point critique que nous venons de voir), en mathématique [Man83, HJK⁺86] ou en chimie [SM88]. En guise d'introduction au formalisme multifractal, nous commencerons par présenter le modèle de la cascade binomiale : ce modèle extrêmement simple nous permettra de rencontrer et prendre en main les différentes notions qui seront utilisées tout le long de ce chapitre. Nous nous intéresserons ensuite à différents modèles de chaînes de spins pour lesquels il est possible d'obtenir des résultats analytiques sur la dimension multifractale. En particulier, nous regarderons le modèle d'Ising en champ transverse pour lequel il est possible d'obtenir les coefficients du développement de l'état fondamental sur la base des états propres de σ^z en terme d'un déterminant [LSM61]. Nous verrons comment les dimensions multifractales peuvent permettre de détecter une transition de phase quantique. Nous nous tournerons ensuite vers le modèle XY qui est aussi diagonalisable par la transformation de Jordan-Wigner. Il existe pour ce modèle un ensemble de valeurs de paramètres, ie la ligne critique, pour lesquels les coefficients du développement de l'état fondamental peuvent s'obtenir en utilisant la cascade binomiale. Ce résultat constitue une preuve rigoureuse de la nature multifractale de l'état fondamental. D'autres modèles tels que le modèle XYZ ou encore le modèle XXZ sont intégrables par l'ansatz de Bethe [Bet31, Bax07, YY66, Orb58], mais la forme des coefficients du développement de la fonction d'onde fondamentale est très compliquée et n'est pas exploitable en pratique. Cependant, il existe des valeurs de paramètres dans ces modèles pour lesquels les coefficients du développement du fondamental prennent une forme relativement simple en relation avec des problèmes combinatoires. Se basant sur des résultats numériques, Razumov et Stroganov ont mis en évidence le lien entre les coefficients du développement de la fonction d'onde fondamentale pour le modèle XXZ au point combinatoire $\Delta = -\frac{1}{2}$ et les nombres A_n qui comptent le nombre de matrices à signe alterné [RS01, Str01]. La preuve de cette conjecture a été apportée très récemment [CS11] et est basée sur des arguments combinatoires. Nous utiliserons ces résultats au moment où nous étudierons le modèle XXZ . Enfin, nous conclurons ce chapitre en présentant quelques résultats sur les états excités des chaînes de spins quantiques.

4.3 Cascade Binomiale

La cascade binomiale est le modèle le plus simple de processus multiplicatif générant une mesure multifractale. La première étape de la cascade multiplicative consiste à diviser l'intervalle unité en deux intervalles de longueurs égales et à associer à l'intervalle $[0, 1/2]$, la masse m_0 et à l'intervalle $[1/2, 1]$, la masse m_1 . Les deux paramètres m_0 et m_1 sont choisis tels que $m_0 + m_1 = 1$ (on peut par exemple choisir $m_0 = \cos^2 \theta$ et $m_1 = \sin^2 \theta$). À l'étape suivante de l'itération, on applique la même procédure aux deux intervalles créés précédemment pour obtenir quatre nouveaux intervalles auxquels sont associés les mesures (poids) suivantes

$$\begin{aligned} \mu_2([0, 1/4]) &= m_0 m_0, & \mu_2([1/4, 1/2]) &= m_0 m_1, \\ \mu_2([1/2, 3/4]) &= m_1 m_0, & \mu_2([3/4, 1]) &= m_1 m_1. \end{aligned}$$

Après N itérations, on se retrouve avec $M = 2^N$ intervalles de la forme

$$\left[\frac{k}{2^N}, \frac{k+1}{2^N} \right], \quad k = 0, 1, \dots, 2^N - 1. \quad (4.8)$$

Le processus peut être visualisé à travers un arbre binaire : chaque noeud de l'arbre se subdivise en deux branches, la branche de gauche se voit attribuée la masse m_0 et celle de droite la masse m_1 (voir figure 4.2). À l'étape N , il y a 2^N noeuds (sur la ligne N) et il existe une bijection entre les configurations de la chaîne de spins $|\vec{\sigma}\rangle = |\sigma_0\sigma_1\cdots\sigma_{N-1}\rangle$ et les chemins reliant le sommet de l'arbre aux noeuds de la ligne N . Un marcheur parti du sommet de l'arbre et arrivant à un noeud de la ligne $j < N$ peut prendre, soit la branche de gauche, auquel cas on lui associe la variable $\sigma_j = -1$, soit prendre la branche de droite à laquelle on associe la variable $\sigma_j = 1$. Il est facile de voir que la mesure associée à l'intervalle (4.8) est donnée par

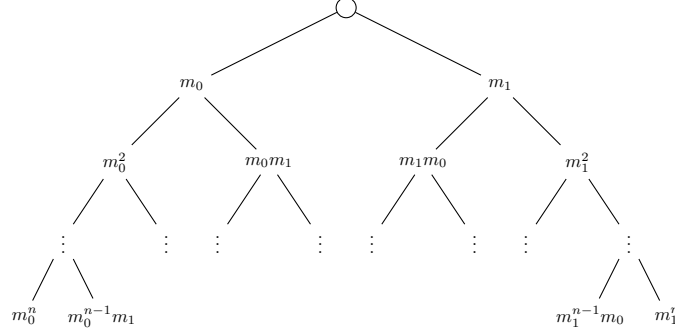


FIGURE 4.2 – Représentation de la cascade binomiale sous forme d'arbre binaire. Chaque noeud de l'arbre possède un poids dépendant du nombre de fois où une branche de gauche ou de droite a été empruntée à partir du sommet de l'arbre pour atteindre le noeud en question.

$$\mu_N \left(\left[\frac{k}{2^N}, \frac{k+1}{2^N} \right] \right) = p_{\vec{\sigma}} = m_0^{\phi(\vec{\sigma})} m_1^{N-\phi(\vec{\sigma})}, \quad (4.9)$$

où $\phi(\vec{\sigma})$ compte le nombre de -1 dans la configuration $|\vec{\sigma}\rangle$, ie le nombre de fois où le marcheur a tourné à gauche depuis le sommet de l'arbre pour atteindre le noeud associé à l'intervalle (4.8).

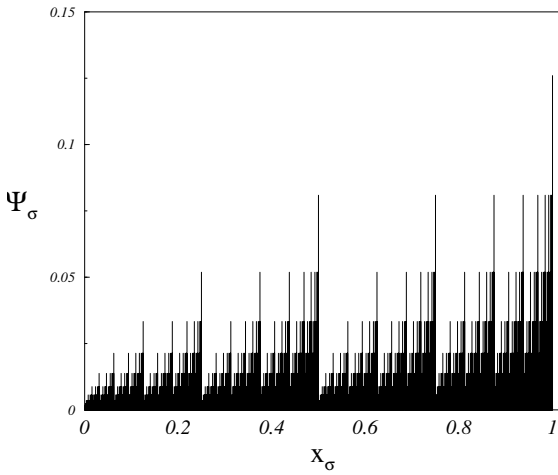


FIGURE 4.3 – Mesure binomiale après $N = 12$ itérations pour $m_0 = \cos^2 1 \simeq 0.292$ et $m_1 = \sin^2 1 \simeq 0.708$.

L'itération de cette procédure génère une séquence de mesures qui converge vers la mesure binomiale μ

$$\mu = \lim_{N \rightarrow \infty} \mu_N. \quad (4.10)$$

La figure 4.3 illustre les coefficients $\Psi_{\vec{\sigma}} \equiv \sqrt{p_{\vec{\sigma}}}$ obtenus après $N = 12$ itérations de la cascade binomiale pour $m_0 = \cos^2 1$. L'axe des abscisses est relié au codage binaire de la configuration $|\vec{\sigma}\rangle = |\sigma_0\sigma_1\cdots\sigma_{N-1}\rangle$

$$x_{\vec{\sigma}} = (2^N - 1)^{-1} \sum_{n=0}^N 2^{n-1} (1 + \sigma_n). \quad (4.11)$$

La somme sur une ligne de l'arbre donne 1 du fait de la conservation de la masse $m_0 + m_1 = 1$ et du théorème binomial, d'où le nom de la mesure.

4.3.1 Dimension multifractale

Soit $S_R(q, M)$ l'entropie de Rényi associée à une distribution de probabilité discrète $\{p_{\vec{\sigma}}\}$ [Ren61]

$$S_R(q, M) = -\frac{1}{q-1} \ln \left(\sum_{\{\vec{\sigma}\}} p_{\vec{\sigma}}^q \right). \quad (4.12)$$

Dans la limite $q \rightarrow 1$, l'entropie de Rényi redonne l'entropie de Von Neumann

$$S_{VN}(M) = \lim_{q \rightarrow 1} S_R(q, M) = - \sum_{\{\vec{\sigma}\}} p_{\vec{\sigma}} \ln p_{\vec{\sigma}}. \quad (4.13)$$

Les dimensions multifractales se déduisent du comportement asymptotique de l'entropie de Rényi

$$D_q = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{S_R(q, M)}{\ln M}. \quad (4.14)$$

Pour la mesure binomiale, les probabilités de configurations sont données par (4.9) de sorte que le moment d'ordre q de la distribution s'écrit

$$\sum_{\{\vec{\sigma}\}} p_{\vec{\sigma}}^q = \sum_{n=0}^N C_N^n m_0^{nq} m_1^{q(N-n)} = (m_0^q + m_1^q)^N \quad (4.15)$$

avec le coefficient C_N^n correspondant au nombre de manières d'arriver à un noeud de l'arbre en ayant emprunter n branches de gauche. Il s'ensuit que la dimension multifractale est donnée par

$$D_q = \frac{\ln(m_0^q + m_1^q)}{(1-q) \ln 2}. \quad (4.16)$$

En particulier, les valeurs asymptotiques des dimensions multifractales s'expriment comme

$$D_{\infty} = -\frac{\ln(\max(m_0, m_1))}{\ln 2}, \quad D_{-\infty} = -\frac{\ln(\min(m_0, m_1))}{\ln 2}. \quad (4.17)$$

La mesure binomiale est l'une des seules mesure pour laquelle il est possible d'obtenir l'expression exacte des dimensions multifractales. Leur allure est représentée sur la figure 4.4. Comme nous le verrons dans la suite, l'allure de ces fonctions sera la même dans le cas des chaînes de spins quantiques. En particulier, nous trouverons

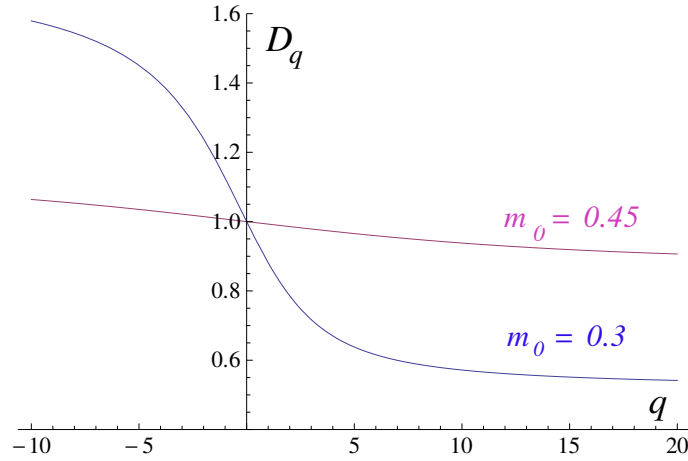


FIGURE 4.4 – Allure de la dimension multifractale pour le modèle de la cascade binomiale avec les masses $m_0 = 0.3$ (en bleu) et $m_0 = 0.45$ (en rouge).

que les coefficients du développement de la fonction d'onde fondamentale sur les états de configurations $|\vec{\sigma}\rangle$ pour le modèle XY s'obtiennent par une cascade binomiale sur la ligne critique.

4.4 Multifractalité dans les chaînes de spins

En mécanique quantique, les objets importants sont les énergies propres et les vecteurs propres. Au chapitre 2, nous avons étudié la manière d'obtenir le spectre en énergie du modèle d'Ising. Plusieurs méthodes de diagonalisation exacte ont été mises au point pour calculer les spectres des Hamiltoniens de spins [LSM61, Mat93, Bax07] mais le calcul des vecteurs propres reste une tâche beaucoup plus difficile pour ne pas dire

impossible. Récemment, les propriétés des vecteurs propres des chaînes de spins et de manière plus globale, celle des systèmes quantiques de N corps en interaction, ont attiré l'attention des physiciens, en particulier dans le domaine des trempes quantiques (*quantum quench*) et des systèmes quantiques hors équilibre (voir [Rou09, RDO08] et les références dans ces articles). Une trempe quantique consiste à préparer le système dans l'état propre $|\Psi^{(\lambda_1)}\rangle$ d'un Hamiltonien $H(\lambda_1)$ (où λ_1 est un paramètre apparaissant dans le Hamiltonien, le champ magnétique dans le cas du modèle d'Ising par exemple) et faire évoluer cet état avec le Hamiltonien $H(\lambda_2)$. L'état obtenu au temps t est alors donné par $|\Psi(t)\rangle = e^{iH(\lambda_2)t}|\Psi^{(\lambda_1)}\rangle$. La connaissance des vecteurs propres permet alors d'étudier l'évolution et la thermalisation d'observables $\mathcal{O}(t) = \langle \Psi(t) | \hat{\mathcal{O}} | \Psi(t) \rangle$ au temps t après le "quench" [CEF11, CC06]. Nous n'aborderons pas dans ce chapitre les protocoles de "quench".

Dans la base des états propres de l'opérateur $\hat{\sigma}^z$, une fonction propre $|\Psi\rangle$ de la chaîne de spins s'écrit comme une superposition d'états $|\vec{\sigma}\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{\vec{\sigma}\}} \psi_{\vec{\sigma}} |\vec{\sigma}\rangle, \quad (4.18)$$

où la somme est effectuée sur les $M = 2^N$ configurations possibles. De manière générale, les coefficients $\psi_{\vec{\sigma}}$ s'obtiennent par diagonalisation numérique de la matrice représentant le Hamiltonien et la structure des vecteurs propres n'est pas très bien comprise, même dans le cas des modèles simples tels que le modèle d'Ising (voir figure 4.5). Dans la suite, nous nous intéresserons uniquement au vecteur propre **fondamental** noté $|GS\rangle$ et essayerons

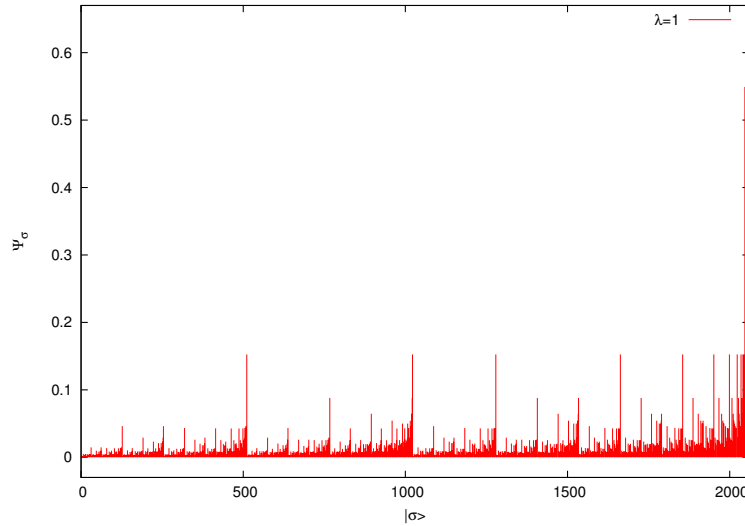


FIGURE 4.5 – Coefficients $\psi_{\vec{\sigma}}$ de l'état fondamental du modèle d'Ising pour $\lambda = 1$ et $N = 11$ spins. L'axe des abscisses correspond au codage binaire de la configuration $\vec{\sigma}$, $x_{\vec{\sigma}} = \sum_{n=0}^{N-1} 2^{n-1} (1 + \sigma_n)$.

d'en dégager les caractéristiques importantes. Les coefficients $\psi_{\vec{\sigma}}$ ont une signification physique toute simple, la grandeur

$$p_{\vec{\sigma}} = |\psi_{\vec{\sigma}}|^2, \quad (4.19)$$

est la probabilité d'observer la configuration $|\vec{\sigma}\rangle = |\sigma_0 \dots \sigma_{N-1}\rangle$ dans l'état fondamental $|GS\rangle$ de la chaîne de spins. L'expression des coefficients $\psi_{\vec{\sigma}}$ n'est pas connue dans la plupart des modèles de chaînes de spins et en pratique, on se contente généralement de résultats numériques.

4.4.1 La dimension multifractale : une mesure de la localisation dans l'espace de Hilbert

Les propriétés de localisation des fonctions d'ondes de composantes ψ_i , $i = 0, 1, \dots, M-1$, dans un espace de Hilbert de dimension $M = 2^N$ peuvent être analysées au moyen des moments P_q définis par

$$P_q = \sum_{i=0}^{M-1} |\psi_i|^{2q}. \quad (4.20)$$

Le comportement asymptotique de P_q dans la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$ est gouverné par un ensemble d'exposants multifractal τ_q définis par $P_q \propto M^{-\tau_q}$. On définit l'ensemble des dimensions multifractales par $D_q = \tau_q/(q-1)$.

Considérons l'état fondamental d'une chaîne de spins $|GS\rangle$ se décomposant ainsi sur la base des états de configurations $|i\rangle$ ⁴

$$|GS\rangle = \sum_{i=0}^{M-1} \psi_i |i\rangle. \quad (4.21)$$

Si $|GS\rangle$ est localisé dans l'espace de Hilbert alors $D_q = 0$ pour tout q positif. À l'inverse si l'état $|GS\rangle$ est délocalisé dans l'espace de Hilbert, la dimension multifractale s'identifie alors à la dimension du système $D^{\text{sys}} = d$. Ceci se comprend assez facilement comme suit. Dans le cas où l'état est localisé sur la configuration $|k\rangle$, ie $\psi_k \simeq 1$, on a

$$P_q \approx |\psi_k|^{2q} \rightarrow 1 \Leftrightarrow D_q = 0. \quad (4.22)$$

Dans la limite opposée où la fonction d'onde s'étale sur tout l'espace de Hilbert, on montre sans peine que

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{M}}, \quad i = 0, 1, \dots, M-1. \quad (4.23)$$

et le calcul du moment d'ordre q donne

$$P_q = M^{1-q} \Leftrightarrow D_q = 1. \quad (4.24)$$

Il est assez clair que pour une fonction d'onde qui est ni localisée ni délocalisée dans l'espace de Hilbert, on trouvera $D_q \in [0, d]$ (pour $q > 0$). Généralement D_q est une fonction non triviale de q , d'où l'appellation "dimension multifractale". D_q constitue un bon indicateur du degré de localisation d'une fonction d'onde dans l'espace de Hilbert.

4.4.2 Analogie thermodynamique

La fonction τ_q est donnée par le comportement asymptotique de l'entropie de Rényi

$$\tau_q = - \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{\ln M} \ln \left(\sum_{i=0}^{M-1} |\psi_i|^{2q} \right). \quad (4.25)$$

Pour obtenir une compréhension un peu plus physique des exposants multifractals τ_q , nous introduisons des "niveaux d'énergies" fictifs E_i et écrivons la probabilité de la configuration $|i\rangle$ sous la forme d'un poids de Boltzmann

$$p_i = |\psi_i|^2 = e^{-E_i}, \quad E_i = -\ln |\psi_i|^2 > 0. \quad (4.26)$$

Il s'ensuit que le moment d'ordre q (4.20) s'identifie à la fonction de partition Z_q d'un système avec les énergies E_i à la pseudo-température $1/q$

$$Z_q(M) = \sum_{i=0}^{M-1} e^{-qE_i} \quad (4.27)$$

Il vient alors que τ_q peut s'écrire comme l'énergie libre $F_q(M) = -1/q \ln Z_q(M)$ (à un facteur près) d'un système thermodynamique (hypothétique) à la pseudo-température $1/q$

$$\tau_q = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{qF_q(M)}{\ln M}. \quad (4.28)$$

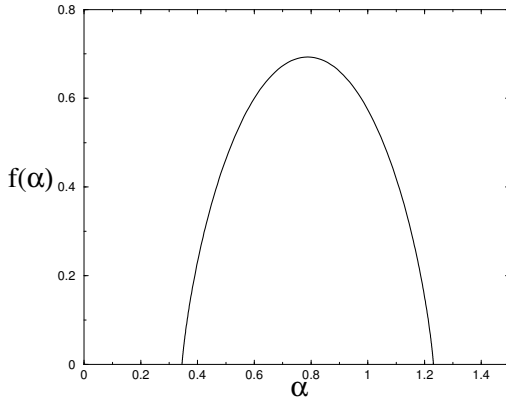
Tout comme dans le formalisme thermodynamique, on peut introduire la densité d'états des niveaux E_i reliée à l'entropie par

$$\rho(E) = e^{S(E)}, \quad (4.29)$$

de sorte que la fonction de partition (4.27) se réécrit comme une intégrale

$$Z_q = \int e^{S(E)-qE} dE. \quad (4.30)$$

4. On rappelle qu'il existe une bijection entre les états de configurations de la chaîne de spins et les nombres décimaux entre 0 et $2^N - 1$.



Dans la limite thermodynamique, il est naturel de supposer que l'entropie et l'énergie sont des fonctions extensives du nombre de particules N , c'est-à-dire que l'on peut écrire

$$S(E) = N f\left(\frac{E}{N}\right) \quad (4.31)$$

avec une certaine fonction $f(\alpha)$ appelée spectre de singularité (voir figure 4.6). L'intégrale peut alors être évaluée par la méthode du col et on a

$$Z_q \sim e^{-\ln M \tau(q)}, \quad \tau(q) = q\alpha - f(\alpha), \quad \alpha = \tau'(q). \quad (4.32)$$

FIGURE 4.6 – Allure du spectre de singularité $f(\alpha)$.

Les fonctions $f(\alpha)$ et $\tau(q)$ sont reliées l'une à l'autre par une transformation de Legendre. $\tau(q)$ joue le rôle d'une énergie libre tandis que $f(\alpha)$ correspond à l'entropie par spins. En pratique, il n'est pas nécessaire de faire allusion aux quantités thermodynamiques mais celles-ci donnent une interprétation intuitive des quantités qui apparaissent dans le formalisme multifractal. L'analogie est résumée dans le tableau 4.1.

Formalisme thermodynamique	Formalisme multifractal
Fonction de partition à la température $1/\beta$ $Z_\beta = \sum_{\vec{\sigma}} e^{-\beta H(\vec{\sigma})}$	Moment d'ordre q de l'état fondamental $P_q = \sum_{\vec{\sigma}} e^{-q E_{\vec{\sigma}}}$
Énergie libre à la température $1/\beta$ $F_\beta = -\frac{1}{\beta} \ln Z_\beta$	Exposants multifractals à la température $1/q$ $F_q(M) = -\frac{1}{q} \ln P_q, \quad \tau_q = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{q F_q(M)}{\ln M}$
Entropie à la température $1/\beta$ $S_\beta \propto F_\beta - \beta \frac{\partial F_\beta}{\partial \beta}$	Spectre de singularité à la température $1/q$ $f(\alpha) = q \frac{\partial \tau(q)}{\partial q} - \tau(q), \quad \alpha = \tau'(q)$
Extensivité de l'énergie libre $F_\beta(N) = \zeta(\beta)N$	Comportement multifractal $F_q(M) = \tilde{\zeta}(q)N, \quad \tilde{\zeta}(q) = \ln 2 \left(\frac{1}{q} - 1 \right) D_q$

TABLE 4.1 – Analogie entre les quantités apparaissant dans les formalismes thermodynamique et multifractal.

4.4.3 Approche numérique

Nous décrivons ici la procédure qui permet d'obtenir l'évolution de la dimension multifractale en fonction de q .

1. La première étape consiste à obtenir numériquement les composantes du vecteur propre fondamental du modèle considéré. On peut pour cela procéder à une diagonalisation numérique exacte du Hamiltonien. Comme nous nous intéressons uniquement aux propriétés de l'état fondamental, on peut utiliser la méthode de Lanczos décrite au chapitre 1 permettant d'atteindre des tailles de chaînes de spins bien plus grandes que la diagonalisation exacte. Notons que le choix de la base dans laquelle nous diagonalisons est très important : un état propre peut être localisé dans une certaine base et être complètement délocalisé dans une autre base. Dans la suite, nous travaillerons dans la base des états propres de $\hat{\sigma}^z$, $|\vec{\sigma}\rangle = |\sigma_0 \sigma_1 \dots \sigma_{N-1}\rangle$ avec $\sigma_i = \pm 1$.
2. Une fois que les composantes ψ_i du vecteur propre fondamental sont obtenues, on peut calculer le moment d'ordre q donné par (4.20). Le calcul des moments d'ordre q positif ne posent pas de problème particulier. En revanche, pour les valeurs de $q < 0$, il faut faire attention car certaines composantes ψ_k sont égales à zéro (dû à l'existence de symétries) ce qui fait apparaître des divergences dans le calcul. Ces états de configurations de la chaîne ne doivent pas être pris en compte dans le calcul des moments.
3. Nous traçons ensuite le logarithme du moment d'ordre q , $\ln P_q$ en fonction du logarithme de la taille de l'espace de Hilbert $\ln M$. Les courbes obtenues sont généralement des droites (voir figure 4.7).

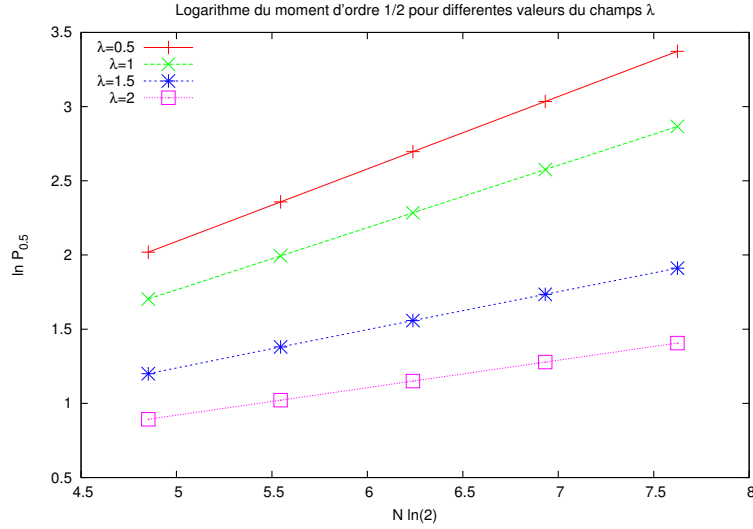


FIGURE 4.7 – Comportement linéaire du logarithme du moment d'ordre $q = 1/2$ de l'état fondamental du modèle d'Ising en champ transverse λ . Résultats obtenus par diagonalisation exacte de chaînes de taille $N = 7, 8, 9, 10, 11$ spins.

4. Les courbes obtenues sont ajustées avec la fonction

$$f(z) = a_0 + a_1 z + \frac{a_2}{z} + \frac{a_3}{z^2}, \quad (4.33)$$

avec $z = N \ln 2$. Les coefficients a_i dépendent évidemment de q . Le coefficient directeur des droites a_1 obtenues est égal à $D_q(1 - q)$. Cependant, comme nous le verrons dans la suite, il existe des modèles dans lesquels ce comportement doit être corrigé par un terme logarithmique (c'est le cas pour le modèle XXZ et XYZ par exemple).

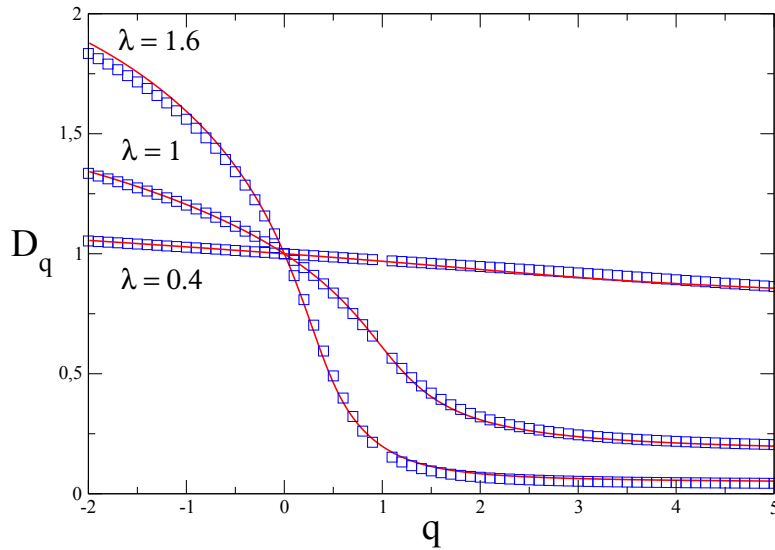


FIGURE 4.8 – Evolution de la dimension multifractale en fonction du paramètre q et pour différentes valeurs du champ transverse λ pour le modèle d'Ising. La courbe rouge a été obtenue par la méthode de Lanczos pour $N = 3 - 18$ spins tandis que les carrés bleus correspondent à la diagonalisation exacte de $N = 3 - 11$ spins.

5. Il est alors possible de tracer l'évolution de la dimension multifractale D_q en fonction de q pour différentes valeurs de λ . Les dimensions multifractales asymptotiques pour $q \rightarrow \pm\infty$ s'obtiennent par un ajustement sur la partie $|q| \gg 1$ par la fonction $D_{\pm\infty} + a/q + b/q^2$.

4.5 Modèle d'Ising en champ transverse

Comme nous l'avons vu au chapitre 2 et expliqué dans l'Annexe C, le modèle d'Ising en champ transverse

$$\hat{H} = - \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x - \lambda \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^z \quad (4.34)$$

est diagonalisable par la transformation de Jordan-Wigner suivi d'une rotation de Bogoliubov. Introduisons les opérateurs de projections $\hat{P}_n^\sigma$

$$\hat{P}_n^\sigma = \frac{1}{2} (1 + \sigma \hat{\sigma}_n^z), \quad \sigma = \pm 1 \quad (4.35)$$

Il n'est pas très difficile de se convaincre que la probabilité $p_{\vec{\sigma}} = |\psi_{\vec{\sigma}}|^2$ de la configuration $|\vec{\sigma}\rangle$ dans l'état fondamental $|GS\rangle$ est donnée par

$$p_{\vec{\sigma}} = p(|\sigma_0 \sigma_1 \dots \sigma_{N-1}\rangle) = \langle GS | \hat{P}_0^{\sigma_0} \hat{P}_1^{\sigma_1} \dots \hat{P}_{N-1}^{\sigma_{N-1}} | GS \rangle, \quad (4.36)$$

Notons par commodité d'écriture $\langle \dots \rangle = \langle GS | \dots | GS \rangle$. En utilisant (C.20), on peut exprimer les opérateurs de projection dans la représentation fermionique de Jordan-Wigner

$$P_n^\sigma = c_n^\dagger c_n, \quad (4.37)$$

avec $c_n^\dagger = a_n^\dagger$ si $\sigma = +1$ et $c_n^\dagger = a_n$ pour $\sigma = -1$. Il vient alors :

$$\begin{aligned} p_{\vec{\sigma}}^2 &= \left\langle c_0^\dagger c_0 c_1^\dagger c_1 \dots c_{N-1}^\dagger c_{N-1} \right\rangle^2, \\ &= \left\langle c_0^\dagger c_1^\dagger \dots c_{N-1}^\dagger c_0 c_1 \dots c_{N-1} \right\rangle^2. \end{aligned} \quad (4.38)$$

La raison pour laquelle nous calculons $p_{\vec{\sigma}}^2$ deviendra clair plus loin. Pour rendre les notations un peu plus claires, considérons à titre d'exemple, les probabilités des configurations $|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$ pour $N = 3$ spins. On a

$$p_{|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle}^2 = \left\langle a_0^\dagger a_1 a_2^\dagger a_0 a_1^\dagger a_2 \right\rangle^2 \quad \text{et} \quad p_{|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle}^2 = \left\langle a_0 a_1 a_2^\dagger a_0^\dagger a_1^\dagger a_2 \right\rangle^2. \quad (4.39)$$

Le calcul des $p_{\vec{\sigma}}$ fait intervenir des corrélateurs du type $\langle f_1 \dots f_{2n} \rangle$ où les f_j sont des combinaisons linéaires d'opérateurs de création et d'annihilation fermioniques (voir formule (C.87)). On a en utilisant le théorème de Wick [ZJ02, SMP10]

$$\langle f_1 \dots f_{2n} \rangle = \sum_{\substack{i_1 < \dots < i_n \\ \forall k, i_k < j_k}} \epsilon(\sigma) \langle f_{i_1} f_{j_1} \rangle \dots \langle f_{i_n} f_{j_n} \rangle = \text{Pf}(R), \quad (4.40)$$

où $\epsilon(\sigma)$ représente la signature de la permutation $(12 \dots 2n) \rightarrow (i_1 j_1 \dots i_n j_n)$. $\text{Pf}(R)$ est le Pfaffien de la matrice R antisymétrique donnée par :

$$R = \begin{pmatrix} 0 & \langle f_1 f_2 \rangle & \dots & \langle f_1 f_{2n} \rangle \\ -\langle f_1 f_2 \rangle & 0 & \dots & \langle f_2 f_{2n} \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\langle f_1 f_{2n} \rangle & -\langle f_2 f_{2n} \rangle & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

La raison pour laquelle nous calculons $p_{\vec{\sigma}}^2$ vient du fait que le Pfaffien vérifie la relation

$$\text{Pf}(R)^2 = \det R \quad (4.41)$$

Dans notre cas, la matrice R est de taille $2N \times 2N$ et s'exprime comme

$$R = \begin{pmatrix} A & B \\ -B^\dagger & A^\dagger \end{pmatrix},$$

où A et B sont des matrices $N \times N$ dont les éléments sont donnés par

$$A_{ij} = \langle c_i^\dagger c_j^\dagger \rangle, \quad i < j \quad (4.42)$$

$$B_{ij} = \langle c_i^\dagger c_j \rangle. \quad (4.43)$$

4.5.1 Calcul des fonctions de corrélations à deux corps

Il y a quatre types de fonction de corrélations qui peuvent apparaître dans les matrices A et B , à savoir $\langle a_l^\dagger a_m^\dagger \rangle$, $\langle a_l^\dagger a_m \rangle$, $\langle a_l a_m^\dagger \rangle$ et $\langle a_l a_m \rangle$. Comme nous l'avons détaillé dans l'Annexe C, en utilisant l'expression des opérateurs de Jordan-Wigner en fonction des opérateurs fermioniques diagonaux η_k et $\eta_k^\dagger$ (voir la formule (C.90)), il est facile de calculer les valeurs moyennes dans l'état $|0\rangle$ annihilé par les η , ie $\eta_k|0\rangle = 0$. On a

$$\langle a_l^\dagger a_m^\dagger \rangle = \frac{i}{N} \sum_k e^{ik(l-m)} \sin \theta_k \cos \theta_k = -\frac{1}{2N} \sum_k \sin(k(l-m)) \sin 2\theta_k, \quad (4.44)$$

$$\langle a_l^\dagger a_m \rangle = \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(l-m)} \sin^2 \theta_k = \frac{1}{2} \delta_{l,m} - \frac{1}{2N} \sum_k \cos(k(l-m)) \cos 2\theta_k, \quad (4.45)$$

$$\langle a_l a_m^\dagger \rangle = \delta_{lm} - \frac{1}{N} \sum_k e^{-ik(l-m)} \sin^2 \theta_k = \frac{1}{2} \delta_{lm} + \frac{1}{2N} \sum_k \cos(k(l-m)) \cos 2\theta_k, \quad (4.46)$$

$$\langle a_l a_m \rangle = -\frac{i}{N} \sum_k e^{-ik(l-m)} \sin \theta_k \cos \theta_k = \frac{1}{2N} \sum_k \sin(k(l-m)) \sin 2\theta_k, \quad (4.47)$$

où l'angle θ_k de la rotation de Bogoliubov est donné par

$$\cos 2\theta_k = \frac{\lambda + \cos k}{\sqrt{1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k}}. \quad (4.48)$$

En raison des propriétés d'anti-commutation fermioniques des opérateurs a_l et $a_l^\dagger$, la matrice A est antisymétrique et à coefficients réels $A^T = -A$, tandis que la matrice B est symétrique réelle $B^T = B$. Utilisant la relation $\text{Pf}^2 = \det$, on a

$$p_{\vec{\sigma}}^2 = \det \begin{pmatrix} A & B \\ -B & -A \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} A+B & B \\ 0 & B-A \end{pmatrix}$$

où la deuxième égalité a été obtenue en additionnant la deuxième colonne de la première matrice puis en additionnant la première ligne à la deuxième. Comme $\det(A+B) = \det(B-A)$, du fait des propriétés d'antisymétrie et de symétrie des matrices A et B , il vient

$$p_{\vec{\sigma}} = \det(A+B) = \det K, \quad (4.49)$$

avec K la matrice $N \times N$ d'éléments

$$K_{lm} = \langle c_l^\dagger (c_m^\dagger + c_m) \rangle = A_{lm} + B_{lm}. \quad (4.50)$$

Faisant la distinction entre le cas où $\sigma_l = +1$ et $\sigma_l = -1$ et en utilisant les relations (4.44)-(4.47), on trouve finalement que

$$K_{lm} = \frac{1}{2} \delta_{lm} + \frac{\sigma_l}{2N} \sum_k \cos(k(l-m) + 2\theta_k) \equiv K^{\vec{\sigma}}. \quad (4.51)$$

La probabilité $p_{\vec{\sigma}} = |\psi_{\vec{\sigma}}|^2$ d'une configuration $|\vec{\sigma}\rangle = |\sigma_0 \sigma_1 \dots \sigma_{N-1}\rangle$ dans l'état fondamental de la chaîne de spin est égal au déterminant de la matrice (4.51) où les σ_l sont donnés par la valeur des spins au site l de $|\vec{\sigma}\rangle$. La somme des probabilités sur toutes les configurations possibles est égale à 1

$$\sum_{\{\vec{\sigma}\}} p_{\vec{\sigma}} = 1 \Leftrightarrow \sum_{\{\vec{\sigma}\}} \det(K^{\vec{\sigma}}) = 1. \quad (4.52)$$

4.5.2 Comportements limites

Cas où $\lambda = 0$

Les angles de Bogoliubov θ_k sont alors donnés par les solutions de l'équation (voir équation (4.48))

$$\cos(2\theta_k) = \cos k \Leftrightarrow 2\theta_k = k. \quad (4.53)$$

Cette équation possède une infinité de solutions congrue modulo $p\pi$ les unes aux autres. La matrice K se réduit alors à la forme tridiagonale suivante

$$K_{lm}^{\vec{\sigma}} = \frac{1}{2} (\delta_{lm} + \sigma_l \delta_{l+1,m}). \quad (4.54)$$

On appelle $P = \prod_{j=0}^{N-1} \sigma_j$ la parité de la configuration $|\vec{\sigma}\rangle = |\sigma_0 \sigma_1 \cdots \sigma_{N-1}\rangle$. Les N valeurs propres μ_p de la matrice $K^{\vec{\sigma}}$ sont données par

$$\mu_p = \frac{1}{2}(1 + \zeta_p) \text{ avec } \zeta_p = \begin{cases} e^{2pi \frac{\pi}{N}}, & \text{si } P = +1 \\ e^{(2p+1)i \frac{\pi}{N}}, & \text{si } P = -1, \quad p = 0, 1, \dots, N-1. \end{cases} \quad (4.55)$$

Le déterminant d'une matrice est égal au produit de ses valeurs propres

$$\det K = \frac{1}{2^N} \prod_{p=0}^{N-1} (1 + \zeta_p). \quad (4.56)$$

Pour évaluer ce produit, on utilise la factorisation du pôleynome

$$\zeta^N \pm 1 = \prod_{p=0}^{N-1} (\zeta - \zeta_p), \quad (4.57)$$

pour $\zeta = -1$. Finalement, on a en champ nul

$$p_{\vec{\sigma}} = \frac{1}{2^N} \left(1 - (-1)^N \prod_{n=0}^{N-1} \sigma_n \right). \quad (4.58)$$

La moitié des coefficients du développement de la fonction d'onde fondamentale sur la base $|\vec{\sigma}\rangle$ est nulle tandis que l'autre moitié est donnée par 2^{1-N} . Le calcul des moments d'ordre q se fait alors assez facilement. Sur les 2^N configurations de la chaîne de spins, seule la moitié donne une contribution de poids égal

$$P_q = \sum_{\{\vec{\sigma}\}} p_{\vec{\sigma}}^q = 2^{N-1} \times 2^{q(1-N)} = 2^{(N-1)(q-1)}. \quad (4.59)$$

Il vient alors que la dimension multifractale s'écrit $D_q = 1$, qui est dans ce cas indépendante de q . Ceci concorde avec l'analyse quantitative faite au début de cette section : la fonction d'onde fondamentale s'étale uniformément sur la moitié des configurations disponibles et la dimension multifractale est donnée par la dimension du système, $d = 1$ dans ce cas.

Cas où $\lambda \gg 1$.

En première approximation, les angles de Bogoliubov (4.48) sont donnés par

$$\cos(2\theta_k) = 1. \quad (4.60)$$

Les solutions de cette équation sont données par $\theta_k = n\pi$ avec $n \in \mathbb{Z}$. La matrice K prend alors une forme diagonale et la probabilité d'une configuration $|\vec{\sigma}\rangle$ s'écrit

$$p_{\vec{\sigma}} = \frac{1}{2^N} \prod_{n=0}^{N-1} (1 + \sigma_n). \quad (4.61)$$

Notons que la seule configuration de probabilité non nulle est celle où tous les spins pointent dans la direction du champ, ce qui est se comprend assez facilement dans cette limite. La probabilité de cette configuration est exactement 1, les autres étant nulles. La dimension multifractale est nulle dans cette limite car l'état fondamental est complètement localisé sur la configuration ferromagnétique.

4.5.3 Probabilité ferromagnétique en champ λ quelconque

Après avoir étudié les cas limites de champ nul et champ grand, on se propose de trouver l'expression de la probabilité de la configuration $|\sigma\rangle = |\uparrow \uparrow \cdots \uparrow\rangle$ en champ λ quelconque. Cette probabilité sera utile dans le calcul des dimensions multifractale asymptotiques. Réécrivons à cet effet la matrice K donnée par (4.51) de la manière suivante (les σ_j valent tous +1 dans ce cas)

$$K_{lm} = \frac{1}{2^N} \sum_k e^{ik(l-m)} (1 + e^{2i\theta_k}), \quad (4.62)$$

où la dépendance en champ est caché dans θ_k . Soit $\mathbf{u}$ un vecteur propre de K de composantes u_p et de valeur propre μ . On note

$$\zeta_k = 1 + e^{2i\theta_k} \quad \text{et} \quad \tilde{u}_k = \sum_{m=0}^{N-1} e^{-ikm} u_m. \quad (4.63)$$

L'équation aux valeurs propres s'écrit alors

$$\frac{1}{2N} \sum_k \zeta_k e^{ikl} \tilde{u}_k = \mu u_l. \quad (4.64)$$

Multipliant de part et d'autre par $e^{-ik'l}$ et sommant sur $l = 0, 1, \dots, N-1$, on a

$$\frac{1}{2} \sum_k \zeta_k \tilde{u}_k \delta_{kk'} = \mu \tilde{u}_{k'} \Leftrightarrow \frac{1}{2} \zeta_{k'} \tilde{u}_{k'} = \mu \tilde{u}_{k'}. \quad (4.65)$$

Comme la décomposition (4.63) est unique, il vient que les N valeurs propres de K sont données par

$$\mu_p = \frac{1}{2} \zeta_{k_p} = \frac{1}{2} (1 + e^{2i\theta_{k_p}}), \quad p = 0, 1, \dots, N-1 \quad (4.66)$$

avec θ_{k_p} donné par

$$\cos(2\theta_{k_p}) = \frac{\lambda - \cos((2p+1)\frac{\pi}{N})}{\sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos((2p+1)\frac{\pi}{N})}}. \quad (4.67)$$

La forme des impulsions découle du fait que le fondamental se trouve dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$ (voir chapitre 2). Il s'ensuit que la probabilité de la configuration $|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle$ est donnée par

$$p_{|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle} = \prod_{p=0}^{N-1} \mu_p = \frac{1}{2^N} \prod_{p=0}^{N-1} (1 + e^{2i\theta_{k_p}}). \quad (4.68)$$

Il existe des valeurs de λ pour lesquelles ce produit peut être mis sous une forme plus commode. C'est le cas par exemple en champ critique $\lambda = 1$ dont le calcul peut être trouvé dans [SMP10]. Les angles θ_{k_p} s'écrivent alors

$$\theta_{k_p} = (2p+1) \frac{\pi}{4N} - \frac{\pi}{4}, \quad p = 0, 1, \dots, N-1. \quad (4.69)$$

On montre sans trop de difficulté que

$$p_{|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle} = \frac{1}{2^{N+\epsilon}} \prod_{p=0}^{\lfloor \frac{N}{2} \rfloor - 1} |z_p|^2, \quad (4.70)$$

avec $\epsilon = -1$ si N impair, $\epsilon = 0$ si N pair et

$$z_p = 1 - ie^{(2p+1)i\frac{\pi}{2N}}.$$

Finalement, on obtient

$$p_{|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle} = \prod_{p=0}^{\lfloor \frac{N}{2} \rfloor - 1} \sin^2 \left((2p+1) \frac{\pi}{4N} + \frac{\pi}{4} \right). \quad (4.71)$$

4.5.4 Dimension multifractale asymptotique $D_{+\infty}$

Afin de trouver le comportement asymptotique de la dimension multifractale, nous remarquons que la configuration de poids la plus élevée de l'état fondamental est la configuration ferromagnétique (voir figure 4.9). Ceci se comprend assez aisément pour $\lambda \gg 1$ puisque le champ tend à aligner les spins dans la même direction (voir figure 4.9 pour $\lambda = 2$). La configuration ferromagnétique prédomine aussi pour les valeurs de champ autour de la valeur critique. Il s'ensuit que le calcul des moments d'ordre $q \gg 1$ en est grandement simplifié et on a ainsi

$$P_q \underset{q \gg 1}{\simeq} p^q (|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle) \quad (4.72)$$

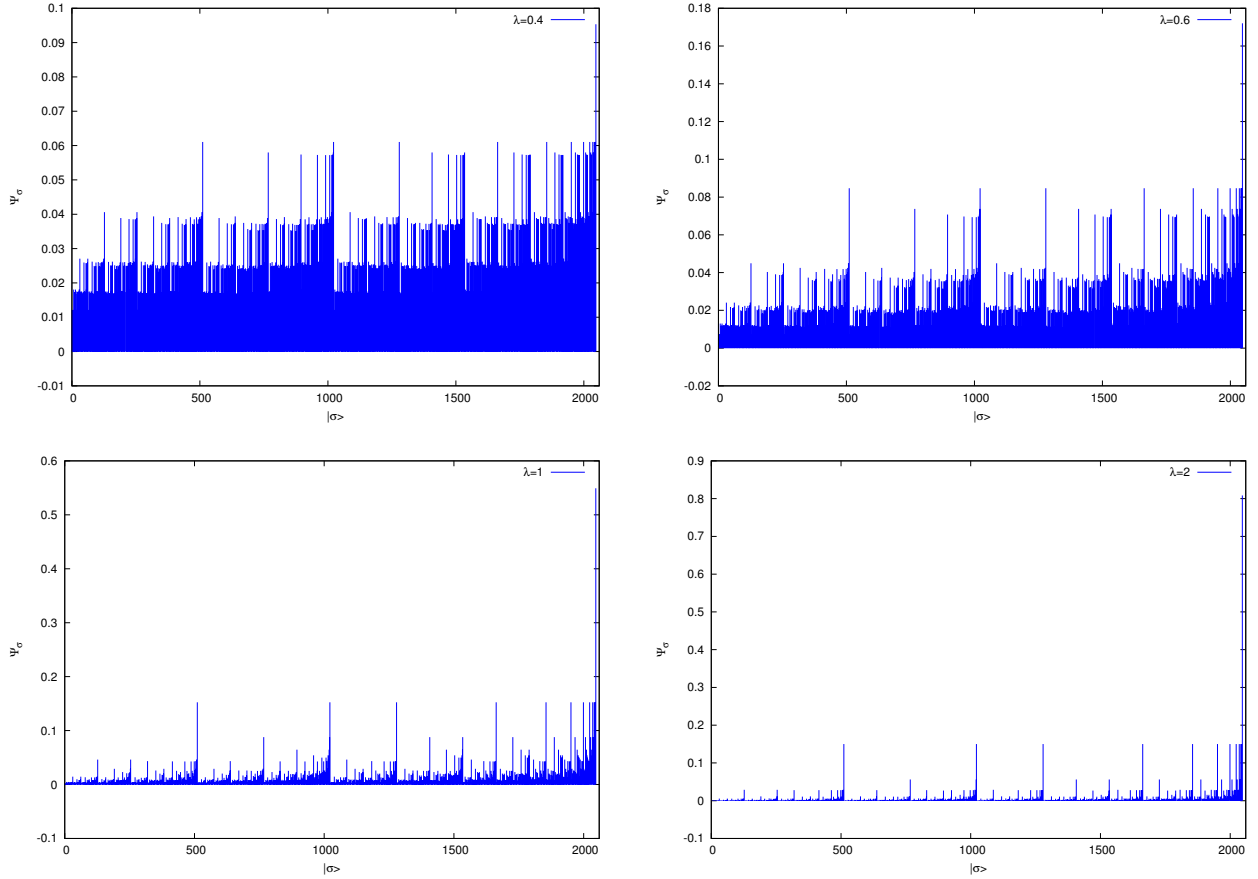


FIGURE 4.9 – Composantes $\psi_{\vec{\sigma}}$ du vecteur propre fondamental dans la base des états propres $|\sigma\rangle$ de σ^z pour une chaîne de $N = 11$ spins pour différentes valeur du champ λ .

avec $p_{|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle}$ donné par (4.68). La dimension multifractale s'exprime alors comme

$$D_{+\infty} = -\frac{\ln p(|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle)}{N \ln 2}. \quad (4.73)$$

Pour $\lambda = 1$, on peut trouver une forme explicite pour $D_{+\infty}$ [SMP10]. On a d'après (4.71)

$$\ln p(|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle) = 2 \sum_{p=0}^{\lfloor \frac{N}{2} \rfloor - 1} \ln \left[\sin \left((2p+1) \frac{\pi}{4N} + \frac{\pi}{4} \right) \right]. \quad (4.74)$$

Faisons le calcul pour $N = 2L$ pair, la dimension multifractale ne doit pas dépendre du nombre de spins et est définie pour $N \rightarrow \infty$. Nous devons donc trouver comment se comporte $\ln p$ en fonction de N (pour $N \gg 1$). On utilise pour cela la formule sommatoire d'Euler-Maclaurin

$$\sum_{p=0}^{L-1} f(p) = \int_0^{L-1} f(t) dt + R, \quad (4.75)$$

avec R un reste dont l'expression est connue mais de contribution négligeable pour $N \gg 1$. Il vient alors

$$\ln p_{|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle} = \frac{8L}{\pi} \int_{\frac{\pi}{4}}^{\frac{\pi}{2}} \ln(\sin u) du = \frac{2L}{\pi} (2C - \pi \ln 2) \quad (4.76)$$

où C est la constante de Catalan ($C = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)^2} \simeq 0.91596559\dots$). Utilisant (4.73), on obtient

$$D_{\infty}(\lambda = 1) = 1 - \frac{2C}{\pi \ln 2} \simeq 0.1587330592\dots \quad (4.77)$$

Ceci est en accord avec la valeur obtenue par l'étude numérique bien que les calculs aient été faits avec un nombre de spins peu élevé (voir figure 4.10).

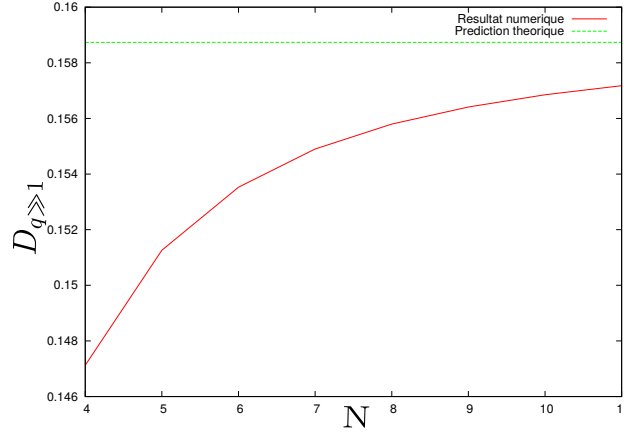


FIGURE 4.10 – Dimension multifractale asymptotique D_∞ en champ critique obtenue par la diagonalisation numérique brute de chaînes de spins de tailles relativement petites. La courbe rouge a été obtenue en prenant la probabilité de la configuration ferromagnétique $|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle$ obtenue numériquement, puis en utilisant la formule (4.73). La ligne verte correspond à la prédiction théorique (4.77).

4.5.5 Dimension multifractale asymptotique $D_{-\infty}$

Le calcul du moment $P_{q \rightarrow -\infty}$ est dominé par la configuration de poids minimal dans le développement de l'état fondamental sur la base $|\vec{\sigma}\rangle$ et s'écrit

$$P_{q \rightarrow -\infty} \simeq p_{\min}^q, \quad (4.78)$$

où $p_{\min}$ est la probabilité de la configuration de poids minimal. Dans le cas d'une chaîne paire, i.e. $N = 2L$ (nous faisons le calcul dans ce cas pour simplifier mais la limite $N \rightarrow \infty$ doit donner le même résultat), cette configuration est donnée par (voir figure 4.9)

$$|\vec{\sigma}\rangle = |\downarrow\downarrow\cdots\downarrow\rangle. \quad (4.79)$$

La probabilité de cette configuration est donnée par le produit des valeurs propres de la matrice K (formule (4.51) avec les σ_j tous égaux à -1 dans ce cas)

$$K_{lm} = \frac{1}{2N} \sum_k e^{ik(l-m)} (1 - e^{2i\theta_k}). \quad (4.80)$$

On trouve que

$$p_{|\downarrow\downarrow\cdots\downarrow\rangle} = \prod_{p=0}^{L-1} \sin^2(\theta_{k_p}), \quad (4.81)$$

avec θ_{k_p} donnée par (4.48). La dimension multifractale asymptotique est donné par

$$D_{-\infty} = -\frac{\ln p(|\downarrow\downarrow\cdots\downarrow\rangle)}{2L \ln 2}. \quad (4.82)$$

Il vient alors

$$D_{-\infty}(\lambda) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi \ln 2} \int_0^\pi \ln \left(1 - \frac{\lambda - \cos u}{\sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u}} \right) du. \quad (4.83)$$

Et en champ critique ($\lambda = 1$), on a

$$D_{-\infty}(\lambda = 1) = 1 + \frac{2C}{\pi \ln 2}, \quad (4.84)$$

où comme précédemment C est la constante de Catalan. En définitive, les dimensions multifractales asymptotiques du modèle d'Ising en champ transverse λ sont données par

$$D_{\pm\infty}(\lambda) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi \ln 2} \int_0^\pi \ln \left(1 \pm \frac{\lambda - \cos u}{\sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u}} \right) du. \quad (4.85)$$

Somme des dimensions multifractales asymptotiques

L'idée d'additionner les dimensions multifractales asymptotiques vient de l'observation que les dimensions au point critique (4.77) et (4.84) ne diffèrent que par la présence d'un signe moins. En additionnant les deux dimensions, nous éliminons la constante proportionnelle à la constante de Catalan. En utilisant l'expression exacte des dimensions asymptotiques en champ quelconque (4.85), on trouve que la somme des dimensions multifractales asymptotiques est donnée par

$$D_{-\infty}(\lambda) + D_{\infty}(\lambda) = \begin{cases} 2, & \text{si } \lambda \leq 1, \\ 2 + \frac{\ln \lambda}{\ln 2}, & \text{si } \lambda > 1. \end{cases} \quad (4.86)$$

Cette discontinuité dans la somme des dimensions multifractales asymptotiques est la signature de la transition de phase quantique sous-jacente du modèle en $\lambda = 1$. Les transitions de phase peuvent donc être observées à travers les dimensions multifractales (voir figure 4.11). Il est aussi possible d'obtenir la dimension $D_{1/2}(\lambda)$ en utilisant les relations de dualité de Kramers-Wannier [KW41, SMP10, SFMP09]

$$D_{1/2}(\lambda) = 1 - D_{+\infty}\left(\frac{1}{\lambda}\right). \quad (4.87)$$

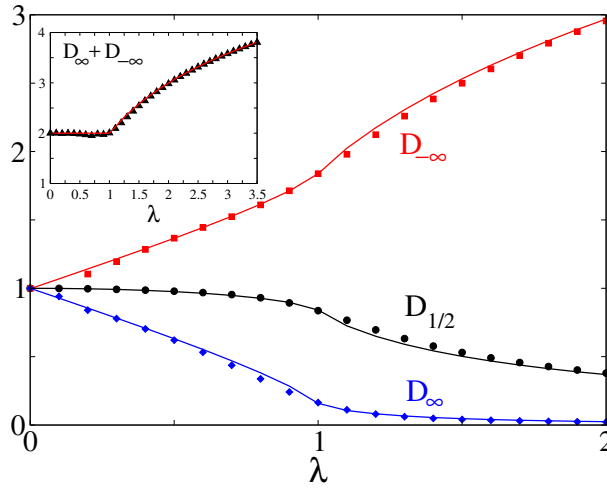


FIGURE 4.11 – Dimensions multifractales exactes (4.85) du modèle d'Ising quantique : $D_{+\infty}$ (ligne bleu), $D_{1/2}$ (ligne noire) et $D_{-\infty}$ (ligne rouge). Les résultats numériques sont indiqués avec des symboles de même couleur. Encadré : $D_{+\infty} + D_{-\infty}$ calculé numériquement (triangles noirs) en comparaison avec la formule (4.86) (ligne rouge).

4.6 Le modèle XY

Le Hamiltonien du modèle XY est donné par

$$H_{XY} = - \sum_n \left(\frac{1+\gamma}{2} \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \frac{1-\gamma}{2} \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y + \lambda \sigma_n^z \right), \quad (4.88)$$

où γ est un facteur d'anisotropie et λ un champ transverse. Ce modèle est intégrable par la transformation de Jordan-Wigner et la stratégie pour trouver le spectre de ce Hamiltonien est identique à celle utilisée pour le modèle d'Ising.

4.6.1 Transformation de Jordan-Wigner

Effectuant la même transformation qu'en (C.2), on obtient

$$H_{XY} = - \sum_{n=1}^N \left(a_n^\dagger a_{n+1} - a_n a_{n+1}^\dagger + \gamma (a_n^\dagger a_{n+1}^\dagger - a_n a_{n+1}) + \lambda (2a_n^\dagger a_n - 1) \right), \quad (4.89)$$

où comme précédemment les conditions aux bords dépendent de la parité de l'excitation (la parité est conservée dans ce modèle de sorte que l'on peut classer les états par secteurs de parité)

- excitations paires : $\mathcal{P} = 1$, $a_{N+1}^\dagger = -a_1^\dagger$ et $a_{N+1} = -a_1$,
- excitations impaires : $\mathcal{P} = -1$, $a_{N+1}^\dagger = a_1^\dagger$ et $a_{N+1} = a_1$ (avec $\mathcal{P}$ donné par (C.31)).

En passant ensuite dans l'espace de Fourier, puis en effectuant une transformation de Bogoliubov, on obtient la forme diagonale

$$H_{XY} = \sum_k \Lambda_k \eta_k^\dagger \eta_k + E_0, \quad (4.90)$$

où les énergies d'excitations sont maintenant données par

$$\Lambda_k = 2\sqrt{(\cos k + \lambda)^2 + \gamma^2 \sin^2 k}. \quad (4.91)$$

avec

$$k_p = (2p + \sigma) \frac{\pi}{N} - \pi, \quad p = 0, 1, \dots, N-1,$$

$\sigma = 0$ pour les excitations impaires et $\sigma = 1$ pour les excitations paires. Notons que pour $\gamma = 1$, on retrouve le modèle d'Ising. L'énergie de l'état fondamental est donnée par

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda_k. \quad (4.92)$$

La méthode de construction des niveaux d'énergies est exactement la même que celle pour le modèle d'Ising dont un récapitulatif est donné dans la table 2.1. Cependant, contrairement au modèle d'Ising, pour lequel l'état fondamental se trouvait toujours dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$, le modèle XY présente un comportement beaucoup plus riche suivant les valeurs des paramètres λ et γ . Comme nous allons le voir, l'état fondamental se trouve soit dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$, soit dans le secteur $\mathcal{P} = -1$ suivant les valeurs de λ et γ .

4.6.2 Oscillation de parité

Nous allons utiliser le même argument que nous avons développé dans le cadre du modèle d'Ising pour savoir dans quel secteur de parité $\mathcal{P}$ se trouve l'état fondamental. Nous pouvons construire deux énergies minimales dans chacun des secteurs de parité $\mathcal{P} = \pm 1$

$$E_0^{(\mathcal{P})} = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda_k \quad (4.93)$$

avec le spectre d'excitation fermionique donné par (4.91) et où la somme est faite sur les impulsions de la forme

- $k_p = (2p + 1) \frac{\pi}{N} - \pi$, dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$,
- $k_p = 2p \frac{\pi}{N} - \pi$, dans le secteur de parité $\mathcal{P} = -1$ avec $p = 0, 1, \dots, N-1$.

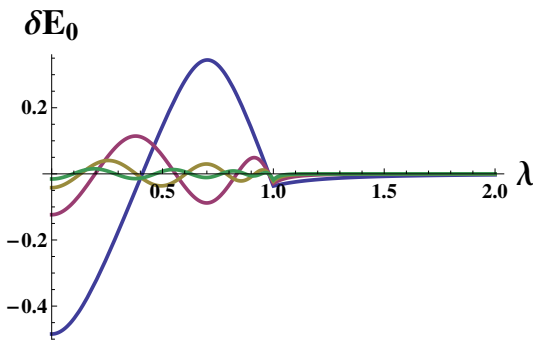


FIGURE 4.12 – Différence entre les énergies minimales dans les secteurs de parité $\mathcal{P} = +1$ et $\mathcal{P} = -1$ pour différentes valeurs du nombre de spins N et pour le facteur d'anisotropie $\gamma = 0.2$. Du bas vers le haut (à l'origine), $N = 4, 8, 12, 16$ respectivement.

De manière plus générale, dans le plan (λ, γ) , il existe une ligne critique d'équation $f(\lambda, \gamma) = 0$, sur laquelle

Dans la figure 4.12, nous avons représenté la différence d'énergie

$$\delta E_0 = E_0^{(\mathcal{P}=+1)} - E_0^{(\mathcal{P}=-1)} \equiv \Delta(\gamma, \lambda, N) \quad (4.94)$$

entre les énergies minimales dans les secteurs de parité $\mathcal{P} = +1$ et $\mathcal{P} = -1$ en fonction du champ λ et pour différentes valeurs du nombre de spins N avec $\gamma = 0.2$. Nous observons que pour λ plus petit qu'une certaine valeur λ_c (comme nous allons le voir $\lambda_c^2 = 1 - \gamma^2$), l'énergie minimale oscille entre les secteurs de parité $\mathcal{P} = \pm 1$: lorsque $\delta E_0 < 0$, l'énergie minimale se trouve dans le secteur $\mathcal{P} = +1$ alors que pour $\delta E_0 > 0$, l'état fondamental se trouve dans le secteur $\mathcal{P} = -1$. Pour $\delta E_0 = 0$, l'état fondamental devient double dégénéré. Pour $\lambda > \lambda_c$, l'état fondamental se trouve toujours dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$.

l'état fondamental est double dégénéré. Dans la limite thermodynamique, la ligne critique définit une région dans l'espace des paramètres (λ, γ) , à l'intérieur de laquelle l'état fondamental est double dégénéré. À l'extérieur de cette région, la dégénérescence est levée : cette brisure spontanée de la symétrie $\mathbb{Z}_2$ est la signature d'une transition de phase quantique.

Afin d'étudier plus en détail le diagramme de phase du modèle XY , nous allons regarder le comportement asymptotique de la fonction $\Delta(\gamma, \lambda, N)$ (avec N le nombre de spins). La parité de l'état fondamental dépend du signe de la fonction Δ

- si $\Delta < 0$, le fondamental est de parité $\mathcal{P} = +1$,
- si $\Delta > 0$, le fondamental est de parité $\mathcal{P} = -1$,
- si $\Delta = 0$ il y a dégénérescence.

La forme explicite de la fonction Δ est donnée par

$$\Delta(\gamma, \lambda, N) = \sum_{p=0}^{N-1} a_{2p+1}(\gamma, \lambda, N) - a_{2p}(\gamma, \lambda, N), \quad (4.95)$$

avec

$$a_p(\gamma, \lambda, N) = \sqrt{\left(\lambda - \cos\left(\frac{p\pi}{N}\right)\right)^2 + \gamma^2 \sin^2\left(\frac{p\pi}{N}\right)}. \quad (4.96)$$

Pour trouver le comportement asymptotique de la fonction Δ , nous utilisons des outils d'analyse complexe. Posons $z = e^{ik}$, de sorte que la somme (4.95) peut se réécrire sous la forme d'une somme sur les racines de

$$z^N \pm 1 = 0. \quad (4.97)$$

Plus précisément, dans (4.95) la somme sur les a_{2p} (resp. a_{2p+1}) est équivalente à la somme sur les racines de $z^N - 1 = 0$ (resp. $z^N + 1 = 0$). Travaillons sur le second terme de la somme (4.95) qui se réécrit

$$\sum_{p=0}^{N-1} a_{2p} = \sum_{z=z_p} \sqrt{\left(\lambda - \frac{1}{2}\left(z + \frac{1}{z}\right)\right)^2 - \frac{\gamma^2}{4}\left(z - \frac{1}{z}\right)^2} = \sum_{z=z_p} f(z), \quad (4.98)$$

où nous avons utilisé la formule d'Euler pour les fonctions trigonométriques et où la somme de droite porte sur les N racines z_p de $z^N - 1 = 0$. L'idée consiste à écrire (4.98) sous la forme d'une intégrale dans le plan complexe en identifiant la somme sur les racines à une somme sur les résidus d'une certaine fonction $F(z)$:

$$\frac{1}{2i\pi} \int_{\mathcal{C}} F(z) dz = \sum \text{Res}(F(z), z = z_p) = \sum_{z_p} f(z) \quad (4.99)$$

Il est clair que la fonction $F(z)$ doit posséder des pôles en $z = z_p$ et s'écrit donc

$$F(z) = \frac{G(z)}{z^N - 1}, \quad (4.100)$$

où $G(z)$ est supposée être une fonction analytique dans le plan complexe (cette hypothèse sera vérifiée plus loin). Il est facile de calculer les résidus de $F(z)$

$$\text{Res}(F(z), z = z_p) = \frac{G(z_p)}{N z_p^{N-1}}, \quad (4.101)$$

ce qui permet d'obtenir $G(z)$

$$G(z) = N z^{N-1} f(z). \quad (4.102)$$

Notons que la fonction $f(z)$ possède un pôle en $z = 0$

$$f(z) = \frac{\sqrt{P(z)}}{2z}, \quad (4.103)$$

avec

$$P(z) = (2\lambda z - (z^2 + 1))^2 - \gamma^2 (z^2 - 1)^2. \quad (4.104)$$

Néanmoins la fonction $G(z)$ reste analytique du fait que $N \geq 2$ (ce pôle n'est donc pas à prendre en compte dans (4.99)). Il vient donc finalement

$$\sum_{z=z_p} f(z) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\mathcal{C}} \frac{Nz^{N-1}f(z)}{z^N - 1} dz, \quad z_p^N - 1 = 0. \quad (4.105)$$

De la même manière, le premier terme de la somme (4.95) se réécrit

$$\sum_{z=z_p} f(z) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\mathcal{C}} \frac{Nz^{N-1}f(z)}{z^N + 1} dz, \quad z_p^N + 1 = 0. \quad (4.106)$$

En effectuant la différence, on obtient la forme suivante pour Δ

$$\Delta = \frac{1}{2i\pi} \int_{\mathcal{C}} \frac{Nz^{N-2}\sqrt{P(z)}}{1 - z^{2N}} dz \quad (4.107)$$

Le contour $\mathcal{C}$ doit contenir les pôles de $F(z)$ pour que (4.99) soit valable. Notons que la présence de la racine carrée entraîne que l'intégrant est une fonction multiforme⁵. Le polynôme $P(z)$ possède 4 zéros dont la nature dépend de la valeur des paramètres λ et γ :

$$z_1 = \frac{\lambda + \sqrt{\lambda^2 + \gamma^2 - 1}}{1 + \gamma}, \quad z_2 = \frac{\lambda - \sqrt{\lambda^2 + \gamma^2 - 1}}{1 + \gamma}, \quad (4.108)$$

$$z_3 = \frac{-\lambda + \sqrt{\lambda^2 + \gamma^2 - 1}}{\gamma - 1}, \quad z_4 = \frac{-\lambda - \sqrt{\lambda^2 + \gamma^2 - 1}}{\gamma - 1}. \quad (4.109)$$

et se réécrit donc :

$$P(z) = (1 - \gamma^2) \prod_{i=1}^4 (z - z_i). \quad (4.110)$$

Notons dès à présent que la ligne $\lambda^2 + \gamma^2 = 1$ joue un rôle particulier : les zéros z_i de $P(z)$ deviennent réels et doubles dégénérés sur cette ligne. Pour $\lambda^2 + \gamma^2 > 1$, les zéros sont réels non dégénérés et pour $\lambda^2 + \gamma^2 < 1$, ils deviennent complexes conjugués l'un de l'autre. Le comportement de la fonction Δ sera donc clairement différent suivant la position par rapport à la ligne $\lambda^2 + \gamma^2 = 1$.

Cas où deux pôles se trouvent à l'intérieur du cercle unité

Considérons dans un premier temps la situation où $\lambda^2 + \gamma^2 < 1$. Dans ce cas, on a

$$z_1 = z_2^*, \quad z_3 = z_4^*, \quad (4.111)$$

et ces points constituent des points de branchements dans le plan complexe. Les normes de ces nombres complexes sont données par

$$|z_1| = |z_2| = \frac{1}{|z_3|} = \frac{1}{|z_4|} = \frac{|1 - \gamma|}{1 + \gamma} < 1. \quad (4.112)$$

5. La fonction $z^{1/2}$ possède deux valeurs pour $z \neq 0$. Si nous parcourons un contour circulaire entourant l'origine à partir d'un point $z = re^{i\theta}$ ($r > 0$) et que nous revenons en ce même point, la phase se transforme alors en $\theta + 2\pi$. De ce fait, la racine carrée qui valait $z^{1/2} = \sqrt{r}e^{i\theta/2}$ au départ prend une valeur différente où change de branche après un tour (et ainsi de suite) : $z^{1/2} = -\sqrt{r}e^{i\theta/2}$. Nous pouvons obliger $z^{1/2}$ à être une fonction univaluée en restreignant la phase θ à rester dans un certain intervalle de longueur 2π , autrement dit choisir une coupure dans le plan complexe.

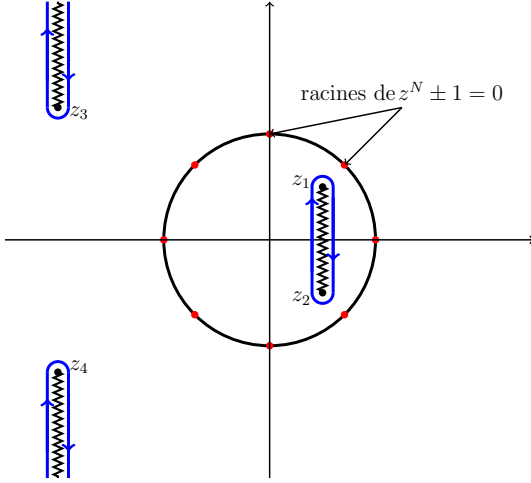


FIGURE 4.13 – Contour d'intégration de l'intégrale (4.107) dans le plan complexe (en bleu). Les lignes brisées correspondent aux coupures choisies pour la racine carrée.

Il s'ensuit que $z_{1,2}$ se trouvent à l'intérieur du cercle de rayon $|z| < 1$ et $z_{3,4}$ sont à l'extérieur de ce cercle (voir figure 4.13). Nous cherchons à évaluer la contribution des points de branchements lorsque $N \gg 1$. L'intégrale (4.107) se réécrit

$$\Delta = -\frac{N}{2i\pi} \begin{cases} \int_C z^{N-2} \sqrt{P(z)} dz & \text{si } |z| < 1 \\ \int_C z^{-N-2} \sqrt{P(z)} dz & \text{si } |z| > 1 \end{cases} \quad (4.113)$$

Calculons la contribution à l'intégrale au voisinage du point z_1 se trouvant à l'intérieur du cercle unité, on utilise pour cela la première équation de (4.113). Les intégrales sur les portions de contour descendente et ascendente sont égales (la coupure permettant de retomber sur le bon signe).

Travaillons donc sur la partie de chemin descendant, on pose $z = z_1 - \frac{u}{N}$, de sorte que

$$z^{N-2} = z_1^{N-2} \left(1 - \frac{u}{Nz_1}\right)^{N-2} = z_1^{N-2} e^{-u/z_1}, \quad (4.114)$$

avec u parcourant maintenant l'axe imaginaire positif. $\text{Im}(z_1) > 0$ assure la convergence de l'intégrale. On a donc

$$\int_{z \sim z_1} z^{N-2} \sqrt{P(z)} dz = -\frac{z_1^{N-2} (1 - \gamma^2)^{1/2}}{N} \int_0^{i\infty} e^{-u/z_1} \prod_{j=1}^4 \left(z_1 - z_j - \frac{u}{N}\right)^{1/2} du. \quad (4.115)$$

Ne prenant en compte que la contribution au premier ordre en $\frac{1}{N}$ dans le produit, il vient après quelques lignes de calcul

$$\frac{iz_1^{N-1/2} \sqrt{(1 - \gamma^2)\pi}}{2N^{3/2}} \prod_{j \neq 1} (z_1 - z_j)^{1/2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (4.116)$$

La contribution du point de branchement z_1 à Δ est donc donnée par

$$-z_1^{N-1/2} \sqrt{\frac{1 - \gamma^2}{4N\pi}} \prod_{j \neq 1} (z_1 - z_j)^{1/2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right). \quad (4.117)$$

De la même manière, on obtient en z_2

$$-z_2^{N-1/2} \sqrt{\frac{1 - \gamma^2}{4N\pi}} \prod_{j \neq 2} (z_2 - z_j)^{1/2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right). \quad (4.118)$$

Le calcul pour les points de branchements à l'extérieur du cercle unité peuvent se faire de la même façon en utilisant la deuxième intégrale dans (4.113). Il est cependant plus ingénieux d'utiliser le fait que z_3 et z_4 sont les inverses de z_2 et z_1 respectivement. De plus, on a les relations suivantes

$$\frac{1}{z_1^{1/2}} \prod_{j \neq 1} (z_1 - z_j)^{1/2} = \frac{1}{z_4^{1/2}} \prod_{j \neq 4} (z_4 - z_j)^{1/2}, \quad (4.119)$$

$$\frac{1}{z_2^{1/2}} \prod_{j \neq 2} (z_2 - z_j)^{1/2} = \frac{1}{z_3^{1/2}} \prod_{j \neq 3} (z_3 - z_j)^{1/2}, \quad (4.120)$$

ce qui entraîne que les points $z_{3,4}$ apportent les mêmes contributions que $z_{1,2}$. Finalement, nous obtenons le comportement suivant pour la fonction Δ :

$$\Delta = -\sqrt{\frac{1 - \gamma^2}{N\pi}} \sum_{i=1}^2 z_i^{N-1/2} \prod_{j \neq i} (z_i - z_j)^{1/2}. \quad (4.121)$$

En développant le produit, on trouve finalement que

$$\Delta = -\text{Re} \left[r^N(\lambda, \gamma) \sqrt{\frac{32(1 - \lambda^2 - \gamma^2)}{\pi N(1 - \gamma^2)}} (\sqrt{1 - \lambda^2 - \gamma^2} + i\gamma\lambda) \right] \quad (4.122)$$

avec

$$r(\lambda, \gamma) = \frac{\lambda + i\sqrt{1 - \lambda^2 - \gamma^2}}{1 + \gamma}. \quad (4.123)$$

Notons que pour $\lambda^2 + \gamma^2 = 1$, la fonction Δ s'annule ce qui nous donne l'équation de la ligne critique dans l'espace des paramètres. Pour $\lambda^2 + \gamma^2 < 1$, la différence (4.122) oscille et possède N zéros mais est exponentiellement petite $\Delta \sim |r|^N$ avec

$$|r| = \sqrt{\frac{1 - \gamma}{1 + \gamma}}. \quad (4.124)$$

Pour $\lambda^2 + \gamma^2 > 1$, on peut montrer que le fondamental se trouve tout le temps dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$ comme dans le cas du modèle d'Ising. Dans la suite, nous travaillerons uniquement pour $\lambda^2 + \gamma^2 \geq 1$ pour éviter les problèmes liés aux oscillations de la parité.

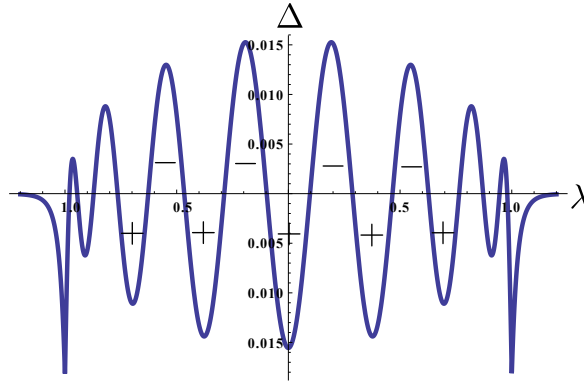


FIGURE 4.14 – Fonction (4.95) pour $N = 16$ spins et $\gamma = 0.2$. Oscillations de parité pour $\lambda \leq \lambda_c$ avec $\lambda_c = \sqrt{1 - \gamma^2}$.

4.6.3 Probabilité d'une configuration

Comme le modèle XY est diagonalisable par la transformation de Jordan-Wigner, l'expression des probabilités $p_{\vec{\sigma}}$ d'une configuration $|\vec{\sigma}\rangle = |\sigma_0\sigma_1 \cdots \sigma_{n-1}\rangle$ dans l'état fondamental s'exprime de la même manière que pour le cas du modèle d'Ising

$$p_{\vec{\sigma}} = \det K, \quad (4.125)$$

avec K la matrice $N \times N$ d'éléments

$$K_{lm} = \frac{1}{2} \delta_{lm} + \frac{\sigma_l}{2N} \sum_k \cos(k(l - m) + 2\theta_k) \quad (4.126)$$

avec les angles de la rotation de Bogoliubov θ_k donnés cette fois-ci par

$$\tan(2\theta_k) = \frac{\gamma \sin k}{\lambda + \cos k}. \quad (4.127)$$

Pour $\gamma = 1$, on retrouve le modèle d'Ising.

Probabilité de la configuration ferrromagnétique

Dans ce cas la matrice K se réécrit sous la forme plus compacte suivante

$$K_{lm} = \frac{1}{2N} \sum_k e^{ik(l-m)} (1 + e^{2i\theta_k}). \quad (4.128)$$

Comme on l'a vu précédemment (voir formule (4.68)), on a

$$p_{|\uparrow\uparrow\ldots\uparrow\rangle} = \frac{1}{2^N} \prod_{p=0}^{N-1} (1 + e^{2i\theta_k}), \quad (4.129)$$

avec les angles θ_{k_p} donnés par (on suppose que $\lambda^2 + \gamma^2 > 1$ de sorte que le fondamental se trouve dans le secteur de parité +1)

$$\cos(2\theta_{k_p}) = \frac{\lambda - \cos((2p+1)\frac{\pi}{N})}{\sqrt{(\lambda - \cos((2p+1)\frac{\pi}{N}))^2 + \gamma^2 \sin^2((2p+1)\frac{\pi}{N})}}, \quad p = 0, 1, \dots, N-1. \quad (4.130)$$

Comme la matrice K est une matrice unitaire, ses valeurs propres arrivent par paires conjuguées. Il vient par conséquent

$$p_{|\uparrow\uparrow\ldots\uparrow\rangle} = \frac{1}{2^N} \prod_{p=1}^{\lfloor \frac{N}{2} \rfloor - 1} (1 + e^{2i\theta_{k_p}}) (1 + e^{-2i\theta_{k_p}}) = \prod_{p=1}^{\lfloor \frac{N}{2} \rfloor - 1} \cos^2 \theta_{k_p}. \quad (4.131)$$

Dimension multifractale asymptotique $D_{q \rightarrow +\infty}$

Pour $q \gg 1$, la probabilité de poids maximum va dominer dans le calcul de la dimension multifractale. Pour le modèle d'Ising i.e. $\gamma = 1$, les résultats numériques montrent que cette configuration de poids maximum est donné par la configuration ferromagnétique. Ceci est assez compréhensible en champ fort comme nous l'avons déjà fait remarquer. Il semble que ceci n'est pas vrai pour toutes valeurs de λ et γ . Pour $\lambda^2 + \gamma^2 < 1$, l'état fondamental respecte la symétrie $\mathbb{Z}_2$ alors que cette symétrie est brisée spontanément pour $\lambda^2 + \gamma^2 > 1$. Pour $\lambda \geq 1$, la configuration ferromagnétique prédomine pour tout γ . Dans la suite, nous nous intéressons uniquement à l'ensemble des paramètres vérifiant $\lambda^2 + \gamma^2 \geq 1$ pour lesquels la configuration de poids maximale dans la fonction d'onde fondamentale est la configuration ferromagnétique. Calculons le logarithme de la probabilité de la configuration ferromagnétique pour $N = 2L$ pair afin de simplifier le calcul (même si cela n'a pas d'importance sur le résultat final étant donné que l'on prend la limite $N \rightarrow \infty$). On a

$$\ln p_{|\uparrow\uparrow\ldots\uparrow\rangle} = \sum_{p=0}^{L-1} \ln(1 + \cos(2\theta_{k_p})) - L \ln 2. \quad (4.132)$$

Pour $N \rightarrow \infty$, i.e. $L \rightarrow \infty$, on peut remplacer la somme par une intégrale et en utilisant (4.73) pour la dimension multifractale asymptotique, il vient

$$D_\infty = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi \ln 2} \int_0^\pi \ln \left(1 + \frac{\lambda - \cos u}{\sqrt{(\lambda - \cos u)^2 + \gamma^2 \sin^2 u}} \right) du. \quad (4.133)$$

Cette formule est vraie pour toutes valeurs de λ et γ à condition que la configuration ferromagnétique prédomine.

Etat de Néel pour les petites valeurs de λ et matrice de Toeplitz par bloc

Les dimensions multifractales asymptotiques D_∞ et $D_{-\infty}$ s'obtiennent, comme dans le cas du modèle d'Ising, en prenant en compte uniquement soit la configuration ferromagnétique soit la configuration antiferromagnétique respectivement, ce qui mène aux formules intégrales suivantes

$$D_{\pm\infty} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi \ln 2} \int_0^{2\pi} \ln \left[1 \pm \frac{\lambda - \cos u}{\sqrt{(\lambda - \cos u)^2 + \gamma^2 \sin^2 u}} \right] du. \quad (4.134)$$

Cependant, les résultats numériques montrent que l'état de probabilité minimale pour les petites valeurs de champ λ est donné par l'état de Néel avec les spins alternés $\sigma_n = (-1)^n$, plutôt que par l'état avec tout les spins vers le bas. Par conséquent, la forme (4.134) pour la dimension multifractale $D_{-\infty}$ n'est pas la bonne pour les petites valeurs de λ . On se propose ici de recalculer $D_{-\infty}$ en utilisant l'état de Néel.

D'après (4.126), la probabilité de l'état de Néel est donnée par le déterminant de la matrice suivante

$$p_{\text{Neel}} = \frac{1}{2^N} \det K, \quad (4.135)$$

avec

$$K_{l,m} \equiv K_{l-m} = (-1)^m \delta_{l,m} + \frac{1}{N} \sum_{p=0}^{N-1} e^{i \frac{\pi}{N} (2p+1)(l-m) + 2i\theta_p}, \quad (4.136)$$

et les θ_p sont donnés par (4.127). On peut montrer que la matrice K peut se mettre sous la forme en bloc suivante

$$K = \begin{pmatrix} \Pi_0 & \Pi_{-1} & \Pi_{-2} & \cdots & \\ \Pi_1 & \Pi_0 & \Pi_{-1} & \cdots & \\ \Pi_2 & \Pi_1 & \Pi_0 & \cdots & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ & & & & \Pi_0 \end{pmatrix}, \quad (4.137)$$

avec les Π_k des matrices 2×2

$$\Pi_k = \begin{pmatrix} T_{2k} & T_{2k-1} \\ T_{2k+1} & T_{2k} \end{pmatrix}, \quad k \in \mathbb{Z}^* \quad \text{et} \quad \Pi_0 = \begin{pmatrix} -1 + T_0 & T_{-1} \\ T_1 & 1 + T_0 \end{pmatrix}. \quad (4.138)$$

Les éléments T_k sont donnés par

$$T_k = \frac{1}{N} \sum_{p=0}^{N-1} e^{i \frac{\pi}{N} k(2p+1) + 2i\theta_p}. \quad (4.139)$$

Dans la limite $N \rightarrow \infty$ qui nous intéresse, la somme peut être remplacée par une intégrale et il vient que les éléments T_k se réécrivent

$$T_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ik\theta} g(\theta) d\theta, \quad (4.140)$$

avec la fonction génératrice

$$g(\theta) = \frac{\lambda + \cos \theta + i\gamma \sin \theta}{\sqrt{(\lambda + \cos \theta)^2 + \gamma^2 \sin^2 \theta}}. \quad (4.141)$$

Le problème consiste donc à évaluer le comportement asymptotique du déterminant de la matrice par bloc (4.137). La forme de la matrice K est appelée Toeplitz par bloc [Sze15, Wid75, IK09]. Les mathématiciens ont déjà travaillé sur ce genre d'objets et il existe des théorèmes permettant de calculer le déterminant de ces matrices, ce que nous détaillons dans ce qui suit.

Ba-ba sur les matrices de Toeplitz

Une matrice M dont les éléments s'expriment comme $M_{i,j}[\Phi] = (\Phi_{i-j})$ est appelée une matrice de Toeplitz. La fonction $\Phi(\theta)$ est appelée la génératrice de la matrice de Toeplitz M si :

$$\Phi_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \Phi(\theta) e^{-ik\theta} d\theta. \quad (4.142)$$

La fonction génératrice $\Phi(\theta)$ peut être de différents types : scalaire ou matricielle. Une des questions principales relatives aux matrices de Toeplitz et étudiée par les mathématiciens concerne la détermination du comportement asymptotique du déterminant de ces matrices, $D[\Phi] = \det M[\Phi]$.

Fonction génératrice ϕ scalaire Les premiers travaux sur les déterminants des matrices de Toeplitz ont été effectués par Szego [Sze15]. Le théorème de Szego stipule que sous certaines conditions, le déterminant d'une matrice de Toeplitz $M[\phi]$ générée par une fonction scalaire $\phi(\theta)$ (c'est-à-dire dont les éléments de M sont donnés par les composantes de Fourier de $\phi(\theta)$) se comporte comme

$$D[\phi] \sim C[\phi] e^{NV_0}, \quad N \rightarrow \infty \quad (4.143)$$

avec V_k les composantes de Fourier de la fonction $V(\theta) = \ln \phi(\theta)$, c'est-à-dire

$$V_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} V(\theta) e^{-ik\theta} d\theta, \quad (4.144)$$

et le facteur pré-exponentiel est donné par

$$C[\phi] = \exp \left(\sum_{k=1}^{\infty} k V_k V_{-k} \right). \quad (4.145)$$

Fonction génératrice Φ matricielle Il s'agit du cas qui nous intéresse puisque (4.137) est une matrice de Toeplitz par bloc. La généralisation du théorème de Szego au cas des matrices de Toeplitz par bloc a été étudiée par Widom [Wid75] et on trouve, plus récemment, quelques applications dans les travaux de Korepin et Its sur l'entropie d'intrication dans les chaînes de spins [IK09].

Soit donc $\Phi(\theta)$ une matrice $L \times L$ satisfaisant certaines conditions que nous ne détaillons pas ici et générant une matrice de Toeplitz par bloc $M[\Phi]$. Alors, le comportement asymptotique du déterminant de cette matrice est donné par

$$D[\Phi] \sim \exp \left(\frac{N}{4\pi} \int_0^{2\pi} \ln \det \Phi(\theta) d\theta \right), \quad N \rightarrow \infty. \quad (4.146)$$

La forme du pré-facteur est aussi connue dans ce cas mais celui-ci ne nous intéresse pas dans le calcul de la dimension multifractale. Dans le cas qui nous intéresse, $\Phi(\theta)$ est une matrice 2×2

$$\Phi(\theta) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \Pi_k e^{-ik\theta}, \quad (4.147)$$

soit en utilisant l'expression (4.138) des Π_k

$$\Phi(\theta) = \begin{pmatrix} -1 + \sum_{k \in \mathbb{Z}} T_{2k} e^{-ik\theta} & \sum_{k \in \mathbb{Z}} T_{2k-1} e^{-ik\theta} \\ \sum_{k \in \mathbb{Z}} T_{2k+1} e^{-ik\theta} & 1 + \sum_{k \in \mathbb{Z}} T_{2k} e^{-ik\theta} \end{pmatrix}. \quad (4.148)$$

Afin d'évaluer les différents éléments de matrice de $\Phi(\theta)$, nous inversons (4.140)

$$g(\theta) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} T_k e^{-ik\theta}. \quad (4.149)$$

Il vient alors assez facilement :

$$\Phi_{11}(\theta) = -1 + \frac{1}{2} \left[g\left(\frac{\theta}{2}\right) + g\left(\frac{\theta}{2} + \pi\right) \right], \quad (4.150)$$

$$\Phi_{12}(\theta) = \frac{e^{-i\theta/2}}{2} \left[g\left(\frac{\theta}{2}\right) - g\left(\frac{\theta}{2} + \pi\right) \right], \quad (4.151)$$

$$\Phi_{21}(\theta) = \frac{e^{i\theta/2}}{2} \left[g\left(\frac{\theta}{2}\right) - g\left(\frac{\theta}{2} + \pi\right) \right], \quad (4.152)$$

$$\Phi_{22}(\theta) = 1 + \frac{1}{2} \left[g\left(\frac{\theta}{2}\right) + g\left(\frac{\theta}{2} + \pi\right) \right]. \quad (4.153)$$

Utilisant la formule (4.146) de Szego-Widom, on obtient la forme suivante pour la probabilité de l'état de Néel

$$p_{\text{Neel}} \sim \frac{1}{2^N} \exp \left(\frac{N}{4\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left[g\left(\frac{\theta}{2}\right) g\left(\frac{\theta}{2} + \pi\right) - 1 \right] d\theta \right), \quad (4.154)$$

$$= \frac{1}{2^N} \exp \left(\frac{N}{2\pi} \int_0^\pi \ln [g(\theta)g(\theta + \pi) - 1] d\theta \right). \quad (4.155)$$

Posons $g(\theta) = e^{i\phi_1(\theta)}$ et $g(\theta + \pi) = e^{i\phi_2(\theta)}$. Il est facile de montrer que

$$\ln [g(\theta)g(\theta + \pi) - 1] = \frac{1}{2} \ln |Z|^2 + i \text{Arg}(Z), \quad (4.156)$$

avec

$$Z = 2ie^{i(\phi_1 + \phi_2)/2} \sin\left(\frac{\phi_1 + \phi_2}{2}\right). \quad (4.157)$$

L'argument du nombre complexe Z est une fonction impaire de θ , par conséquent l'intégration sur l'intervalle $[0, 2\pi]$ donne zéro (ce qui est réconfortant!). On obtient donc finalement la probabilité de l'état de Néel

$$p_{\text{Neel}} = \frac{1}{2^N} \exp\left(\frac{N \ln 2}{4} + \frac{N}{4\pi} \int_0^\pi \ln\left[1 - \frac{\lambda^2 + \gamma^2 - (1 + \gamma^2) \cos^2 \theta}{\sqrt{R_+(\lambda, \gamma, \theta) R_-(\lambda, \gamma, \theta)}}\right] d\theta\right), \quad (4.158)$$

avec

$$R_\pm(\lambda, \gamma, \theta) = (\lambda \pm \cos \theta)^2 + \gamma^2 \sin^2 \theta. \quad (4.159)$$

La dimension multifractale asymptotique $D_{-\infty}$ pour les petites valeurs de λ s'en déduit alors

$$D_{\text{Neel}} = \frac{3}{4} - \frac{1}{2\pi \ln 2} \int_0^{\pi/2} \ln\left[1 - \frac{\lambda^2 + \gamma^2 - (1 + \gamma^2) \cos^2 \theta}{\sqrt{R_+(\lambda, \gamma, \theta) R_-(\lambda, \gamma, \theta)}}\right] d\theta \quad (4.160)$$

La comparaison de ces formules avec les résultats obtenus par diagonalisation numérique est présentée dans la figure 4.15.

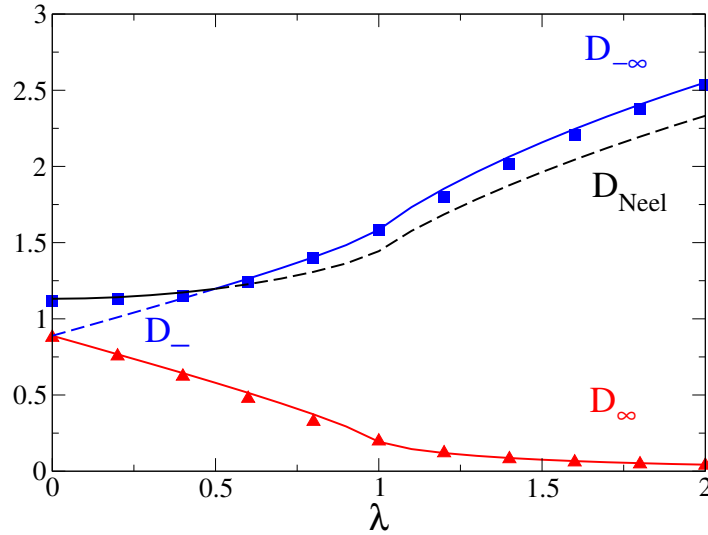


FIGURE 4.15 – Dimensions multifractales asymptotiques du modèle XY pour $\gamma = 1.4$ en fonction du champ λ . Les lignes bleues et rouges indiquent $D_{\pm\infty}$ calculés à l'aide de (4.134). La ligne noire correspond à la contribution de l'état de Néel (4.160). Quand les contributions deviennent sous-dominantes, elles sont indiquées par des lignes brisées de même couleur. Les résultats numériques sont représentés par des symboles de même couleur.

4.6.4 Champ factorisant du modèle XY sur la ligne critique

En traçant les composantes du vecteur propre fondamental apparaissant dans le développement sur la base $|\vec{\sigma}\rangle$ pour les valeurs de champ λ et d'anisotropie γ vérifiant $\lambda^2 + \gamma^2 = 1$, nous observons que la figure obtenue (voir figure 4.16) ressemble à celle obtenue pour la cascade binomiale (voir figure 4.3). Comme nous allons le voir, il existe des valeurs de λ et γ qui permettent d'obtenir la forme exacte des probabilités de configuration, i.e. la forme de la fonction d'onde fondamentale [KTM82, MS85]. Nous allons montrer que ces probabilités s'obtiennent par une cascade binomiale sur la ligne critique $\lambda^2 + \gamma^2 = 1$.

Ecrivons à cet effet le Hamiltonien du modèle XY (4.88) sous la forme suivante

$$H_{XY} = \sum_n H_n, \quad (4.161)$$

avec

$$H_n = -\left(\frac{1+\gamma}{2} \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \frac{1-\gamma}{2} \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y + \frac{\lambda}{2} (\sigma_n^z + \sigma_{n+1}^z)\right). \quad (4.162)$$

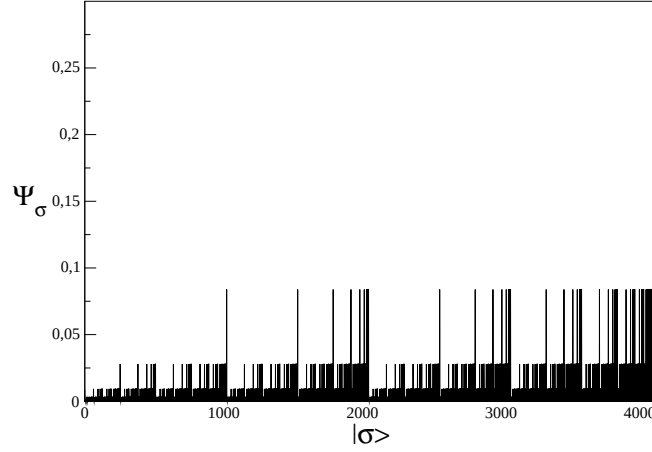


FIGURE 4.16 – Composantes $\psi_{\vec{\sigma}}$ du vecteur propre fondamental du modèle XY pour $N = 12$ spins avec $\lambda = 0.8$ et $\gamma = 0.6$. L'axe des abscisses correspond au codage binaire de la configuration $|\vec{\sigma}\rangle$, $x_{\vec{\sigma}} = \sum_{n=0}^{N-1} 2^{n-1}(1 + \sigma_n)$.

Nous allons rechercher un état propre de H_n sous la forme

$$|\psi\rangle_n = (a|\uparrow\rangle_n + b|\downarrow\rangle_n) \otimes (a|\uparrow\rangle_{n+1} + b|\downarrow\rangle_{n+1}). \quad (4.163)$$

Développons les deux parties de l'équation aux valeurs propres

$$H_n|\psi\rangle_n = \epsilon_n|\psi\rangle_n. \quad (4.164)$$

Le terme de gauche s'écrit

$$-[\gamma(a^2|\downarrow_n\downarrow_{n+1}\rangle + b^2|\uparrow_n\uparrow_{n+1}\rangle) + \lambda(a^2|\uparrow_n\uparrow_{n+1}\rangle - b^2|\downarrow_n\downarrow_{n+1}\rangle) + ab(|\downarrow_n\uparrow_{n+1}\rangle + |\uparrow_n\downarrow_{n+1}\rangle)], \quad (4.165)$$

et celui de droite s'exprime comme

$$\epsilon_n[a^2|\uparrow_n\uparrow_{n+1}\rangle + b^2|\downarrow_n\downarrow_{n+1}\rangle + ab(|\uparrow_n\downarrow_{n+1}\rangle + |\downarrow_n\uparrow_{n+1}\rangle)]. \quad (4.166)$$

En comparant ces deux expressions, on trouve que

$$\epsilon_n = -1, \quad (4.167)$$

et

$$a^2\gamma - b^2\lambda = b^2, \quad (4.168)$$

$$b^2\gamma + a^2\lambda = a^2. \quad (4.169)$$

Il s'ensuit que γ et λ doivent vérifier la condition de factorisation

$$\lambda^2 + \gamma^2 = 1. \quad (4.170)$$

En utilisant la condition de normalisation de l'état $|\psi\rangle_n$, on montre que

$$a^2 + b^2 = 1, \quad (4.171)$$

de sorte que l'on peut poser $a = \cos \theta$ et $b = \sin \theta$ avec

$$\cos^2(2\theta) = \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma}. \quad (4.172)$$

L'état fondamental de H_{XY} (de parité ± 1) sur la ligne critique s'écrit donc

$$|\Psi\rangle_{\pm} = \frac{1}{\mathcal{N}_{\pm}} (|\psi\rangle_{+} \pm |\psi\rangle_{-}), \quad (4.173)$$

avec

$$|\psi\rangle_{\pm} = \prod_{n=1}^N (\cos\theta |\uparrow_n\rangle \pm \sin\theta |\downarrow_n\rangle) \quad \text{et} \quad \mathcal{N}_{\pm} = \pm \langle \Psi | \Psi \rangle_{\pm}. \quad (4.174)$$

La norme $\mathcal{N}_{\pm}$ se calcule assez facilement

$$\mathcal{N}_{\pm} = \sqrt{2(1 \pm \cos^N(2\theta))}, \quad (4.175)$$

et l'énergie du fondamental est donnée par

$$\sum_n \epsilon_n = -N.$$

La dégénérescence de l'état fondamental provient du fait que (4.172) possède deux solutions $\pm\theta$ et est reliée à la parité de l'état fondamental. Il faut noter que cette dégénérescence est aussi observable sur les racines du polynôme (4.110) lorsque $\lambda^2 + \gamma^2 = 1$. Comme nous l'avons vu précédemment, cette dégénérescence doit être levée pour que le fondamental soit bien défini. Nous ajoutons donc une petite composante de l'ordre de 10^{-3} au champ magnétique λ dans nos simulations numériques afin de ne pas tomber sur la ligne $\lambda^2 + \gamma^2 = 1$. Bien évidemment, il faut ajouter et non retrancher car sinon on se retrouverait dans la région $\lambda^2 + \gamma^2 < 1$ qui est le siège du phénomène d'oscillation de parité que nous avons décrit précédemment. La parité du fondamental est donc $+1$ car la fonction Δ (4.95) est négative dans la région $\lambda^2 + \gamma^2 > 1$ (voir figure 4.14). On peut donc trouver les probabilités des configurations $p_{\vec{\sigma}}$ dans l'état fondamental en développant le produit (4.174). Comme la parité est conservée dans le modèle XY, les états de configuration $|\vec{\sigma}\rangle$ avec un nombre impair de spins retournés dans le développement de l'état fondamental ne sont pas autorisés, ce qui est assuré par la combinaison $|\Psi\rangle_+$ donnée par (4.173). Seul les états avec $2k$ spins retournés sont autorisés. Par ailleurs, ces configurations possèdent le même poids

$$p_k = \frac{2 \cos^{N-2k} \theta \sin^{2k} \theta}{\sqrt{2(1 + \cos^N(2\theta))}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor \quad (4.176)$$

et il y en a autant qu'il y a de manière de choisir $2k$ éléments parmi N , c'est-à-dire C_N^{2k} .

Expression exacte de la dimension multifractale en champ factorisant L'expression des probabilités de configuration (4.176) étant connue, il est facile de calculer la dimension multifractale D_q . Le moment d'ordre q se calcule comme suit

$$P_q = \sum_{k=0}^{\left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor} \binom{N}{2k} p_k^{2q} = \frac{2^{q-1}}{(1 + \cos^N(2\theta))^q} [(\cos^{2q} \theta + \sin^{2q} \theta)^N + (\cos^{2q} \theta - \sin^{2q} \theta)^N]. \quad (4.177)$$

La dimension multifractale est définie par la limite suivante

$$D_q = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln P_q}{(1-q)N \ln 2}. \quad (4.178)$$

Pour $q > 0$ et $\cos\theta > \sin\theta$, on a

$$D_q = \frac{1}{(1-q) \ln 2} \ln (\cos^{2q} \theta + \sin^{2q} \theta). \quad (4.179)$$

La comparaison avec les résultats numériques est faite sur la figure 4.17. De plus, nous présentons l'erreur relative faite dans le calcul du moment d'ordre q

$$\delta P_q = \frac{(P_q)_{\text{num}} - (P_q)_{\text{exact}}}{(P_q)_{\text{num}}} \quad (4.180)$$

pour $q = 2, 2.5, 3.5$ avec $(P_q)_{\text{num}}$ le moment d'ordre q calculé à partir des données obtenues par la méthode de Lanczos et $(P_q)_{\text{exact}}$ obtenu par la formule (4.177).

Notons que la forme obtenue pour la dimension multifractale (4.179) est la même que celle obtenue pour la cascade binomiale (4.16) avec $m_0 = \cos^2 2\theta$. Ceci prouve la nature multifractale de l'état fondamental sur la ligne critique. La dimension multifractale asymptotique se déduit assez facilement de (4.179), on a

$$D_{\infty} = \frac{\ln \left(\frac{2\sqrt{1+\gamma}}{\sqrt{1+\gamma} + \sqrt{1-\gamma}} \right)}{\ln 2}, \quad |\gamma| < 1. \quad (4.181)$$

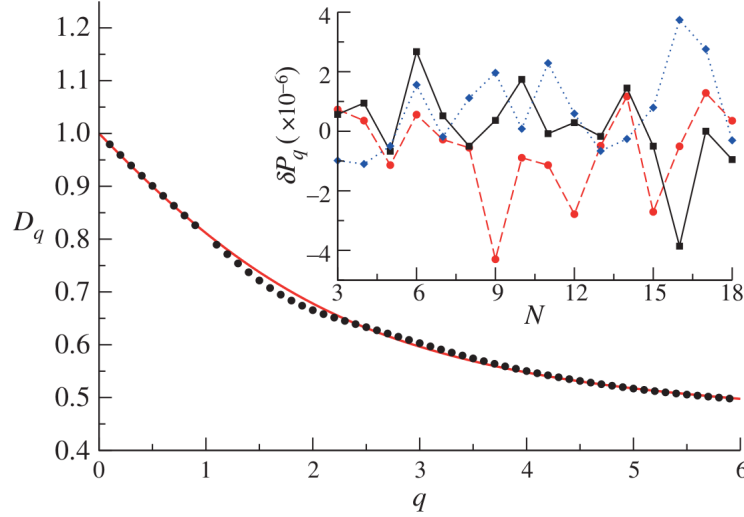


FIGURE 4.17 – Dimension multifractale du modèle XY en champ factorisant $\lambda = 0.8$ et $\gamma = 0.6$ obtenue par la méthode de Lanczos pour $N = 5 - 18$ spins (cercles noirs). En rouge, la prédiction théorique exacte (4.179) pour $\theta = \pi/6$. Encadré : erreur relative (4.180) des moments de l'état fondamental sur la ligne critique pour $q = 2$ (carrés noirs), $q = 2.5$ (cercles rouges) et $q = 3.5$ (losanges bleus).

Par exemple, pour $\gamma = 0.6$ (et donc $\lambda = \sqrt{1 - 0.6^2} = 0.8$), on a $\theta = \frac{\pi}{6}$ et il vient

$$D_\infty = 2 - \frac{\ln 2}{\ln 3} = 0.4150 \dots \quad (4.182)$$

De la même manière, on montre que

$$D_{-\infty} = \frac{\ln \left(\frac{2\sqrt{1+\gamma}}{\sqrt{1+\gamma} - \sqrt{1-\gamma}} \right)}{\ln 2}, \quad |\gamma| < 1, \quad (4.183)$$

et pour $\gamma = 0.6$ (et donc $\lambda = \sqrt{1 - 0.6^2} = 0.8$), on trouve $D_{-\infty} = 2$. Les probabilités (4.176) correspondent à la loi binomiale et au processus de la cascade binomiale que nous avons décrit précédemment [Man83]. Pour les valeurs de champ factorisant, i.e. telles que

$$\lambda^2 + \gamma^2 = 1, \quad (4.184)$$

ces probabilités se construisent facilement en utilisant un arbre binaire.

4.7 Le modèle XXZ

Le Hamiltonien de ce modèle est donné par

$$H_{XXZ} = - \sum_n (\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y + \Delta \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z). \quad (4.185)$$

Le modèle est intégrable par l'ansatz de Bethe en raison de la conservation de la magnétisation totale $S_z = \sum_n \sigma_n^z$ et possède un diagramme de phase très riche [Bet31], [YY66], [Orb58]. Nous nous intéressons ici au point combinatoire $\Delta = -\frac{1}{2}$ dont l'importance a été mise en évidence par Razumov et Stroganov qui ont montré le lien entre les coefficients $\psi_{\vec{\sigma}}$ du développement de l'état fondamental $|GS\rangle$ et les nombres A_n comptant le nombre de matrices à signes alternées [RS01, Str01].

4.7.1 Conjecture de Razumov-Stroganov

Avant d'énoncer la conjecture de Razumov-Stroganov, définissons ce qu'est une matrice à signes alternées (ASM). Une matrice à signes alternées d'ordre n est une matrice $n \times n$ dont les seuls éléments sont 0, 1 et -1 tels que :

1. la somme des éléments de chaque colonne et chaque ligne vaut $+1$,
2. les éléments non-nuls de chaque colonne et chaque ligne alternent en signe, commencent et finissent par $+1$.

Par exemple, une matrice à signes alternées d'ordre 4 est donnée par

$$\begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 & 0 \\ +1 & -1 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Il existe 42 matrices à signes alternées d'ordre 4. Le nombre de matrices à signe alternées d'ordre n est noté A_n . L'expression exacte des nombres A_n est donnée par

$$A_n = \prod_{j=0}^{n-1} \frac{(3j+1)!}{(n+j)!}. \quad (4.186)$$

La conjecture de Razumov-Stroganov stipule que pour des chaînes avec un nombre impair de spins $N = 2R + 1$ [RS01, Str01]

- l'énergie du fondamental est donné par $-3N/2$,
- le plus grand coefficient dans le développement de l'état fondamental $|GS\rangle$ est celui de l'état de Néel (plus les N permutations de cet état) et on a

$$\psi_{\text{Neel}} = \psi_{\text{max}} = \frac{2^R}{\sqrt{3^R}} \prod_{j=1}^R \frac{(2j-1)}{(3j-1)}. \quad (4.187)$$

- la composante de poids minimum du développement de l'état fondamental $|GS\rangle$ est celle avec $N/2$ spins consécutifs *up* et l'autre moitié *down*. Le poids de cette configuration est donné par

$$\psi_{\text{min}} = \frac{\psi_{\text{max}}}{A_R}, \quad (4.188)$$

avec A_R le nombre de matrices à signes alternées d'ordre R (voir formule 4.186).

- la somme des composantes $\psi_{\vec{\sigma}}$ est égale à

$$\sum_{\{\vec{\sigma}\}} \psi_{\vec{\sigma}} = 3^{R/2}. \quad (4.189)$$

Dans la suite, nous utilisons ces résultats qui ont été démontrés dans [CS11] par des méthodes de combinatoire énumérative afin d'obtenir des résultats sur la dimension multifractale du modèle XXZ au point $\Delta = -\frac{1}{2}$.

4.7.2 Dimensions multifractales asymptotiques

La connaissance de ψ_{min} et ψ_{max} permet de remonter aux dimensions multifractales asymptotiques.

Dimension multifractale D_∞

Celle-ci est donnée par

$$D_\infty = -\frac{\ln \psi_{\text{max}}}{R \ln 2}, \quad R \rightarrow \infty. \quad (4.190)$$

Le comportement asymptotique de $\ln \psi_{\text{max}}$ se calcule facilement

$$\ln \psi_{\text{max}} = 2R \ln 2 - \frac{3R}{2} \ln 3 - \frac{\ln R}{6}. \quad (4.191)$$

Par conséquent, on a

$$D_\infty = \frac{3 \ln 3}{2 \ln 2} - 2 + \mathcal{O}\left(\frac{\ln R}{R}\right). \quad (4.192)$$

Dimension multifractale $D_{-\infty}$

Utilisant (4.188) et la définition de la dimension multifractale, on a

$$D_{-\infty} = D_{\infty} + \frac{\ln A_R}{R \ln 2}, \quad R \rightarrow \infty. \quad (4.193)$$

On peut montrer que, dans la limite $R \rightarrow \infty$, le nombre de matrices à signes alternées se comporte comme

$$A_R \sim e^{\alpha R^2} \quad \text{avec} \quad \alpha = \ln \left(\frac{3\sqrt{3}}{4} \right). \quad (4.194)$$

Le comportement quadratique des A_R dans la limite asymptotique entraîne que la dimension $D_{-\infty}$ diverge pour ce modèle. Les moments d'ordre négatif nécessitent donc un "scaling" différent. Ce comportement quadratique est relié à la probabilité de formation d'une suite de n spins alignés dans la même direction sur la chaîne de spins [KMST02, KLNS03].

4.7.3 Dimension multifractale en $q = 1/2$

On peut aussi obtenir la dimension multifractale en $q = 1/2$, en utilisant (4.189), on a

$$D_{1/2} = \frac{\ln 3}{2 \ln 2} \simeq 0.7925. \quad (4.195)$$

Résultats numériques

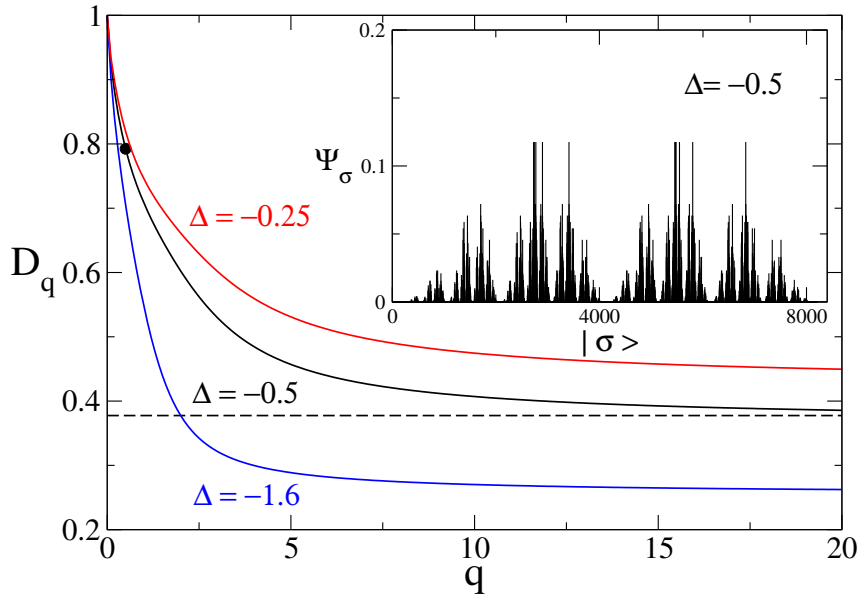


FIGURE 4.18 – Dimensions multifractales du modèle XXZ obtenu par diagonalisation exacte de chaîne de spins de taille $N = 3 - 13$. En rouge : $\Delta = -0.25$, en noir $\Delta = -0.5$ et en bleu $\Delta = -1.6$. La ligne pointillée correspond à la prédiction théorique (4.192) pour D_{∞} et le point noir est la valeur en $1/2$ de la dimension fractale (4.195). Encadré : État fondamental pour une chaîne de $N = 13$ spins au point $\Delta = -0.5$.

La méthode pour l'obtention des dimensions fractales est exactement la même que celle explicitée plus haut à la seule différence que les chaînes avec un nombre de spins pairs et impairs doivent maintenant être traitées séparément. Nous utilisons trois types de fonctions pour ajuster l'entropie de Rényi avec le même nombre de paramètres

$$\begin{aligned} f_1(z) &= a_0 + a_1 z + \frac{a_2}{z} + \frac{a_3}{z^2} + \frac{a_4}{z^3}, \\ f_2(z) &= a_0 + a_1 z + \frac{a_2}{z} + a_3 \ln z + \frac{a_4 \ln z}{z}, \\ f_3(z) &= a_0 + a_1 z + \frac{a_2}{z} + a_3 \ln z + \frac{a_4}{z^2}. \end{aligned} \quad (4.196)$$

Les deux dernières formes d'ajustement donnent de meilleurs résultats que la première dans ce modèle (voir [AB12, AB14a] pour plus de détails). Les résultats numériques donnent par exemple $D_{1/2} = 0.7949$ qui est en bon accord avec la prédiction (4.195).

4.8 Le modèle XYZ

Le Hamiltonien est donné par

$$H_{XYZ} = - \sum_n \left(\frac{1+\gamma}{2} \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \frac{1-\gamma}{2} \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y + \frac{\Delta}{2} \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z + \lambda \sigma_n^z \right), \quad (4.197)$$

γ correspond ici à un facteur d'anisotropie et λ est un champ dans la direction transverse. En champ nul, la forme des fonctions d'onde pour le fondamental a été trouvée dans [Bax07]. Nous présentons ici les résultats numériques pour les dimensions fractales et ne discutons la théorie que pour le cas particulier du champ factorisant. De la même manière que pour le modèle XXZ, on peut montrer qu'au point

$$\lambda_f = \sqrt{(1-\Delta)^2 - \gamma^2}, \quad (4.198)$$

la dimension multifractale est donnée par un processus de cascade binomiale et

$$D_q = \frac{1}{(1-q) \ln 2} \ln (\cos^{2q} \theta + \sin^{2q} \theta), \quad (4.199)$$

avec cette fois-ci

$$\cos^2 2\theta = \frac{1-\gamma-\Delta}{1+\gamma-\Delta}. \quad (4.200)$$

Voir les articles [AB12, AB14a] pour de plus amples détails.

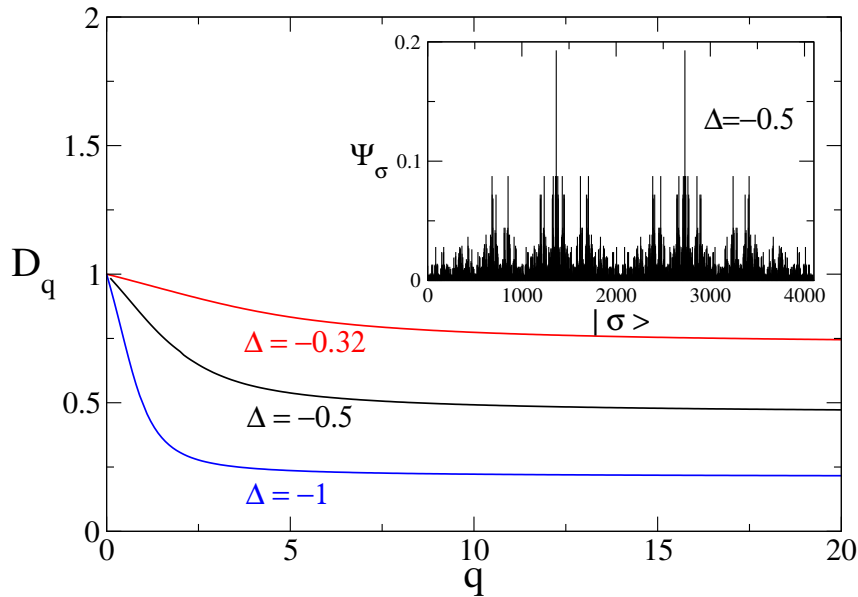


FIGURE 4.19 – Dimensions multifractales du modèle XYZ en champ nul et avec un facteur d'anisotropie $\gamma = 0.6$. En rouge : $\Delta = -0.32$, en noir $\Delta = -0.5$ et en bleu $\Delta = -1$. Encadré : État fondamental pour une chaîne de $N = 12$ spins au point $\Delta = -0.5$.

4.9 Conclusion et perspectives

Les fonctions d'onde constituent les objets fondamentaux des systèmes quantiques : leur structure est assez compliquée et n'est pas très bien comprise pour la plupart des systèmes à N corps. En raison de la croissance exponentielle de la taille de l'espace de Hilbert avec le nombre de particules, l'étude des vecteurs propres est

une tâche très difficile, non seulement du point de vue analytique mais aussi du point de vue numérique. Il n'existe pas de classement naturel pour les vecteurs de base de ces modèles, et même dans le cas simple de la représentation binaire (pour les chaînes de spins $S = 1/2$), nous observons des comportements irréguliers et très complexes.

Afin d'analyser ces comportements irréguliers, nous avons introduit le formalisme multifractal et avons démontré qu'il s'agissait du formalisme adéquat pour la description du comportement des fonctions d'onde fondamentales des chaînes de spins [AB12, AB14a]. La dimension multifractale est l'objet central dans le formalisme multifractal. Cette quantité permet d'obtenir un bon indicateur du degré de localisation de la fonction d'onde dans l'espace de Hilbert.

Nous avons aussi montré l'analogie avec le formalisme thermodynamique sur des pseudo-énergies associées aux composantes de l'état fondamental (voir table 4.1). Dans ce formalisme, la dimension multifractale D_q est reliée à l'énergie libre à la pseudo-température $1/q$. Il est connu que, pour les Hamiltoniens classiques avec interactions à courte portée, l'énergie libre existe dans la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$. Dans le cas des dimensions multifractales, il n'existe pas de preuve de ce résultat : nos résultats numériques pour les modèles de spins avec interaction à courte portée semblent cependant indiquer que celles-ci sont bien définies, même dans la limite $N \rightarrow \infty$.

Pour des valeurs particulières des paramètres, nous avons démontré de manière rigoureuse la nature multifractale de l'état fondamental dans certains modèles de chaînes de spins en montrant que les coefficients des fonctions d'onde fondamentales s'obtenaient par une cascade binomiale. L'obtention de résultats exacts sur la dimension multifractale n'est généralement pas possible et on se contente en pratique de résultats numériques.

Nous avons étudié (pratiquement) tous les modèles de spins standards $1D$. Mettant en oeuvre des méthodes numériques et analytiques, nous avons, entre autres, démontré que l'état fondamental de tous ces modèles était multifractal dans la base naturelle des états propres des σ^z avec en général une dimension fractale non triviale [AB12, AB14a]. La multifractalité des fonctions d'onde des systèmes quantiques à N corps en interaction semblent être une propriété tout à fait générique et nous conjecturons que les fonctions d'onde de la plupart des systèmes quantiques à N corps en interaction sont multifractales.

Une question naturelle que l'on peut se poser ici est de savoir si les états excités sont eux aussi multifractals. Comme nous l'avons remarqué à plusieurs endroits, la détermination exacte des fonctions d'onde des problèmes à plusieurs corps n'est généralement pas possible. Pour les modèles chaotiques, la complexité des fonctions d'onde est telle que l'on peut les considérer comme des quantités aléatoires⁶. Une approche statistique devient donc nécessaire pour la description des propriétés des fonctions d'onde excitées. L'article ci-dessous présente quelques résultats récents que nous avons obtenu sur les fonctions d'onde du modèle d'Ising non-intégrable en champ transverse et longitudinal. Nous nous restreignons au régime chaotique avec des champs transverses et longitudinaux du même ordre de grandeur que le terme de retournement de spins. La nature chaotique du modèle dans cette limite de couplage de constante a été démontrée au chapitre 3 en étudiant la statistique spectrale des niveaux d'énergie. Dans la limite thermodynamique, les coefficients des fonctions d'onde sont distribués suivant une loi gaussienne dans le centre du spectre. Les paramètres de la gaussienne peuvent être calculés exactement en utilisant le Hamiltonien. Cependant, la limite thermodynamique n'est pas atteignable en pratique et on observe des différences notables entre les résultats numériques pour des chaînes de spins constitué d'une dizaine de spins et l'approximation asymptotique. Nous nous sommes donc intéressé au différent type de corrections possibles. Les corrections à la loi normale peuvent être obtenues en incorporant les moments d'ordre supérieurs du Hamiltonien. De plus, comme on travaille dans les secteurs d'impulsion fixé⁷, il peut arriver que les coefficients du développement des fonctions d'onde soient complexes et certains nuls, menant à une statistique analogue mais avec des subtilités liées à la structure des sous-espaces de symétrie. Par exemple, afin de normaliser les distributions de probabilité des coefficients des fonctions d'onde, il est nécessaire de connaître la taille des sous-espace d'impulsion fixé. Les détails des calculs ainsi que les résultats numériques sont présentés dans le deuxième article ci-dessous qui est dans sa phase terminale d'écriture.

6. Notons que cette approche est exactement la même que celle adoptée en théorie des matrices aléatoires.

7. Si on ne séparait pas les différents secteurs de symétries alors il existerait des dégénérescences dans le spectre d'énergie et les vecteurs propres ne serait pas bien définis.

Articles III

Multifractality of eigenfunctions in spin chains

Multifractality of eigenfunctions in spin chains

Y. Y. Atas and E. Bogomolny

Université Paris-Sud, CNRS, LPTMS, UMR8626, 91405 Orsay, France

(Received 21 May 2012; published 3 August 2012)

We investigate different one-dimensional quantum spin- $\frac{1}{2}$ chain models, and by combining analytical and numerical calculations we prove that their ground state wave functions in the natural spin basis are multifractals with, in general, nontrivial fractal dimensions.

DOI: [10.1103/PhysRevE.86.021104](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.86.021104)

PACS number(s): 05.50.+q, 75.10.Jm, 75.10.Pq

I. INTRODUCTION

One-dimensional quantum spin chains are among the oldest and most investigated fundamental models in physics. Introduced as toy models of magnetism [1], they quickly became a paradigm of quantum integrable models (see, e.g., [2–5]). A prototypical example is the XYZ Heisenberg model [1] for N spins- $\frac{1}{2}$ in external fields with periodic boundary conditions,

$$\mathcal{H} = - \sum_{n=1}^N \left[\frac{1+\gamma}{2} \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \frac{1-\gamma}{2} \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y + \frac{\Delta}{2} \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z + \lambda \sigma_n^z + \alpha \sigma_n^x \right], \quad (1)$$

and its various specifications for different values of parameters. $\sigma_n^{x,y,z}$ are the Pauli matrices at site n .

In the natural basis of z components of each spin, $|\vec{\sigma}\rangle = |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle$, where $\sigma_j = \pm 1$, any Hamiltonian of N spins- $\frac{1}{2}$ is represented by an $M \times M$ matrix with dimension $M = 2^N$. Many different methods were developed to determine the exact spectra of such matrices [2–5]. The calculation of eigenfunctions is more involved. A wave function of N spins- $\frac{1}{2}$ in the spin- z basis can be written as

$$\Psi = \sum_{\vec{\sigma}} \Psi_{\vec{\sigma}} |\vec{\sigma}\rangle, \quad (2)$$

where the summation is taken over all $M = 2^N$ configurations with $\sigma_j = \pm 1$. In general, coefficients $\Psi_{\vec{\sigma}}$ can be found only after the matrix diagonalization, which for large N is a hard numerical problem. Even in integrable cases, eigenfunctions of spin chains look erratic (cf. the figures below) and their structure is not well understood.

The purpose of this article is to prove that ground state (GS) wave functions for different one-dimensional spin chain models are multifractals in the spin- z basis.

II. MULTIFRACTALITY

Multifractality is a general notion introduced to characterize quantitatively irregular structures appearing in different problems, such as turbulence, dynamical systems, geophysics, etc. [6–8]. Wave function multifractality attracted wide attention when it was recognized that it appears at the point of the metal-insulator transition (MIT) in the three-dimensional Anderson model [9] (cf. [10]).

For eigenfunctions such as that in (2), one uses the following definition (cf. [10]). Let $S_R(q, M)$ be the Rényi entropy for an

eigenfunction (2) of a matrix of finite size M ,

$$S_R(q, M) = - \frac{1}{q-1} \ln \left(\sum_{\vec{\sigma}} |\Psi_{\vec{\sigma}}|^{2q} \right), \quad (3)$$

with normalized coefficients $\Psi_{\vec{\sigma}}$, $\sum_{\vec{\sigma}} |\Psi_{\vec{\sigma}}|^2 = 1$.

Fractal dimensions, D_q , are defined from the behavior of the Rényi entropy (3) in the limit $M \rightarrow \infty$ [10],

$$D_q = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{S_R(q, M)}{\ln M}. \quad (4)$$

The case in which D_q is a nonlinear function of q corresponds to a multifractal irregular behavior.

Fractal dimensions (4) give a concise description of eigenfunction moments in the limit of large dimensionality of the Hilbert space and serve as simple indicators of wave function spreading in different scales. The multifractal formalism is especially important in many-body problems where an exponentially large number of components renders the investigation difficult and not transparent. It seems that the notion of multifractality in many-body problems was overlooked in previous studies. For example, the Rényi and Shannon entropies are calculated for GS wave functions of certain spin chains in [11–14], but terms linear in $\ln M$ which determine D_q in (4) were regularly ignored and only next-to-leading terms have been investigated, as is usual in conformal field theories. To the best of our knowledge, only a recent paper [15] briefly mentioned the existence of multifractality in a spin model.

The simplest method to find fractal dimensions is the direct numerical calculation of the GS wave function for a different number of spins and a subsequent extrapolation of the Rényi entropy for large M . Definition (4) is well suited for positive q . For many problems (but not for all), fractal dimensions can be calculated also for negative q [16,17]. Of course, if certain coefficients in (2) are zero due to an exact symmetry, they are not included in the calculation of the Rényi entropy (3) for $q \leq 0$.

In what follows, we investigate various specifications of the Heisenberg model (1), and by combining numerical and analytical methods we demonstrate that the multifractality of the GS is a universal property of all of them. We choose $\gamma \geq 0$ and $\alpha \geq 0$ to ensure that off-diagonal terms of Hamiltonian matrices (1) are nonpositive, which, according to the Perron-Frobenius theorem, implies that coefficients $\Psi_{\vec{\sigma}}$ in (2) for the GS wave function are non-negative. Other parameters are such that GS wave functions of the XY models

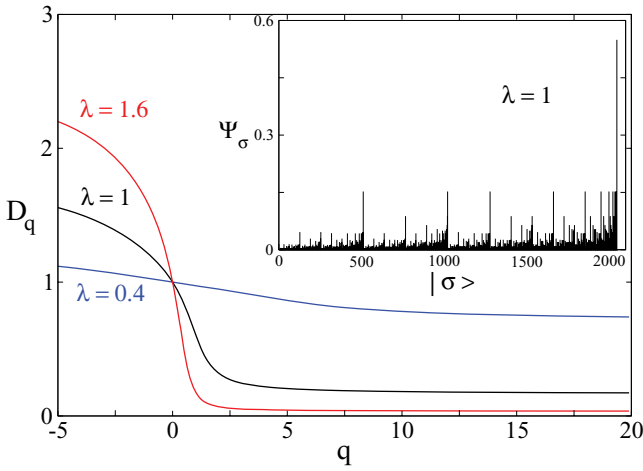


FIG. 1. (Color online) Fractal dimensions of GS for the quantum Ising model. Red line: $\lambda = 1.6$, black line: $\lambda = 1$, blue line: $\lambda = 0.4$. Inset: GS coefficients for $\lambda = 1$ and $N = 11$. The abscissa axis here and in other figures is the integer binary code for $\vec{\sigma}$, $x = \sum_{n=1}^N 2^{n-2}(1 + \sigma_n)$.

(with $\Delta = 0$) are ferromagnetic and for the XYZ models they are antiferromagnetic.

III. QUANTUM ISING MODEL

The quantum Ising model in a transverse field [18] is a standard model of quantum phase transitions [19]. It corresponds to the Hamiltonian (1) with $\Delta = \alpha = 0$ and $\gamma = 1$. Its spectrum can be found analytically by the Jordan-Wigner transformation [3], and coefficients $|\Psi_{\vec{\sigma}}|^2$ are given by the determinant of $N \times N$ matrices [3,12].

Fractal dimensions of the GS wave function for this model computed numerically from a linear extrapolation of the Rényi entropy with $N = 3-11$ are presented in Fig. 1 for a few values of transverse field λ . The curves of D_q as a function of q for all models have the same characteristic form as for other fractal measures [7]. In particular, when $q \rightarrow \pm\infty$, they tend to well defined limits $D_{\pm\infty}$.

Generalizing the results of [12], one gets the exact expressions for limiting values $D_{\pm\infty}$ and for $D_{1/2}$,

$$D_{\pm\infty}(\lambda) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi \ln 2} \int_0^\pi \ln \left[1 \pm \frac{\lambda - \cos u}{\sqrt{R(\lambda, u)}} \right] du, \quad (5)$$

$$D_{1/2}(\lambda) = 1 - D_\infty\left(\frac{1}{\lambda}\right), \quad R(\lambda, u) = 1 - 2\lambda \cos u + \lambda^2.$$

These formulas prove that fractal dimensions of the quantum Ising model are nontrivial. In Fig. 2, these exact expressions are plotted together with numerically calculated points for different λ . $D_{\pm\infty}$ are obtained by a fit $D_{\pm\infty} + a/q + b/q^2$ for large q parts of curves similar to Fig. 1. The good agreement between Eqs. (5) and numerics shows that although we obtain fractal dimensions from a relatively small number of spins, our results are reliable.

The above curves are qualitatively the same for the noncritical and critical (that is, $\lambda = 1$) quantum Ising model. Nevertheless, as illustrated in the inset of Fig. 2, the sum of

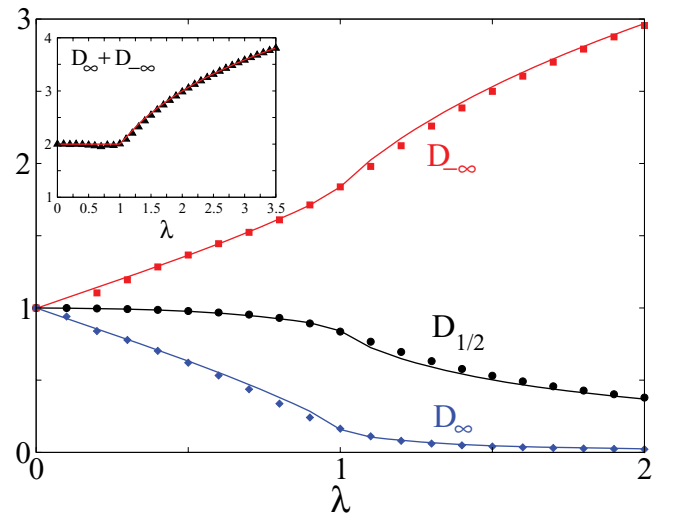


FIG. 2. (Color online) Exact fractal dimensions (5) for the quantum Ising model: D_∞ [blue (lower) line], $D_{1/2}$ [black (middle) line], and $D_{-\infty}$ [red (upper) line]. Results of numerical calculations are indicated by symbols of the same color. Inset: $D_\infty + D_{-\infty}$ calculated numerically (black triangles) in comparison with Eq. (6) (red solid line).

D_∞ and $D_{-\infty}$ has clear singularity in the critical point in accordance with the relation

$$D_{-\infty}(\lambda) + D_\infty(\lambda) = \begin{cases} 2, & |\lambda| < 1, \\ 2 + \frac{\ln|\lambda|}{\ln 2}, & |\lambda| > 1, \end{cases} \quad (6)$$

which follows from (5). This means that criticality can be observed in fractal dimensions of the GS.

IV. XY MODEL

The XY model is a specification of (1) with $\Delta = \alpha = 0$ and $\gamma \neq 1$. Similar to the quantum Ising model, this model is also integrable by the Jordan-Wigner transformation [3,12], but the structure of its GS is more complicated. An interesting special case is $\lambda = \lambda_f$, where $\lambda_f = \sqrt{1 - \gamma^2}$. It is known [20] that at that field the XY model has two exact factorized GS wave functions,

$$\Psi = \prod_{n=1}^N (\cos \theta |1\rangle_n \pm \sin \theta |-1\rangle_n), \quad \cos^2 2\theta = \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma}. \quad (7)$$

For states with definite parity and $\lambda = \lambda_f$, fractal dimensions are described by a formula

$$D_q = - \frac{\ln(\cos^{2q} \theta + \sin^{2q} \theta)}{(q - 1) \ln 2} \quad (8)$$

indicated for $\gamma = 0.6$ and $\lambda = 0.8$ by the dashed black line in Fig. 3. This example proves that at least at the factorizing field, fractal dimensions of the GS wave function do exist and correspond to the well-investigated case of binomial measures [6].

As for $\lambda^2 + \gamma^2 < 1$ there exist many crossings of lowest states with different parity, for numerical calculations (performed as in the Ising model) we choose λ and γ outside the

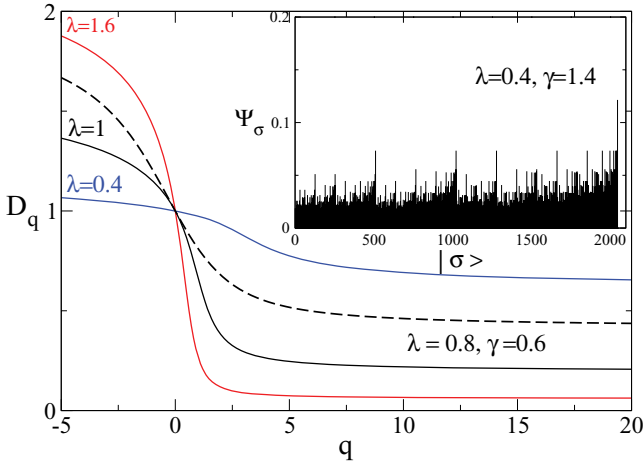


FIG. 3. (Color online) Fractal dimensions of GS for the XY model with anisotropy $\gamma = 1.4$. Red line: $\lambda = 1.6$, black line: $\lambda = 1$, blue line: $\lambda = 0.4$. Dashed black line shows for comparison the exact fractal dimensions (8) for $\lambda = 0.8$ and $\gamma = 0.6$. Inset: GS coefficients for $\lambda = 0.4$, $\gamma = 1.4$, and $N = 11$.

unit circle, $\lambda^2 + \gamma^2 > 1$. The results are presented in Fig. 3 and are qualitatively similar to the Ising model.

One may argue that the limiting values D_∞ and $D_{-\infty}$ as in the quantum Ising model should correspond to configurations with, respectively, all spins up and all spins down, and, consequently, they are expressed similar to (5) as

$$D_\pm(\lambda, \gamma) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi \ln 2} \int_0^\pi \ln \left[1 \pm \frac{\lambda - \cos u}{\sqrt{R_-(\lambda, \gamma, u)}} \right] du \quad (9)$$

with $R_-(\lambda, \gamma, u) = (\lambda - \cos u)^2 + \gamma^2 \sin^2 u$. But for small λ , the minimal contribution is instead given by the antiferromagnetic Néel configuration with alternating spins, $\sigma_n = (-1)^n$. Using the asymptotics of the block Toeplitz matrices [21], we get

$$D_{\text{Néel}}(\lambda, \gamma) = \frac{3}{4} - \frac{1}{2\pi \ln 2} \int_0^{\pi/2} \ln \left[1 - \frac{\lambda^2 + \gamma^2 - (1 + \gamma^2) \cos^2 u}{\sqrt{R_+(\lambda, \gamma, u) R_-(\lambda, \gamma, u)}} \right] du, \quad (10)$$

where $R_+(\lambda, \gamma, u) = (\lambda + \cos u)^2 + \gamma^2 \sin^2 u$. This result for $\gamma = 1.4$ is presented in Fig. 4 by the black line. When $D_{\text{Néel}} > D_-$, $D_{-\infty} = D_{\text{Néel}}$, otherwise $D_{-\infty} = D_-$. For $\gamma = 1.4$, these curves intersect at $\lambda \approx 0.4982$, and $D_{-\infty}$ has the form indicated in Fig. 4 by solid blue and black lines. Numerical results agree well with this prediction.

V. ISING MODEL IN TRANSVERSE AND LONGITUDINAL FIELDS

The Ising model in transverse and longitudinal fields is obtained by adding to the quantum Ising model a longitudinal field α . For nonzero α , the only known integrable case corresponds to $\lambda = 1$ [22]. This model has recently attracted a great deal of attention as certain consequences of its integrability have been checked experimentally in the cobalt niobate ferromagnet [23]. In Fig. 5, the fractal dimensions for a few values of both fields are presented.

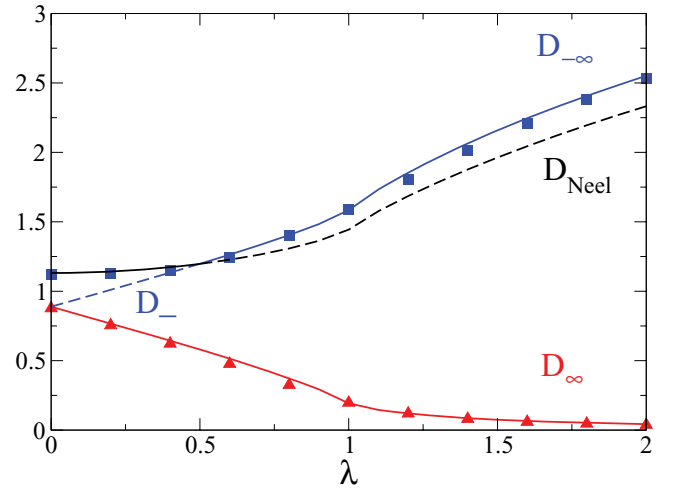


FIG. 4. (Color online) Asymptotic fractal dimensions for the XY model with anisotropy $\gamma = 1.4$ vs transverse field. Red and blue lines indicate $D_\pm$ in (9). Black line is the contribution of the Néel configuration (10). When contributions become subdominant, they are indicated by dashed lines of the same color. Blue squares and red triangles are, respectively, $D_{-\infty}$ and D_∞ calculated as for the Ising model.

VI. XXZ MODEL

The XXZ model in zero fields is a particular case of the Heisenberg model (1) with $\gamma = \lambda = \alpha = 0$ and $\Delta \neq 0$. Due to the conservation of the z component of the total spin, $S_z = \sum_n \sigma_n^z$, its Hamiltonian can be diagonalized in subspace with fixed S_z . The model is soluble by the coordinate Bethe ansatz [2,24,25] and has a rich phase diagram (see, e.g., [4]).

As a reference, we use $\Delta = -\frac{1}{2}$, called the combinatorial point. From the Razumov-Stroganov conjecture [26] proved in [27], it follows that at such Δ and odd $N = 2R + 1$ the following statements are valid: (i) the GS energy is $-3N/4$, (ii) the largest coefficient in the expansion (2) (the one for the

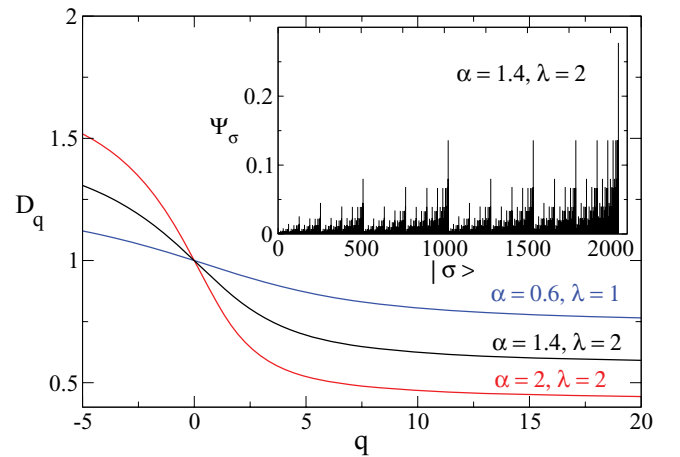


FIG. 5. (Color online) Fractal dimensions for the quantum Ising model in transverse (λ) and longitudinal (α) fields. Red line: $\alpha = 2$, $\lambda = 2$; black line: $\alpha = 1.4$, $\lambda = 2$; blue line: $\alpha = 0.6$, $\lambda = 0.4$. Inset: GS coefficients for $\alpha = 1.4$, $\lambda = 2$, and $N = 11$.

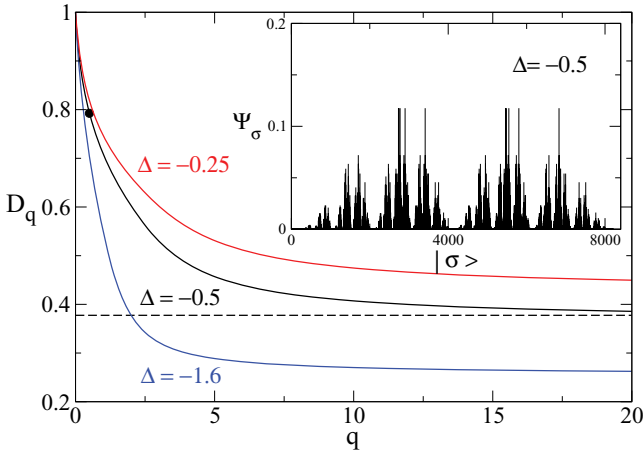


FIG. 6. (Color online) Fractal dimensions for the XXZ model in zero fields. Red line: $\Delta = -0.25$, black line: combinatorial point $\Delta = -0.5$, blue line: $\Delta = -1.6$. Inset: GS coefficients for $\Delta = -0.5$ and $N = 13$. Dashed line indicates the theoretical prediction for D_∞ (12) at $\Delta = -0.5$. Black circle is the value of $D_{1/2}$ (12) at this point.

Néel configuration) equals

$$\Psi_{\max}^{-1} = \frac{3^{R/2}}{2^R} \frac{2 \times 5 \cdots (3R-1)}{1 \times 3 \cdots (2R-1)}, \quad (11)$$

(iii) the smallest coefficient corresponding to one half consecutive spins up and the other half spins down is $\Psi_{\min}^{-1} = \Psi_{\max}^{-1} A_R$, and (iv) $\sum_{\vec{\sigma}} \Psi_{\vec{\sigma}} = 3^{R/2}$. Here A_R is the number of alternating sign matrices [28].

These formulas prove that for $\Delta = -\frac{1}{2}$, fractal dimensions D_∞ and $D_{1/2}$ are explicitly known,

$$D_\infty = \frac{3 \ln 3}{2 \ln 2} - 2 \approx 0.377, \quad D_{1/2} = \frac{\ln 3}{2 \ln 2} \approx 0.792. \quad (12)$$

When $R \rightarrow \infty$, $\ln A_R = R^2 \ln(3\sqrt{3}/4) + O(R)$. Such quadratic in N behavior is a particular case of the emptiness formation probability of a string of n aligned spins with $n \sim N$ [29]. This asymptotics means that negative moments of the GS wave function in the antiferromagnetic case require a scaling different from (4) and hence will not be considered here. The fractal dimensions for a few values of parameter Δ are presented in Fig. 6. The numerical calculations were performed by extrapolation of the Rényi entropy separately for odd and even $N = 3-13$. With available precision, fractal dimensions for odd and even N are the same, but subleading terms in the Rényi entropy (3) are different.

VII. XYZ MODEL

The XYZ model differs from the XXZ model by anisotropy $\gamma \neq 0$ in the (x, y) plane. In zero fields, its GS wave function has been found in [5]. A soluble example with a factorized GS (7) is $\alpha = 0$, $\lambda = \lambda_f$ [20], where

$$\lambda_f = \sqrt{(1-\Delta)^2 - \gamma^2}, \quad \cos^2 2\theta = \frac{1-\gamma-\Delta}{1+\gamma-\Delta}. \quad (13)$$

At this field, the GS wave function corresponds to the binomial measure, and fractal dimensions are given by (8).

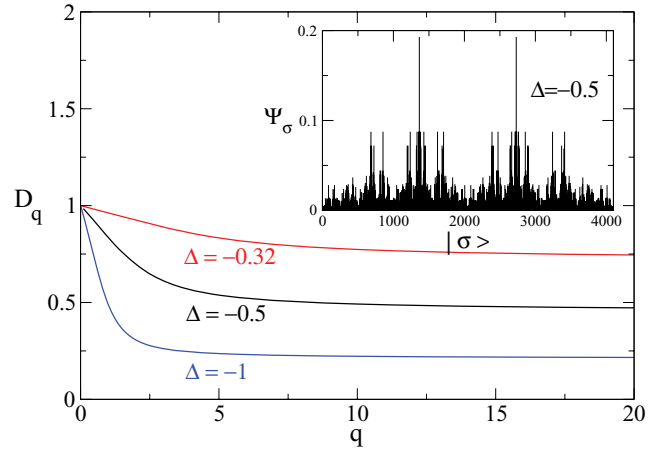


FIG. 7. (Color online) Fractal dimensions for the XYZ model with anisotropy $\gamma = 0.6$. Red line: combinatorial point $\Delta = -0.32$, black line: $\Delta = -0.5$, blue line: $\Delta = -1$. Inset: GS coefficients for $\Delta = -0.5$, $\gamma = 0.6$, and $N = 12$.

The combinatorial point for the XYZ model in zero fields at which additional information about the GS is known (or conjectured) is $\Delta = (\gamma^2 - 1)/2$ [30]. In Fig. 7, we present the fractal dimension in the zero-field XYZ model with $\gamma = 0.6$ for a few values of Δ including the combinatorial point. Qualitatively, the curves are similar to the XXZ model and to D_q with positive q for the XY models.

VIII. SUMMARY

We perform systematic studies of practically all standard one-dimensional spin- $\frac{1}{2}$ models and demonstrate that their ground state wave functions are multifractals in the natural spin- z basis with, in general, nontrivial fractal dimensions. For special values of parameters and/or certain dimensions, we get exact analytical formulas which prove rigorously the existence of fractal dimensions. In other cases, we rely on numerical calculations. The multifractality in spin chains is a robust and universal phenomenon. It exists for integrable and nonintegrable models, for ferromagnetic and antiferromagnetic states, as well as for critical and noncritical systems. Nevertheless, such a property is nontrivial and not automatic. If, e.g., one generates coefficients randomly, the result, in general, is not multifractal.

A common point of these models is that their $M \times M$ Hamiltonian matrix in each row and column has only $K \sim \ln M$ nonzero matrix elements of the same order. This specific form resembles a tree structure with branching number $K \ll M$. As $K \rightarrow \infty$ when $M \rightarrow \infty$ and on a tree with a large branching number (with other parameters fixed), the Anderson localization is unlikely [31,32] as states are delocalized. On the other hand, the full ergodicity on a tree is, in general, also improbable [32]. The remaining possibility corresponds to delocalized but not ergodic states, i.e., to multifractality, which may explain its ubiquity.

Multifractality in spin chains seems to be of a different origin than in the Anderson model at the MIT point [9,10] (or in critical random banded matrices which are the preferred toy models of wave function multifractality [9,33]). In such critical

models, the multifractality is related to a subtle interplay between spreading and disorder (i.e., criticality). On the contrary, in spin- $\frac{1}{2}$ chains it reflects the complexity of the internal structure of 2^N -dimensional space $\{0, 1\}^N$ when $N \rightarrow \infty$. The fact that explicitly known functions like (7) correspond to multifractal measures may seem strange, but properties of large-dimensional spaces are sometimes counterintuitive (see, e.g., the concentration of measure in such spaces [34]).

The above arguments are not restricted to one dimension and/or spin chains but can be applied to various many-body problems with local interactions, and we conjecture that

multifractality is a generic property of a large class of such models.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors are greatly indebted to O. Giraud and G. Roux for numerous useful comments and valuable help in performing numerical calculations. We thank B. Altschuler for fruitful discussions, O. Giraud for a careful reading of the manuscript, and G. Roux for pointing out Ref. [15]. One of the authors (Y.Y.A.) was supported by the CFM Foundation.

-
- [1] W. Heisenberg, *Z. Phys.* **49**, 619 (1928).
 - [2] H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
 - [3] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Ann. Phys. (NY)* **16**, 407 (1961).
 - [4] D. C. Mattis, *The Many Body Problem* (World Scientific, Singapore, 1994).
 - [5] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic, New York, 1982).
 - [6] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (Freeman, New York, 1982).
 - [7] T. C. Halsey, M. H. Jensen, L. P. Kadanoff, I. Procaccia, and B. I. Shraiman, *Phys. Rev. A* **33**, 1141 (1986).
 - [8] H. E. Stanley and P. Meakin, *Nature (London)* **335**, 405 (1988).
 - [9] B. I. Shklovskii, B. Shapiro, B. R. Sears, P. Lambrianides, and H. B. Shore, *Phys. Rev. B* **47**, 11487 (1993).
 - [10] A. D. Mirlin and F. Evers, *Phys. Rev. B* **62**, 7920 (2000).
 - [11] J.-M. Stéphan, S. Furukawa, G. Misguich, and V. Pasquier, *Phys. Rev. B* **80**, 184421 (2009).
 - [12] J.-M. Stéphan, G. Misguich, and V. Pasquier, *Phys. Rev. B* **82**, 125455 (2010); **84**, 195128 (2011).
 - [13] M. P. Zaletel, J. H. Bardarson, and J. E. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 020402 (2011).
 - [14] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 227902 (2003); J. I. Latorre, E. Rico, and G. Vidal, *Quantum. Inf. Comput.* **4**, 48 (2004).
 - [15] J. Rodriguez-Laguna *et al.*, *New J. Phys.* **14**, 053028 (2012).
 - [16] B. B. Mandelbrot, *Physica A* **163**, 306 (1990).
 - [17] R. Riedi, *J. Math. Anal. Appl.* **189**, 462 (1995).
 - [18] P. Pfeuty, *Ann. Phys. (NY)* **57**, 79 (1970).
 - [19] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, New York, 1999).
 - [20] J. Kurmann, H. Thomas, and G. Müller, *Physica A* **112**, 235 (1982); G. Müller and R. E. Shrock, *Phys. Rev. B* **32**, 5845 (1985).
 - [21] H. Widom, *Proc. Am. Math. Soc.* **50**, 167 (1975).
 - [22] A. B. Zamolodchikov, *Int. J. Mod. Phys. A* **4**, 4235 (1989).
 - [23] R. Coldea *et al.*, *Science* **327**, 177 (2010).
 - [24] C. N. Yang and C. P. Yang, *Phys. Rev.* **150**, 321 (1966).
 - [25] R. Orbach, *Phys. Rev.* **112**, 309 (1958).
 - [26] A. V. Razumov and Yu. G. Stroganov, *J. Phys. A* **34**, 3185 (2001).
 - [27] L. Cantini and A. Sportiello, *J. Comb. Theory, Ser. A* **118**, 1549 (2011).
 - [28] D. Zeilberger, *Electron. J. Comb.* **3**, R13 (1996).
 - [29] N. Kitanine *et al.*, *J. Phys. A* **35**, L753 (2002); V. E. Korepin *et al.*, *Phys. Lett. A* **312**, 21 (2003).
 - [30] A. V. Razumov and Yu. G. Stroganov, *Theor. Math. Phys.* **164**, 977 (2010).
 - [31] R. Abou-Chacra, D. J. Thouless, and P. W. Anderson, *J. Phys. C* **6**, 1734 (1973).
 - [32] B. L. Altshuler, Y. Gefen, A. Kamenev, and L. S. Levitov, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2803 (1997).
 - [33] A. D. Mirlin, Y. V. Fyodorov, F. M. Dittes, J. Quezada, and T. H. Seligman, *Phys. Rev. E* **54**, 3221 (1996).
 - [34] D. P. Dubhashi and A. Panconesi, *Concentration of Measure for the Analysis of Randomized Algorithms* (Cambridge University Press, New York, 2009).

Quantum Ising model in transverse and longitudinal fields: chaotic wave functions

Y. Y. Atas and E. Bogomolny
Univ. Paris-Sud, CNRS, LPTMS, UMR8626, F-91405, Orsay, France

Abstract

The construction of a statistical model for eigenfunctions of the Ising model in transverse and longitudinal fields is discussed in detail for the chaotic case. When the number of spins is large, each wave function coefficient has the Gaussian distribution with zero mean and the variance calculated from the first two moments of the Hamiltonian. The main part of the paper is devoted to the discussion of different corrections to the asymptotic result. One type of corrections is related with higher order moments of the Hamiltonian and can be taken into account by Gibbs-like formulae. Another corrections are due to symmetry contributions which manifest as different numbers of non-zero real and complex coefficients. Statistical model with these corrections included agrees well with numerical calculations of wave function moments.

I. INTRODUCTION

Direct numerical calculations of non-integrable quantum many-body problems become exponentially difficult for large number of particles. Because of that, the developing of approximate statistical description of such models has been and remain of great importance.

For macroscopic bodies the number of interacting particles, N , is so large that only the thermodynamic limit $N \rightarrow \infty$ is meaningful. In this case the behaviour of a small sub-system is described by its reduced density matrix constructed from knowledge of eigenvalues, E_n , and eigenfunctions, $\psi(n)$, when the interaction with outside particles is switched off. According to general properties of quantum thermodynamics (see e.g. [1]) the mean value of an observable $\hat{A}$ of the sub-system is calculated as follows

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle dt = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle \psi(n) | \hat{A} | \psi(n) \rangle, \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (1)$$

and the only information of the existence of a larger system is the inverse temperature β which is determined by the mean energy of the initial state.

This text-book approach reveals so successful that there is no doubt (at least in physical literature) that it is the correct way of calculation of the thermodynamic limit in generic systems. The existence of powerful perturbation expansion around equilibrium states with zero and non-zero temperature [2], and non-equilibrium states [3] contributes considerably to the success of quantum thermodynamics. The important particularity of these constructions is that in any steps effectively infinite number of particles never appears explicitly. The formalism is built in such a way that only finite quantities like temperature and chemical potential give information of the existence of outside world.

With the increasing of computer power it becomes possible to perform full numerical calculations of quantum systems with a few tenths of particles and one starts to ask questions about the foundations of quantum thermodynamics, when and why it gives correct results, what systems are thermalized, what are corrections to thermodynamic limit, etc.

Let E_α and $\Psi(\alpha)$ be exact eigenvalues and eigenfunctions of the full N particles Hamiltonian. For finite N instead of canonical Gibbs measure (1) one has to use the microcanonical average

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle dt = \frac{1}{\mathcal{N}_{E_0, \Delta E_0}} \sum_{|E_0 - E_\alpha| < \Delta E_0} \langle \Psi(\alpha) | \hat{A} | \Psi(\alpha) \rangle \quad (2)$$

where E_0 is the mean energy of the initial state, ΔE_0 is a energy window assumed to be small with respect to E_0 but much larger than the distance between nearest levels

$$1/\rho(E_0) \ll \Delta E_0 \ll E_0 \quad (3)$$

where $\rho(E)$ is the mean spectral density at energy E . $\mathcal{N}_{E_0, \Delta E_0}$ is the number of states in this window. (We consider only the so-called chaotic systems where there is no integral of motion except classical ones.)

The important difference between Eq. (1) and Eq. (2) is that in the former $\psi(n)$ is eigenfunctions of a sub-system but in the later $\Psi(\alpha)$ are eigenfunctions of the full Hamiltonian.

In such approach the central object of investigation is N -particles eigenfunction $\Psi(\alpha)$. There exist different scenarios about the emergence of thermodynamic behaviour (see e.g. [4]). One of the most accepted is the so-called eigenstate thermalization conjecture (ETH) [5]-[7] which states that relation (2) is valid for (almost) all individual eigenstates. Similar conjecture is known in low-dimensional quantum chaos (see e.g. [8]) where it is explicitly stated that for a smooth classical observable $A(p, q)$ almost all diagonal matrix elements of the corresponding quantum counterpart tend to the microcanonical semiclassical limit when $\hbar \rightarrow 0$

$$\langle \Psi(\alpha) | \hat{A} | \Psi(\alpha) \rangle \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{Z} \int \delta(E - H(p, q)) A(p, q) dp dq, \quad Z = \int \delta(E - H(p, q)) dp dq \quad (4)$$

The smallness of off-diagonal matrix elements $\langle \Psi_\alpha | \hat{A} | \Psi_\beta \rangle \ll \langle \Psi_\alpha | \hat{A} | \Psi_\alpha \rangle$, when $\beta \neq \alpha$ also appears naturally in quantum chaos (cf. e.g. [9]) as only periodic orbits give the contribution to this quantity.

These and many other arguments strongly suggest that for systems where quantum thermodynamics can be applied, the majority of eigenfunctions are universal depending only on a few parameters. It has been even proved that in (a certain sense) typical functions in quantum mechanics lead automatically to canonical averaging [13], [14]. The well known example of such phenomenon is given by Berry's conjecture [10]-[12] which postulates that wave functions of low-dimensional chaotic systems are Gaussian random functions with variance determined from semiclassical microcanonical average as in Eq. (4). Similar construction has been applied for various problems in nuclear and atomic physics, many-body models etc, [4], [16]-[30].

The purpose of this paper is to construct and carefully check a statistical model for eigenfunctions of the quantum Ising model in transverse and longitudinal fields determined by the Hamiltonian

$$\mathcal{H} = - \sum_{n=1}^N \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x - \lambda \sum_{n=1}^N \sigma_n^z - \alpha \sum_{n=1}^N \sigma_n^x, \quad (5)$$

where $\sigma^{x,y,z}$ are usual Pauli matrices, and parameters λ and α fix values of transverse and longitudinal fields.

This model is a prototypical example of one-dimensional spin chains with nearest-neighbour interactions. When $\alpha = 0$ it reduces to the well known quantum Ising model in transverse field which is integrable by the Jordan-Wigner transformation [31], [32] and for $\lambda = 1$ it becomes critical and serves as paradigmatic model of quantum critical phenomenon [34]. For non-zero α (and $\lambda \neq 0$) the model is considered as non-integrable but at critical value of transverse field, $\lambda = 1$, and specially fine-tuned weak longitudinal field, $\alpha \rightarrow 0$, it is integrable but not conformal [33].

In [35] it was shown that the ground state wave function of the Ising model (as well as of practically all one-dimensional spin-chain models) is multifractal in the initial spin basis. So it does not fit the standard thermodynamic scheme. For high excited states the situation is different. The spectral density for this model has been discussed in [36]. For finite number of spins, N , in the bulk of the spectrum when $E \sim \sqrt{N}$ there exist two different regimes. When the both fields λ and α are of the order of 1 (i.e. of order of the hopping term), the spectral density is well approximated by a simple Gaussian function whose parameters are calculated from the knowledge of the first moments of the Hamiltonian. If λ is small or large the spectral density of the Ising model in two fields for large but finite N has many peaks well described by a sum of Gaussian functions calculated directly from the Hamiltonian without full diagonalization.

In parallel with two regimes of spectral density of the Ising model there are two regimes for eigenfunctions in the bulk of the spectrum. Here we consider in detail the case when all coupling constants are of the same order. Multi-peaks case will be discussed elsewhere.

The plan of the paper is the following. The construction chaotic wave functions for the Ising model is discussed in Section II. To check the accuracy of such statistical model it is convenient to calculate moments of wave functions and compare them with statistical approximations. In Section III it is done for the participation ratio for the Ising model in two fields. The main part of this Section is devoted to the calculations of different corrections to the lowest order approximation. It is demonstrated that corrected statistical model of eigenfunctions agrees very well with the results of direct numerical calculations. The first moments of the full Ising model Hamiltonian are determined in Appendix A.

II. STATISTICAL DESCRIPTION OF WAVE FUNCTIONS

The construction of chaotic wave functions for different problems follow approximately the same steps as in [10].

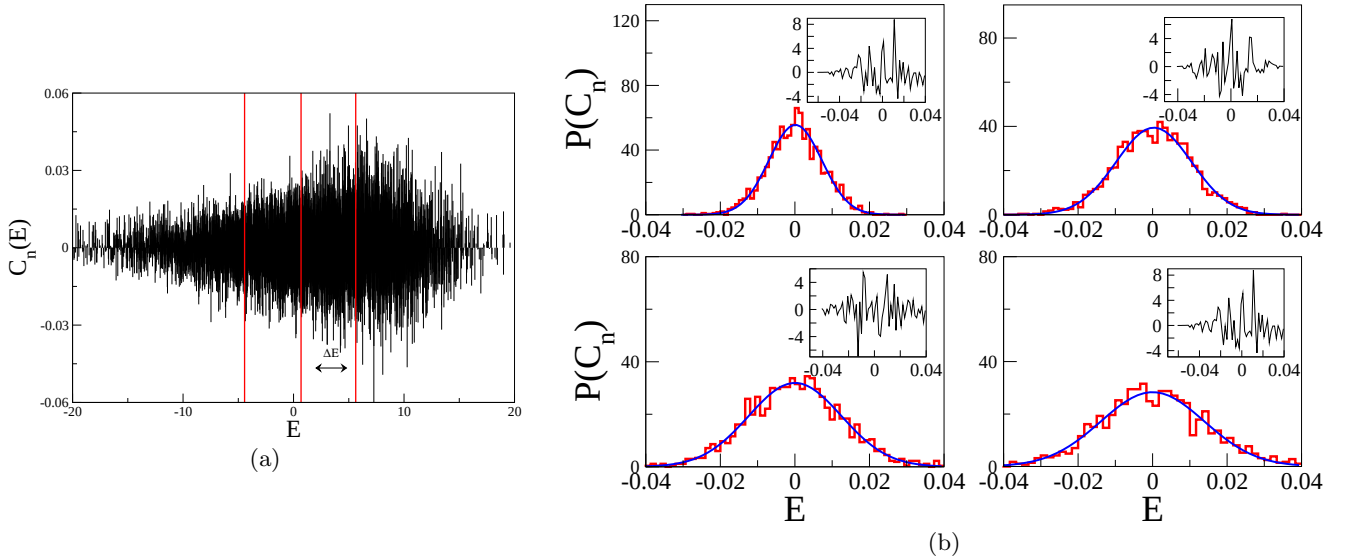


FIG. 1. (a) Coefficient corresponding to symbol $|00001000110111001\rangle$ for the Ising model with $\alpha = 1$ and $\lambda = 1$ for $N = 17$ spins in the sector with zero translational momentum. Red vertical lines indicate energy windows used in the calculation of distributions of this coefficient in Fig. 1b). Each window contains approximately 2000 levels. (b) Distribution of the coefficient as in Fig. 1a) in 4 energy windows indicated in that figure (red histograms). Blue solid lines are the best Gaussian fits to these distributions. Inserts: The difference between numerical histograms and the Gaussian fits.

An eigenfunction of the Hamiltonian (5) with energy E_α by definition obeys

$$\mathcal{H}|\Psi_\alpha\rangle = E_\alpha|\Psi_\alpha\rangle \quad (6)$$

and can be represented as a finite series of basis set functions, $|\vec{n}\rangle$

$$|\Psi_\alpha\rangle = \sum_{\vec{n}} C_{\vec{n}}(\alpha) |\vec{n}\rangle \quad (7)$$

For N spins- $\frac{1}{2}$ the full dimension of the Hilbert space is $\mathcal{N} = 2^N$. Here a state is indicated by symbol $\vec{n} = (n_1, n_2, \dots, n_N)$ with the convention that $n_k = 0$ corresponds to spin at site k up and $n_k = 1$ shows that site k is occupied by spin down.

All information of wave function is contained in coefficients $C_{\vec{n}}(\alpha)$. Let us consider the collection of coefficients $C_{\vec{n}}(\alpha)$ with fixed symbol $\vec{n}$ and with energies in a small interval $I = [E < E_\alpha < E + \Delta E]$. The energy window ΔE is assumed to be small with respect to E but much larger than the distance between nearest levels as in (3).

The principal assumption is that for chaotic systems coefficients $C_{\vec{n}}(\alpha)$ in such intervals are so irregular functions of eigen-energies E_α that their exact values are irrelevant for most purposes and one has to develop statistical description of chaotic wave functions. For spin-chains models without random parameters as the one given by Eq. (5) we are not aware of strict definition of chaoticity. The usual lore is that non-integrability of systems with large number of degrees of freedom is (almost) synonym of chaoticity. For our purposes such notion is sufficient.

As an example, we present in Fig. 1a) one particular coefficient for all eigen-energies of the Ising model with $\alpha = 1$ and $\lambda = 1$ for 17 spins with periodic boundary conditions obtained by direct numerical diagonalization. This type of pictures strongly suggests the following conjecture.

Conjecture 1: The irregular behaviour of coefficients $C_{\vec{n}}(\alpha)$ in a small energy window can be mimicked by the assumption that they are random functions of energies with a certain distribution.

For strongly chaotic systems there are two widely used a-priori assumptions. If coefficients are real, they should well be described by the Gaussian distribution. It means that at fixed symbol $\vec{n}$, the distribution density of coefficients is

$$P(C_{\vec{n}} = x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Sigma_{\vec{n}}^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\Sigma_{\vec{n}}^2}\right) \quad (8)$$

If coefficients are complex, one assumes that they have Gaussian distribution for the both real and imaginary parts with zero means and the same variance

$$P(\text{Re } C_{\vec{n}} = x, \text{Im } C_{\vec{n}} = y) = \frac{1}{\pi\Sigma_{\vec{n}}^2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{\Sigma_{\vec{n}}^2}\right) \quad (9)$$

In the both expressions $\Sigma_{\vec{n}}^2$ indicates the mean value of modulus square of coefficient $C_{\vec{n}}$

$$\Sigma_{\vec{n}}^2 = \langle |C_{\vec{n}}|^2 \rangle \quad (10)$$

For illustration, in Fig. 1b) we compare distribution of the same coefficient as in Fig. 1a) with the best Gaussian fit and a good agreement is clearly seen.

Accepting the above conjecture means, in particular, that moments of variables $C_{\vec{n}}$ averaged over a small energy interval I should be well approximated (at least for large N) by the moments of the corresponding Gaussian distributions

$$\langle |C_{\vec{n}}|^{2q} \rangle_I \equiv \frac{\sum_{E_\alpha \in I} |C_{\vec{n}}(\alpha)|^{2q}}{\sum_{E_\alpha \in I} 1} = \mathcal{R}_q \Sigma_{\vec{n}}^{2q} \quad (11)$$

where for complex coefficients $\mathcal{R}_q = \mathcal{R}_q^{(\text{complex})}$ and for real ones $\mathcal{R}_q = \mathcal{R}_q^{(\text{real})}$ with

$$\mathcal{R}_q^{(\text{complex})} = \Gamma(q+1), \quad \mathcal{R}_q^{(\text{real})} = \frac{2^q \Gamma(q + \frac{1}{2})}{\sqrt{\pi}} \quad (12)$$

In particular, $\mathcal{R}_2^{(\text{complex})} = 2$ and $\mathcal{R}_2^{(\text{real})} = 3$.

Under the validity of the conjecture all average moments of $C_{\vec{n}}(\alpha)$ (with fixed symbol $\vec{n}$) are determined by one quantity, the variance $\Sigma_{\vec{n}}^2 = \Sigma_{\vec{n}}^2(E)$ which depends on symbol $\vec{n}$ and of the center of energy window E .

To calculate this variance, it is convenient to consider the so-called strength function (or the local density of states)

$$P_{\vec{n}}(E) = \sum_{\alpha} |C_{\vec{n}}(\alpha)|^2 \delta(E - E_{\alpha}) \quad (13)$$

Due to pseudo-random character of $C_{\vec{n}}(\alpha)$ and E_{α} the strength function itself can be considered as pseudo-random or random function of energy E . The mean value of a certain function $f(E)$ is defined as in (2)

$$\langle P_{\vec{n}}(E) f(E) \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}_{E, \Delta E}} \sum_{|E - E_{\alpha}| < \Delta E} |C_{\vec{n}}(\alpha)|^2 f(E_{\alpha}) \quad (14)$$

where the width of the energy window, ΔE , obeys (3).

The knowledge of the strength function permits to find $|C_{\vec{n}}(\alpha)|^2$ averaged over a small energy window (which can be used as the definition of the variance)

$$\Sigma_{\vec{n}}^2 = \frac{\langle P_{\vec{n}}(E) \rangle}{\rho(E)} \quad (15)$$

where $\rho(E)$ is the average density of states with energy E i.e. the number of states in an interval $E < E_{\alpha} < E + \Delta E$.

The advantage of the strength function is that for this quantity there exist exact sum rules [15]

$$\int P_{\vec{n}}(E) E^k dE \equiv \langle E^k \rangle = \langle \vec{n} | \mathcal{H}^k | \vec{n} \rangle \quad (16)$$

It means that these moments can be calculated directly from the Hamiltonian without solving the full problem.

Of course, the exact calculation of the strength function is equivalent to the full solution of the problem. To obtain a simple approximation one has to assume that the strength function can be well approximated from the knowledge of its first moments. One can argue that for N -body systems with short-range interactions the first two moments reproduce well higher order moments when $N \rightarrow \infty$. It leads to the second conjecture:

Conjecture 2: The functional dependence of $P_{\vec{n}}(E)$ on E is well approximated when $N \rightarrow \infty$ by a Gaussian

$$P_{\vec{n}}(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\vec{n}}^2}} \exp\left(-\frac{(E - E_{\vec{n}})^2}{2\sigma_{\vec{n}}^2}\right) \quad (17)$$

where $E_{\vec{n}}$ and $\sigma_{\vec{n}}^2$ are the first two moments of the Hamiltonian

$$E_{\vec{n}} = \langle \vec{n} | \mathcal{H} | \vec{n} \rangle, \quad \sigma_{\vec{n}}^2 = \langle \vec{n} | (\mathcal{H} - E_{\vec{n}})^2 | \vec{n} \rangle \quad (18)$$

Under this conjecture the variance of coefficient distribution given by Eq. (15) is

$$\Sigma_{\vec{n}}^2 \approx \frac{1}{\rho(E) \sqrt{2\pi\sigma_{\vec{n}}^2}} \exp\left(-\frac{(E - E_{\vec{n}})^2}{2\sigma_{\vec{n}}^2}\right) \quad (19)$$

with the mean spectral density calculated by the formula (to ensure the normalization $\sum_{\vec{n}} |C_{\vec{n}}(\alpha)|^2 = 1$)

$$\rho(E) = \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\vec{n}}^2}} \exp\left(-\frac{(E - E_{\vec{n}})^2}{2\sigma_{\vec{n}}^2}\right) \quad (20)$$

Assuming that coefficients have Gaussian distribution (8), the values of $2q^{\text{th}}$ moments of the wave function are

$$M_q \equiv \left\langle \sum_{\vec{n}} |C_{\vec{n}}(\alpha)|^{2q} \right\rangle = \frac{\mathcal{R}_q}{\rho^q(E)} \sum_{\vec{n}} \frac{1}{(2\pi\sigma_{\vec{n}}^2)^{q/2}} \exp\left(-q \frac{(E - E_{\vec{n}})^2}{2\sigma_{\vec{n}}^2}\right) \quad (21)$$

The above conjectures are basis ingredients of construction of statistical models for chaotic wave functions in different problems [4], [16]-[30]. Though they were not proved in full generality (but see [37], [38]), they are simple enough to be check for a given particular system. One can even reverse the arguments and say that wave function of N -body model with short range interactions is called chaotic iff it obeys the above conjectures.

Another line of reasoning may be the maximum-entropy principle (see e.g. [39]) according to which "the best" statistical distribution ($P_{\vec{n}}(E)$ in our case) fulfilled certain restrictions (as in (16)) is given by the one which maximise the entropy

$$S = - \int P_{\vec{n}}(E) \ln P_{\vec{n}}(E) dE \quad (22)$$

Assuming e.g. that a finite number of first moments in (16) are specified, the maximum-entropy principle predicts that the corresponding probability density takes the Gibbsian form

$$P_{\vec{n}}(E) = \frac{e^{-\sum_j \mu_j E^j}}{Z(\vec{\mu})}, \quad Z(\vec{\mu}) = \int e^{-\sum_j \mu_j E^j} dE \quad (23)$$

with Lagrangian multipliers, $\mu_j = \mu_j(\vec{n})$ calculated from the partition function using the knowledge of the first moments

$$\langle \vec{n} | \mathcal{H}^j | \vec{n} \rangle = - \frac{\partial}{\partial \mu_j} \ln Z(\vec{\mu}) \quad (24)$$

Of course, when only two moments are taken into account one gets (17).

Though in all considered cases expression (23) gives the best results, it requires numerical calculations of Lagrangian multipliers which complicates the separation of different sources of corrections. To increase the accuracy of approximation, we shall include the third and the forth moments assuming that that they are much smaller than the first two moments by using Gram-Charlier A series in Hermite polynomials. It leads to the following modification of $P_n(E)$

$$P_n(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(E - E_n)^2}{2\sigma^2}\right) \left[1 + \frac{k_3}{3!\sigma^3} H_3\left(\frac{E - E_n}{\sigma}\right) + \frac{k_4}{4!\sigma^4} H_4\left(\frac{E - E_n}{\sigma}\right) \right] \quad (25)$$

Here k_3 and k_4 are the third and the forth cumulants for the Ising model given by Eqs. (A18) and (A24) from Appendix A, $H_3(x) = x^3 - 3x$ and $H_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3$.

III. PARTICIPATION RATIO FOR THE ISING MODEL IN TWO FIELDS

For the Hamiltonian (5) simple calculations give

$$E_n = \lambda(N - 2n), \quad \sigma_n^2 \equiv \sigma^2 = N(1 + \alpha^2) \quad (26)$$

where n is the number of spins up. Each state with fixed n is C_N^n degenerated.

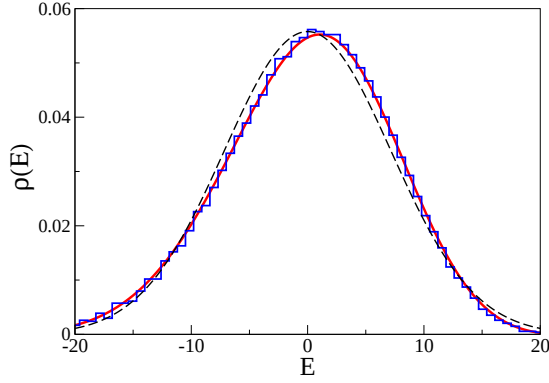


FIG. 2. Spectral density for the Ising model $\alpha = 1$ and $\lambda = 1$ for $N = 17$ spins. Blue histogram indicates the numerical results. Black dashed line is the Gaussian approximation without corrections (28) with (27). Red solid line the corrected approximation (28) with (25).

These formulae mean that

$$P_n(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(E - E_n)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (27)$$

Notice that we wrote n and not $\vec{n}$ to stress that in this approximation all quantities depend only on number of spins up.

The full density normalized to 1 is

$$\rho(E) = 2^{-N} \sum_{n=0}^N C_N^n P_n(E) \quad (28)$$

In Fig. (2) this equation is compared with the spectral density of the Ising model (5) with $\alpha = 1$ and $\lambda = 1$ for $N = 17$ spins calculated numerically. The agreement is good but small differences are visible. When higher moments taken into account as in (25) the result is practically indistinguishable from numerics.

To approximate moments of wave functions accurately one has to know not only the first moments of wave function coefficients but also are they real or complex. Usually, the answer is simple. If the Hamiltonian is real symmetric, wave functions (and their coefficients) are real. If the Hamiltonian is complex Hermitian, coefficients are also complex. For the considered Ising model in two fields (5) the situation is more tricky. The point is that this model with periodic boundary conditions has the translational invariance

$$\hat{T} : n \rightarrow n + 1, \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (29)$$

so if Ψ is a wave function with energy E , $\Psi = \sum_{n_j=\pm 1} C_{n_1, n_2, \dots, n_N} |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle$ then $\hat{T}\Psi = \sum_{n_j=\pm 1} C_{n_1, n_2, \dots, n_N} |n_N, n_1, \dots, n_{N-1}\rangle$ is also an eigenfunction with the same energy which imposes certain relation on coefficients.

As $\hat{T}^N = 1$, its eigenvalues are $e^{2\pi i k/N}$ and eigenfunctions can be classified by the translational momentum $k = 0, 1, \dots, N$

$$\hat{T}\Psi_k = e^{2\pi i k/N} \Psi_k \quad (30)$$

Numerical calculations below are performed in the basis with fixed translational momentum k .

To construct explicitly such basis one fixes one element, $|\vec{n}\rangle$, $\vec{n} = (n_1, n_2, \dots, n_N)$ and constructs all its translations with corresponding phases. For prime N one can choose

$$|\vec{n}\rangle_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{2\pi i k j/N} \hat{T}^j |\vec{n}\rangle \quad (31)$$

Here $\hat{T}^j |\vec{n}\rangle$ indicates the shift on j elements of the initial sequence

$$\hat{T}^j |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \equiv |n_{N-j+1}, \dots, n_N, n_1, n_2, \dots, n_{N-j}\rangle \quad (32)$$

After performing one step one takes arbitrary element which is not in the sum (31) and repeats the construction till all elements are exhausted.

For composite N there exist elements with primitive periods equals divisors of N . Their number is

$$r(t) = \frac{1}{t} \sum_{d|t} 2^{t/d} \mu(d) \quad (33)$$

where $\mu(n)$ is the Möbius function, $\mu(n) = (-1)^{n_p}$ if n is square-free number with n_p prime divisors, and $\mu(n) = 0$ if n is divisible on a square of a prime.

The total dimension of the basis with $k = 0$ is

$$\mathcal{N}_{\text{tot}} = \sum_{n|N} r(n) = \frac{1}{N} \sum_{d|N} 2^{N/n} \phi(d) \quad (34)$$

where $\phi(n)$ is Euler's totient function equals the number of positive integers smaller than n and co-prime with it. For non-zero k the contribution of basis states with primitive period $t < N$, $(t|N)$, is non-zero only when $k \equiv 0 \pmod{N/t}$.

The simplest approximation

$$\mathcal{N}_{\text{tot}} \approx \frac{2^N}{N} \quad (35)$$

is sufficient in many cases when N is large. The total number of states with fixed momentum and fixed number of spins up $\nu_{\text{tot}}(n)$ can also be approximated in the similar manner

$$\nu_{\text{tot}}(n) \approx \frac{1}{N} C_N^n \quad (36)$$

After rewriting the Hamiltonian in the basis of states with fixed translational momentum, $|\vec{n}_k\rangle$, it becomes complex and eigenfunctions

$$\Psi_k = \sum_{\vec{n}_k} C_{\vec{n}_k} |\vec{n}\rangle_k \quad (37)$$

are, in general, also complex.

Nevertheless, one cannot conclude that in the chaotic regime eigenstates and eigenfunctions are distributed as for Gaussian Unitary ensemble of random matrices (GUE). The reason is that for the model considered there exists another discrete symmetry, namely geometric inversion

$$\hat{S} : n \rightarrow N - n + 1, \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (38)$$

Hamiltonian (5) is invariant under this transformation. Therefore if Ψ is an eigenfunction $\hat{S}\Psi$ is also an eigenfunction with the same energy.

By definition the initial basis $|\vec{n}\rangle$ transforms under $\hat{S}$ as follows

$$\hat{S}|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = |n_N, n_{N-1}, \dots, n_1\rangle \quad (39)$$

Functions with zero translational momentum transform into themselves under this inversion

$$\hat{S}\Psi_0 = \epsilon\Psi_0 \quad (40)$$

where $\epsilon = \pm 1$ is the parity under the inversion. But functions with $k \neq 0$ are transformed up to a phase into functions with opposite momentum

$$\hat{S}\Psi_k = \Psi_{N-k} \quad (41)$$

States $|\vec{n}\rangle_k$ with fixed momentum k (cf. Eq. (31)) split into two groups under the inversion. The first group includes all states which under this inversion transform into themselves but with opposite momentum (once more up to a certain non-dynamical phase which can be included in the definition of basis states)

$$\hat{S}|\vec{n}\rangle_k = |\vec{n}\rangle_{N-k} \quad (42)$$

In other words, the inversion of one element of this group is equivalent to a certain shift of this element. Such elements are called invariant under the inversion.

Elements of the second group are organised in different pairs transformed one to another by the inversion

$$\hat{S}|\vec{n}\rangle_k = |\vec{n}'\rangle_{N-k}, \quad \vec{n}' \neq \vec{n} \quad (43)$$

We call them non-invariant elements.

The above arguments show that eigenfunctions with $k \neq 0, N/2$ can be written in the form

$$\Psi_k = \sum_{\text{non-invariant}} \left(C_{\vec{n}_k}^{(\text{n-in})} |\vec{n}\rangle_k + C_{\vec{n}_k}^{(\text{n-in})*} |\vec{n}'\rangle_k \right) + \sum_{\text{invariant}} C_{\vec{n}_k}^{(\text{in})} |\vec{n}\rangle_k \quad (44)$$

where $\vec{n}$ and $\vec{n}'$ are pairs of elements connected by the inversion. Taking real and imaginary parts of this expression demonstrates that all coefficients in the expansion can be chosen real which explains that spectral statistics of this model is well described by GOE statistics (either give the reference or a picture of left-right asymmetry for non-zero momentum!) though the Hamiltonian itself is complex (cf. [42]).

For $k = 0$ eigenfunctions have a particular parity under the inversion and all coefficients can be chosen real but invariant elements are identically zero for states with negative parity

$$\Psi_0^{(\epsilon)} = \sum_{\text{non-invariant}} \left(C_{\vec{n}}^{(\text{n-in})} |\vec{n}\rangle_0 + \epsilon C_{\vec{n}}^{(\text{n-in})} |\vec{n}'\rangle_0 \right) + \frac{1+\epsilon}{2} \sum_{\text{invariant}} C_{\vec{n}}^{(\text{in})} |\vec{n}\rangle_0 \quad (45)$$

with $\epsilon = \pm 1$.

It is plain that the majority of elements at large N are non-invariant. Nevertheless, corrections from invariant elements, though small, are noticeable for N accessible in numerical calculations. The number of invariant elements is especially simple to find for prime N when all elements have the same primitive period. As $N = 2K + 1$ is odd, all invariant elements in the periodic cycle are appeared in pairs under the inversion except one element which has to be invariant under the inversion. Such element can be constructed by choosing arbitrary the first K elements and reflecting them into another part of the element. The number of possibilities is 2^K and one has 2 chooses for the central element, therefore the total number of invariant elements is

$$\mathcal{N}_{\text{inv}} = 2^{K+1} = 2^{[N/2]+1} \quad (46)$$

where $[x]$ is the integer part of x . The number of invariant elements with fixed total number of spins is

$$\nu_{\text{inv}}(n) = C_{[N/2]}^{[n/2]} \quad (47)$$

Similar expression may be obtained for even N .

According to the above statistical conjectures, coefficients $C_{\vec{n}_k}^{(\text{n-in})}$ with $k \neq 0$ are distributed as complex Gaussian variables with zero mean and variance Σ_n^2 calculated from $P_n(E)$ as in Eq. (15)

$$\Sigma_{\vec{n}}^2 = \frac{P_{\vec{n}}(E)}{\rho(E)}, \quad \rho(E) = \sum_{n=0}^N \nu_{\text{tot}}(n) P_n(E) \quad (48)$$

with $P_n(E)$ as in Eqs. (27) or (25).

Similarly, coefficients of invariant terms, $C_{\vec{n}_k}^{(\text{in})}$, have real Gaussian distribution with the same variance. Therefore, when moments are calculated, one has to take into account corrections from different types of distributions (cf. Eqs. (12)). For large N one can neglect the existence of invariant elements and consider that for non-zero k functions are complex and for zero momentum functions are real.

As a typical example we consider the participation ratio determined as usual

$$Pr(E_\alpha) = \left(\sum_{\vec{n}} |C_{\vec{n}}(E_\alpha)|^4 \right)^{-1} \quad (49)$$

The simple Gaussian approximation of this quantity takes the form

$$Pr(E) \approx \mathcal{N}_{\text{tot}} \frac{\left(2^{-N} \sum_{n=0}^N C_N^n P_n(E) \right)^2}{\mathcal{R}_2 \left(2^{-N} \sum_{n=0}^N C_N^n P_n(E)^2 \right)} \quad (50)$$

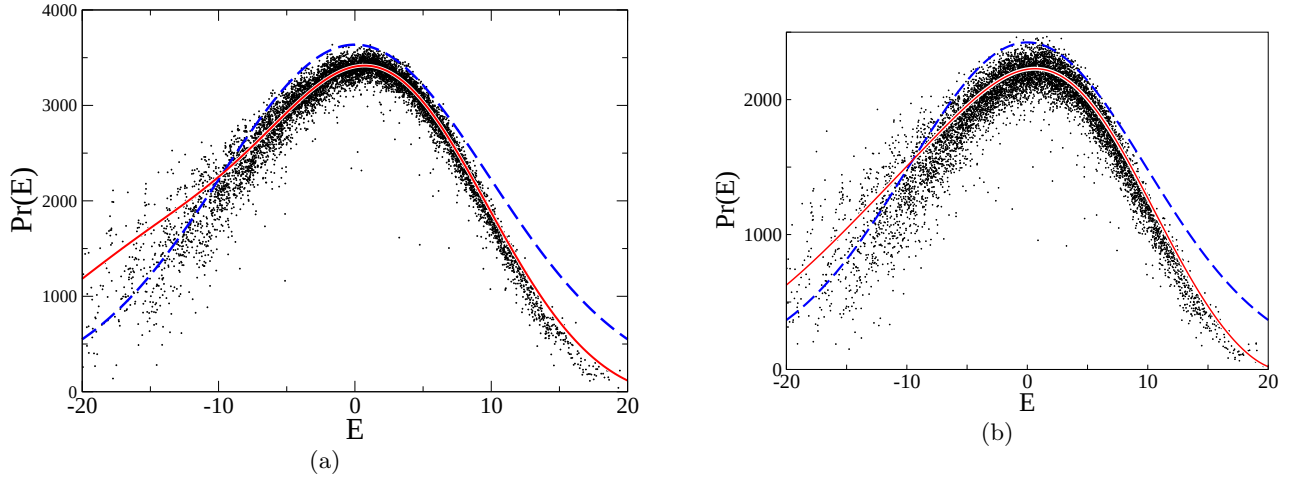


FIG. 3. (a) Participation ratio of the Ising model with $\alpha = 1$ and $\lambda = 1$ for $N = 17$ spins in sector with translational momentum equals 2. Black crosses are result of numerical calculations. Blue dashed line is the pure Gaussian approximation without corrections (50) with $\mathcal{R}_2 = 2$. Red line is the corrected approximation. (b) The same as in (a) but with zero translational momentum. Blue dashed line is the pure Gaussian approximation without corrections (50) but with $\mathcal{R}_2 = 3$.

where $P_n(E)$ is given by Eq. (27). Here we use approximation (36) for the number of total terms with fixed n , $\mathcal{N}_{\text{tot}} = \sum_n \nu_{\text{tot}}(n) = 2^N/N$, $\mathcal{R}_2 = 2$ for states with non-zero momentum and $\mathcal{R}_2 = 3$ for zero momentum state.

In Figs. 3a) and 3b) we present the numerical results for this quantity for the Ising model with $\alpha = \lambda = 1$ and $N = 17$ spins for states with translational momentum $k = 2$ and $k = 0$ respectively. Notice that left-hand side of the participation ratio (with $E < -10$) fluctuate strongly and the using statistical description at energies close to the ground state is questionable. In the same figures the above Gaussian approximation is also indicated. In general the agreement is good but there exit noticeable differences with numerical calculations.

There exist two different types of corrections. The first is related with higher moments of Hamiltonian and they can be taken into account by modifications indicated in Eq. (25). This formula differs from the Gibbs-like formulae (23). The latter usually give better results, but as they require numerical calculations to find necessary Lagrangian multipliers, their use leads to non-transparent expressions where relative importance of different terms is hidden. To get clear separation of different contributions we prefer to use series expansion as in Eq. (25) though they lead to big errors at large arguments. As in all cases the advocated statistical approach can, strictly speaking, be applied only in the bulk of the spectrum it is not an important restriction. Another corrections are related with the fact that in the expansion of eigen functions there exists basis sets which are invariant under inversion (cf. Eqs.(44) and (45)) which has properties different from non-invariant terms.

For the moments of wave function coefficients with non-zero momentum one gets the following formula

$$\left\langle \sum_{\vec{n}} |\Psi_{\vec{n}}(E)|^{2q} \right\rangle = (\mathcal{R}_q^{\text{complex}} + [\mathcal{R}_q^{\text{real}} - \mathcal{R}_q^{\text{complex}}] \delta_q(E)) \frac{\sum_{n=0}^N \nu_{\text{tot}}(n) P_n^q(E)}{\left(\sum_{n=0}^N \nu_{\text{tot}}(n) P_n(E) \right)^q} \quad (51)$$

where

$$\delta_q(E) = \frac{\sum_n \nu_{\text{inv}}(n) P_n^q(E)}{\sum_n \nu_{\text{tot}}(n) P_n^q(E)} \approx \frac{\mathcal{N}_{\text{inv}}}{\mathcal{N}_{\text{tot}}} \quad (52)$$

The approximative expression of $\delta_q \approx \delta = \mathcal{N}_{\text{inv}}/\mathcal{N}_{\text{tot}}$ corresponds to the uniform approximation where the summation over invariant set is proportional to the summation over all elements. When the invariant elements are taken into account in Eq. (50) for the participation ratio one has instead of $\mathcal{R}_2 = 2$ to use $\mathcal{R}_2 = 2 + \delta$ for states with non-zero translational momentum.

For $k = 0$ all eigenfunctions are either symmetric or anti-symmetric with respect to inversion. The full dimensions of symmetric and anti-symmetric sub-spaces (i.e. the number of independent real coefficients) are (cf. (45))

$$N_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \delta)\mathcal{N}_{\text{tot}} \quad (53)$$

Eigenvalues corresponding to the both sub-spaces are statistically independent, so the local densities of these eigen-

values are proportional to the above numbers,

$$\rho_{\pm}(E) = \frac{1}{2}(1 \pm \delta)\rho(E) \quad (54)$$

Correspondingly, the strength function (13) has contributions from the both symmetric and anti-symmetric states. According to the above conjecture each term in Eq. (45) has real Gaussian distribution with the same variance. But this variance are depended on the number of independent components. In the uniform approximation variances in different sub-spaces are

$$\tilde{\Sigma}_{\vec{n}_0}^2(\pm) = \frac{2}{1 \pm \delta} \Sigma_{\vec{n}_0}^2 \quad (55)$$

For positive parity states the variance of $C_{\vec{n}}^{(\text{in})}$ equals $\tilde{\Sigma}_{\vec{n}_0}^2(+)$ but variance of non-invariant coefficients, $C_{\vec{n}}^{(\text{n-in})}$ is, according to our definition (45), equal to $\frac{1}{2}\tilde{\Sigma}_{\vec{n}_0}^2(+)$. Calculating the $2q^{\text{th}}$ moments of eigen-functions in the initial spin basis gives

$$M_q^{(+)} = \frac{1 - \delta + 2^q \delta}{(1 + \delta)^q} M_q, \quad M_q^{(-)} = \frac{1}{(1 - \delta)^q} M_q \quad (56)$$

As we do not separate states with definite parity, the mean value of moments is (cf. (54))

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_{\vec{n}} |\Psi_{\vec{n}}(E)|^{2q} \right\rangle &= \frac{1}{2}(1 + \delta)M_q^{(+)} + \frac{1}{2}(1 - \delta)M_q^{(-)} \\ &\approx \mathcal{R}_q^{\text{real}} [1 + (2^{q-1} - 1)\delta] \frac{\sum_{n=0}^N \nu_{\text{tot}}(n) P_n^q(E)}{\left(\sum_{n=0}^N \nu_{\text{tot}}(n) P_n(E) \right)^q} \end{aligned} \quad (57)$$

The last equation is valid in the first order on δ . one can performed exact summation and with the same accuracy the only difference is the substitution $\delta \rightarrow \delta_q$. In particular, the participation ratio is given by Eq. (50) but instead of $\mathcal{R}_2 = 3$ one has to use $\mathcal{R}_2 = 3(1 + \delta)$.

Inverse moments for the Ising model with the same values of parameters as above calculated numerically for zero momentum sector are plotted in Fig. 4 for different values of q and compared with Eq. (57). Participation ratios for different values of α , λ , and N are shown in Fig. 5. In all cases in the bulk a good agreement with statistical model with corrections is found in the bulk of the spectrum.

IV. CONCLUSION

Exact determination of wave functions in many-body problems is rarely possible. For overwhelming majority of models numerical calculations remain the only way of getting information of wave functions. In certain models (called chaotic) the complexity of wave functions is so high that with a good precision they can be considered as random and the developing of statistical methods becomes a valuable alternative to numerics.

In the paper we discuss the construction of statistical models for eigenfunctions in a particular example of one-dimensional models of N interacting spin- $\frac{1}{2}$, namely the Ising model in transverse and longitudinal fields. The model is simple enough to demonstrate general phenomena without unnecessary complications.

The investigation of the model is restricted to the chaotic regime when all coupling constants are of the same order. It is attested that for large number of spins eigenfunction coefficients in the bulk of the spectrum are well approximated by Gaussian functions with zero mean and variance determined analytically from the Hamiltonian. Such asymptotic results are supposed to give a good description of wave functions only in thermodynamic limit when the number of spins tends to infinity. For numbers of spins accessible in numerical calculations there exist small but noticeable deviations from asymptotic formulae and a large part of the paper is devoted to calculations of different types of corrections.

The first type of corrections is common. It appears every time one calculates corrections to the central limit theorem by taking into account higher order moments. The best way to incorporate them is to use Gibbs-like formulae which requires numerical calculations to find necessary parameters. When the number of spins is large, contributions of higher order cumulants are small and one can incorporate these corrections by using simple series in the Hermite polynomials.

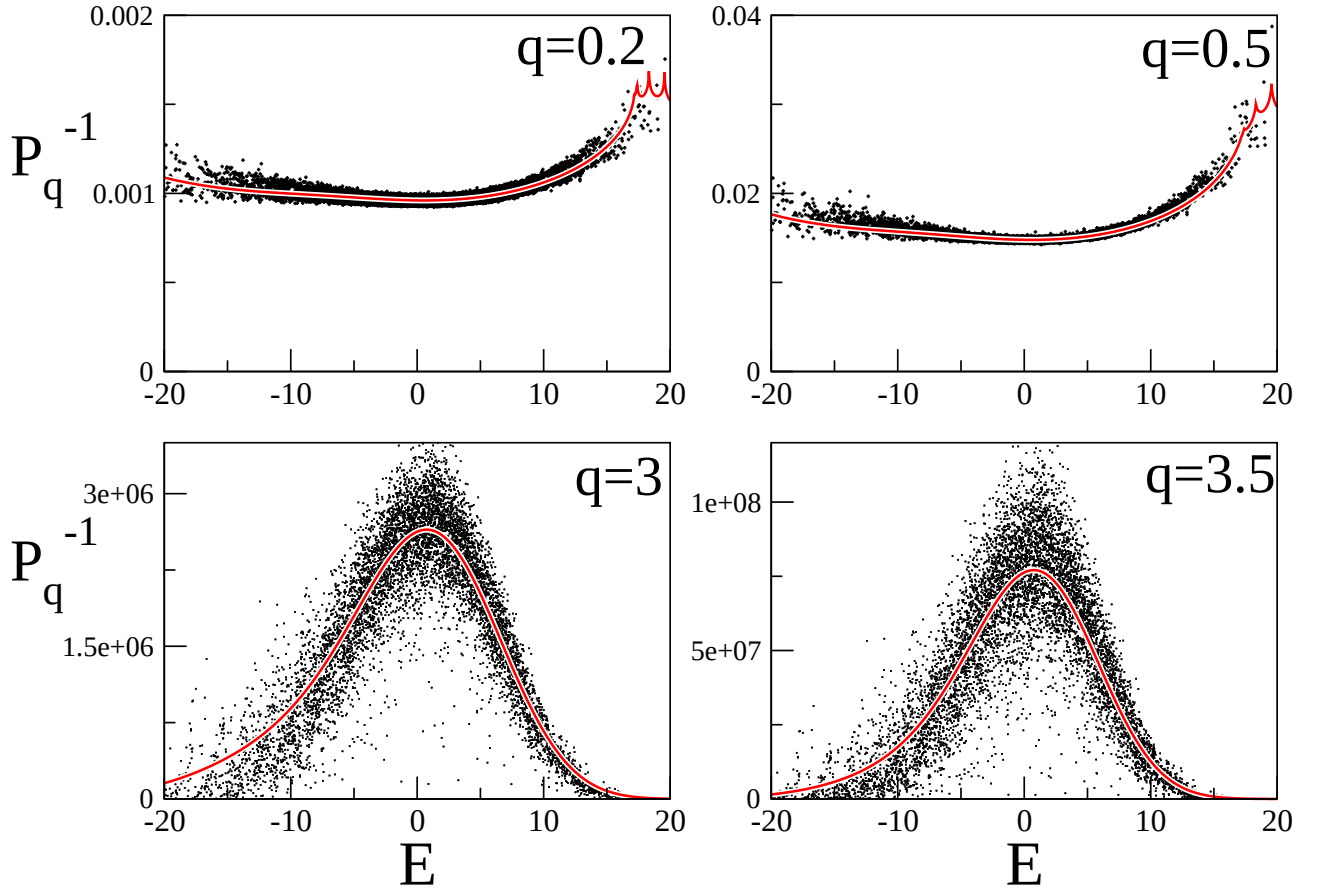


FIG. 4. Inverse moments of the Ising model with $\alpha = 1$ and $\lambda = 1$ for $N = 17$ spins with zero translational momentum for different values of q . Black crosses are results of numerical calculations. Red lines are the corrected Gaussian approximation.

The second type of corrections appears for models with periodic boundary conditions and is related with the conservation of translational momentum and the parity transformation. Due to symmetry considerations some coefficients are real and others have to be complex. In addition, for certain values of translational momentum the symmetries impose that a subset of coefficients is zero.

When all corrections are included, the resulting statistical expressions agree well with the results of numerical calculations of wave function moments which clearly confirms that in the bulk wave functions are fully extended.

All constructions used in the paper can be applied only in the bulk of the spectrum where eigen-energies are of the order of the square root of number of spins. The structure of eigenfunctions close to the ground state and to the highest energy state may and will be more complicated. In particular, the ground state eigenfunctions for practically all spin chains have non-trivial multifractal dimensions [35]. The existence or not a sharp transition between multifractal behaviour of boundary states and the extended states in the bulk and more careful determination of the nature of these states (glassy?) require additional investigations. The behaviour of wave functions for small or large values of coupling constants in the bulk is different from the one investigated so far. The existence in such cases of perturbation series for large but finite number of spins leads to multiple peaks in the both average spectral density [36] and in moments of wave functions. These questions will be discussed elsewhere.

Appendix A: Calculations of first moments for the Ising model

Hamiltonian of the Ising model in two fields (5) can be rewritten in the form

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_x + \mathcal{H}_z \quad (\text{A1})$$

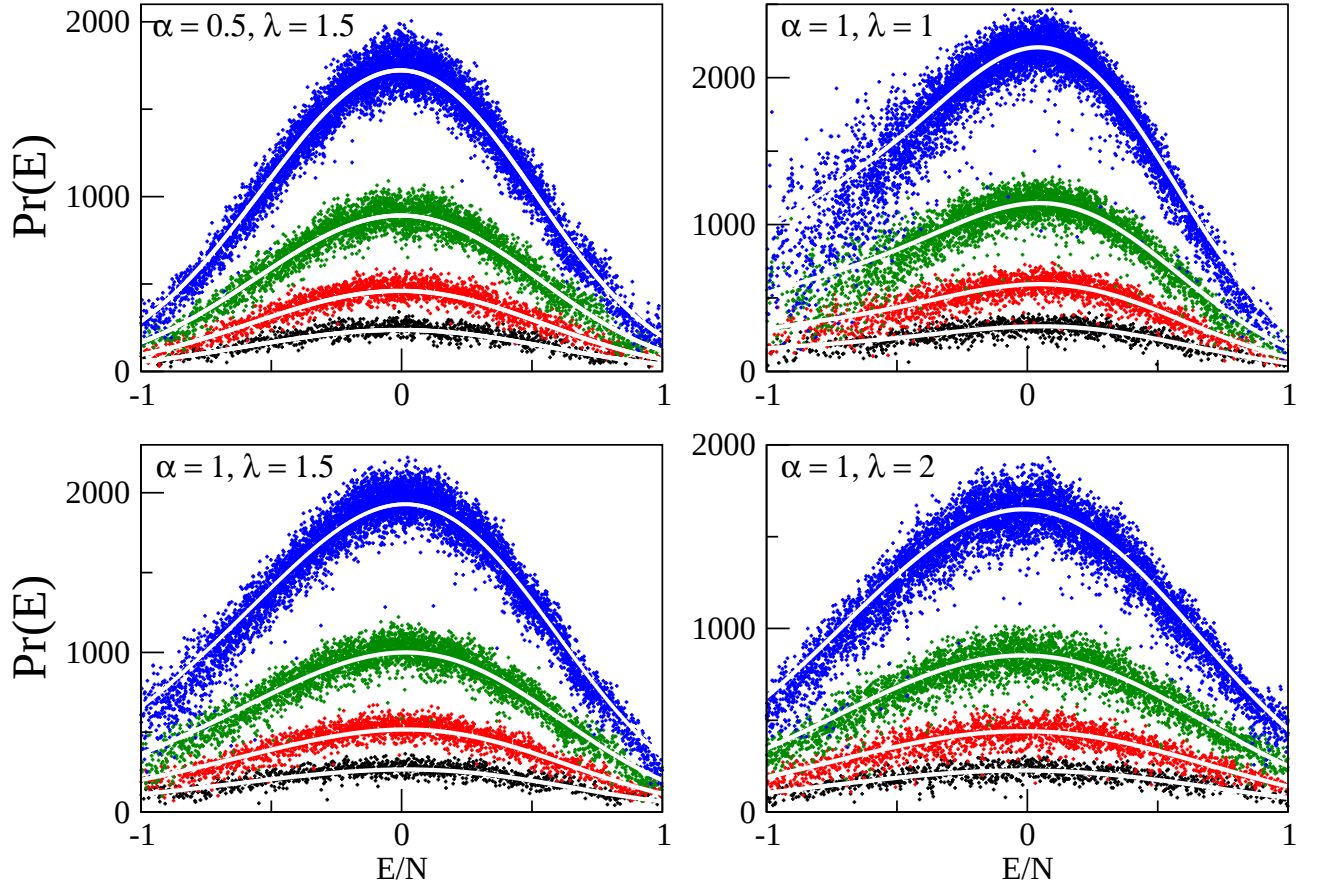


FIG. 5. Participation ratio for the Ising model for indicated values of α and λ and different N in zero translational momentum sector. From top to bottom $N = 17$, $N = 16$, $N = 15$, and $N = 14$. Small crosses are numerical results. White lines are the corrected statistical approximation.

where

$$\mathcal{H}_x = -\sum_n h_n, \quad h_n = \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \alpha \sigma_n^x, \quad \mathcal{H}_z = -\lambda \sum_n \sigma_n^z \quad (\text{A2})$$

The purpose of this Appendix is to calculate moments of the Hamiltonian $\mu_k(\vec{n}) \equiv \langle \vec{n} | \mathcal{H}^k | \vec{n} \rangle$ taken between basis states with definite projection of spins in each point.

As $\mathcal{H}_z |\vec{n}\rangle = E_n |\vec{n}\rangle$ with $E_n = \lambda(N - 2n)$ where n is the number of spins up, one has $\langle \vec{n} | \mathcal{H}_z^k | \vec{n} \rangle = E_n^k$. Therefore the first two moments of the Ising model Hamiltonian are

$$\mu_1(n) = E_n, \quad \mu_2(n) = N(1 + \alpha^2) + E_n^2 \quad (\text{A3})$$

and the variance (i.e. the second cumulant)

$$\sigma_n^2 = \langle \vec{n} | \mathcal{H}^2 | \vec{n} \rangle - \langle \vec{n} | \mathcal{H} | \vec{n} \rangle^2 = N(1 + \alpha^2) \quad (\text{A4})$$

Hamiltonian $\mathcal{H}_x$ flips spins so simple counting gives

$$\langle \vec{n} | \mathcal{H}_x | \vec{n} \rangle = 0, \quad \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x^2 | \vec{n} \rangle = N(1 + \alpha^2), \quad \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x^3 | \vec{n} \rangle = -6N\alpha^2 \quad (\text{A5})$$

The forth power of $\mathcal{H}_x$ is

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_x^4 = & \sum_n h_n^4 + 4 \sum_{n_1 \neq n_2} h_{n_1}^3 h_{n_2} + 6 \sum_{n_1 < n_2} h_{n_1}^2 h_{n_2}^2 + 12 \sum_{n_1 \neq n_2 < n_3} h_{n_1}^2 h_{n_2} h_{n_3} \\ & + 24 \sum_{n_1 < n_2 < n_3 < n_4} h_{n_1} h_{n_2} h_{n_3} h_{n_4} \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

By inspection one can check that only the even powers of h_n give contribution to $\langle \vec{n} | \mathcal{H}_x^4 | \vec{n} \rangle$ and

$$\langle \vec{n} | \mathcal{H}_x^4 | \vec{n} \rangle = 3N^2(1 + \alpha^2)^2 + N(24\alpha^2 - 2 - 2\alpha^4) \quad (\text{A7})$$

As it does not depend on n it coincides with $1/2^N \text{Tr } \mathcal{H}_x^4$ [36].

The third power of the Hamiltonian is

$$\mathcal{H}^3 = \mathcal{H}_x^3 + \mathcal{H}_x^2 \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x + \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z^2 + \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x^2 + \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_z^2 \mathcal{H}_x + \mathcal{H}_z^3 \quad (\text{A8})$$

Due to Eq. (A5) one can find all contributions to $\langle \vec{n} | \mathcal{H}^3 | \vec{n} \rangle$ except $\mathcal{H}_x \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x$.

One gets

$$\langle \vec{n} | \mathcal{H}^3 | \vec{n} \rangle = \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x^3 | \vec{n} \rangle + 2E_n \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x^2 | \vec{n} \rangle + 3E_n^2 \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x | \vec{n} \rangle + E_n^3 + \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x | \vec{n} \rangle \quad (\text{A9})$$

As has been discussed above, $\mathcal{H}_x$ acting on a product state $|\vec{n}\rangle$ changes the number of spins up which can be symbolically written as follows

$$\mathcal{H}_x \xrightarrow{n \rightarrow n} -1, 2k \text{ times} \quad (\text{A10})$$

$$\mathcal{H}_x \xrightarrow{n \rightarrow n+1} -\alpha, (N - n) \text{ times} \quad (\text{A11})$$

$$\mathcal{H}_x \xrightarrow{n \rightarrow n-1} -\alpha, n \text{ times} \quad (\text{A12})$$

$$\mathcal{H}_x \xrightarrow{n \rightarrow n+2} -1, (N - n - k) \text{ times} \quad (\text{A13})$$

$$\mathcal{H}_x \xrightarrow{n \rightarrow n-2} -1, n - k \text{ times} \quad (\text{A14})$$

where k is the number of groups of spins in the same direction.

One gets

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x |n\rangle &= -2kE_n |n\rangle - (N - n - k)E_{n+2} |n+2\rangle - (n - k)E_{n-2} |n-2\rangle \\ &\quad - \alpha(N - n)E_{n+1} |n+1\rangle - \alpha n E_{n-1} |n-1\rangle \end{aligned} \quad (\text{A15})$$

Here $|n\rangle$ stays for a state with n spins up.

Finally the action $\mathcal{H}_x$ will select the corresponding term and one obtains

$$\begin{aligned} \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x | \vec{n} \rangle &= 2kE_n + (N - n - k)E_{n+2} + (n - k)E_{n-2} + \alpha^2[(N - n)E_{n+1} + nE_{n-1}] \\ &= (N - n)E_{n+2} + nE_{n-2} + \alpha^2[(N - n)E_{n+1} + nE_{n-1}] = [N(1 + \alpha^2) - 4 - 2\alpha^2]E_n \end{aligned} \quad (\text{A16})$$

Combining all terms together gives that for $N \geq 4$

$$\begin{aligned} \mu_3(n) \equiv \langle \vec{n} | \mathcal{H}^3 | \vec{n} \rangle &= E_n^3 + 2(N + k)E_n + (N - n - k)E_{n+2} + (n - k)E_{n-2} \\ &\quad + \alpha^2[2E_n N + (N - n)E_{n+1} + nE_{n-1} - 6N] = E_n^3 + [3(1 + \alpha^2)N - 4 - 2\alpha^2]E_n - 6N\alpha^2 \end{aligned} \quad (\text{A17})$$

Notice that the dependence on k disappears.

Finally the third cumulant, $k_3 = \mu_3 - 3\mu_2\mu_1 + 2\mu_1^3$, takes the following value

$$k_3 = -6N\alpha^2 - 2E_n(\alpha^2 + 2) \quad (\text{A18})$$

The next step is the calculation of the forth moment of Hamiltonian (A1)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^4 &= \mathcal{H}_x^4 + \mathcal{H}_x^3 \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_x^2 \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x + \mathcal{H}_x^2 \mathcal{H}_z^2 + \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x^2 + \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z^2 \mathcal{H}_x + \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z^3 \\ &\quad + \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x^3 + \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x^2 \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x + \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z^2 + \mathcal{H}_z^2 \mathcal{H}_x^2 + \mathcal{H}_z^2 \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_z^3 \mathcal{H}_x + \mathcal{H}_z^4 \end{aligned} \quad (\text{A19})$$

When calculating $\langle \vec{n} | \mathcal{H}^4 | \vec{n} \rangle$ many terms are known from the above expressions

$$\begin{aligned} \langle \vec{n} | \mathcal{H}^4 | \vec{n} \rangle &= \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x^4 | \vec{n} \rangle + 2\langle \vec{n} | \mathcal{H}_x^3 | \vec{n} \rangle E_n + 3\langle \vec{n} | \mathcal{H}_x^2 | \vec{n} \rangle E_n^2 + 4\langle \vec{n} | \mathcal{H}_x | \vec{n} \rangle E_n^3 \\ &\quad + 2\langle \vec{n} | \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x | \vec{n} \rangle E_n + E_n^4 + \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x^2 \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x | \vec{n} \rangle + \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x^2 | \vec{n} \rangle + \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z^2 \mathcal{H}_x | \vec{n} \rangle \end{aligned} \quad (\text{A20})$$

Only three last quantities require separate calculation.

Term $\langle \vec{n} | \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z^2 \mathcal{H}_x | \vec{n} \rangle$ can be performed as above and the result is the same as Eq. (A16) but with substitution $E_m \rightarrow E_m^2$

$$\begin{aligned} \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x \mathcal{H}_z^2 \mathcal{H}_x | \vec{n} \rangle &= 2kE_n^2 + (N - n - k)E_{n+2}^2 + (n - k)E_{n-2}^2 + \alpha^2(N - n)E_{n+1}^2 + \alpha^2 n E_{n-1}^2 \\ &= -32k\lambda^2 + (N - 8)E_n^2 + 16N\lambda^2 + \alpha^2[(N - 4)E_n^2 + 4N\lambda^2] \end{aligned} \quad (\text{A21})$$

Operator $\mathcal{H}_x$ flips one or two nearby spins, therefore only the following contribution are non-zero

$$\begin{aligned} \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x^2 \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x | \vec{n} \rangle &= -2\alpha^2 \langle \vec{n} | \left(\sum_n \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x \right) \left(\sum_{n_1} \sigma_{n_1}^x \right) \mathcal{H}_z \left(\sum_{n_2} \sigma_{n_2}^x \right) | \vec{n} \rangle \\ &- \alpha^2 \langle \vec{n} | \left(\sum_{n_1} \sigma_{n_1}^x \right) \left(\sum_{n_2} \sigma_{n_2}^x \right) \mathcal{H}_z \left(\sum_n \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x \right) | \vec{n} \rangle \end{aligned} \quad (\text{A22})$$

Consider the first term. Operator $\sum_{n_2} \sigma_{n_2}^x$ acting on $|\vec{n}\rangle$ produces $N - n$ states with $n + 1$ spins up and n states with $n - 1$ spins down (cf. (A11) and (A10)). Operator $\mathcal{H}_z$ multiplies them by E_{n+1} and E_{n-1} correspondingly. Other terms should combine to produce the initial state. In the end one gets

$$\begin{aligned} \langle \vec{n} | \mathcal{H}_x^2 \mathcal{H}_z \mathcal{H}_x | \vec{n} \rangle &= -4\alpha^2 [(N - n)E_{n+1} + nE_{n-1}] \\ &- 2\alpha^2 [2kE_n + (N - n - k)E_{n+2} + (n - k)E_{n-2}] = -2\alpha^2 (3N - 8)E_n \end{aligned} \quad (\text{A23})$$

Taking into account all terms we obtain that for $N \geq 5$

$$\begin{aligned} \mu_4(n, k) \equiv \langle \vec{n} | \mathcal{H}^4 | \vec{n} \rangle &= E_n^4 + E_n^2 [6N(1 + \alpha^2) - 16 - 8\alpha^2] + 8E_n(4 - 3N)\alpha^2 + 3N^2(1 + \alpha^2)^2 \\ &- 32k\lambda^2 + N(24\alpha^2 - 2 - 2\alpha^4 + 16\lambda^2 + 4\lambda^2\alpha^2) \end{aligned} \quad (\text{A24})$$

The forth cumulant by definition is the following combination, $k_4 \equiv \mu_4 - 4\mu_3\mu_1 - 3\mu_2^2 + 12\mu_2\mu_1^2 - 6\mu_1^4$. Simple calculations gives

$$k_4 = 32\alpha^2 E_n - 32k\lambda^2 + N(24\alpha^2 - 2 - 2\alpha^4 + 16\lambda^2 + 4\lambda^2\alpha^2) \quad (\text{A25})$$

In the calculations we used instead of k its mean value of k in all states with fixed n , $\langle k \rangle = n(N - n)/(N - 1)$ [36].

All above calculations were performed without the selecting a particular translational momentum. If instead of basis set $|\vec{n}\rangle$ one uses states which are eigenstates of the translational operator as in (30), moments may be different. We check that for lower order moments the difference is small and does not change noticeable the results. For simplicity we ignore such corrections.

-
- [1] L. D. Landau and E.M. Lifshitz, *Statistical Physics*, Butterworth-Heinemann (1975).
 - [2] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*, Dover Publications, (1975).
 - [3] L. V. Keldysh, *Diagram Technique for Nonequilibrium Processes*, Sov. Phys. JETP **20**, 1018 (1965).
 - [4] M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii, *Thermalization and its mechanism for isolated quantum systems*, Nature **452**, 854 (2008).
 - [5] J. M. Deutsch, *Quantum statistical mechanics in a closed system*, Phys. Rev. A **43**, 2046 (1991).
 - [6] J. M. Deutsch, *A closed quantum system giving ergodicity*, unpublished, 1991, <http://physics.ucsc.edu/~josh/publications.html>.
 - [7] M. Srednicki, *Chaos and quantum thermalization*, Phys. Rev. E **50**, 888 (1994).
 - [8] B. Eckhardt, S. Fishman, J. Keating, O. Agam, J. Main, and K. Müller, *Approach to ergodicity in quantum wave functions*, Phys. Rev. E **52**, 58935903 (1995).
 - [9] B. Eckhardt, S. Fishman, K. Müller and D. Wintgen, *Semiclassical matrix elements from periodic orbits*, Phys. Rev. A **45**, 3531-3539 (1992).
 - [10] M.V. Berry, *Regular and irregular semiclassical wave functions*, J. Phys. A: Math. Gen. **10**, 2083 (1977).
 - [11] M. V. Berry, *Semiclassical Mechanics of regular and irregular motion*, in *Chaotic behaviour of deterministic systems*, p. 171, eds. G. Iooss, R. H. G. Helleman, and R. Stora, Les Houches Lecture Series Session XXXVI, North Holland, Amsterdam, (1983).
 - [12] E. J. Heller and B. R. Landry, *Statistical properties of many body eigenfunctions*, J. Phys. A **40**, 9259 (2007).
 - [13] H. Tasaki, *From quantum dynamics to the canonical distribution: general picture and a rigorous example*, Phys. Rev. Lett. **80**, 1373-1376 (1998).
 - [14] S. Goldstein, J. L. Lebowitz, R. Tumulka, and N. Zangh, *Canonical typicality*, Phys. Rev. Lett. **96**, 050403 (2006).
 - [15] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear structure, Volume 1: Single-particle motion*, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong 1998.
 - [16] J. French and S. Wong, *Validity of random matrix theories for many-particle systems*, Phys. Lett. B **33**, 449 (1970).
 - [17] J. French and S. Wong, *Some random-matrix level and spacing distributions for fixed-particle-rank interactions*, Phys. Lett. B **35**, 5 (1971).
 - [18] O. Bohigas and J. Flores, *Two-body random Hamiltonian and level density*, Phys. Lett. B **34**, 261 (1971).
 - [19] O. Bohigas and J. Flores, *Spacing and individual eigenvalue distributions of two-body random Hamiltonians*, Phys. Lett. B **35**, 383 (1971).

- [20] B. Lauritzen, P. F. Bortignon, R. A. Broglia, and V. G. Zelevinsky, *Limiting value for the width controlling the coupling of collective vibrations to the compound nucleus*, Phys. Rev. Lett. **74**, 51905193 (1995)
- [21] V. Zelevinsky and A. Volya, *Nuclear structure, random interactions and mesoscopic physics*, Phys. Rep. **391**, 311 (2004).
- [22] V. V. Flambaum and F. M. Izrailev, *Statistical theory of finite Fermi systems based on the structure of chaotic eigenstates*, Phys. Rev. E **56**, 5144-5159 (1997)
- [23] V. V. Flambaum, F. M. Izrailev, and G. Casati, *Towards a statistical theory of finite Fermi systems and compound states: Random two-body interaction approach*, Phys. Rev. E **54**, 2136 (1996).
- [24] V. V. Flambaum and F. M. Izrailev, *Distribution of occupation numbers in finite Fermi systems and role of interaction in chaos and thermalization*, Phys. Rev.
- [25] L. F. Santos, F. Borgonov, and F. M. Izrailev, *Onset of chaos and relaxation in isolated systems of interacting spins: Energy shell approach*, Phys. Rev. E **85**, 036209 (2012).
- [26] V.K.B. Kota, *Embedded random matrix ensembles for complexity and chaos in finite interacting particle systems*, Phys. Rep. **347**, 223 (2001).
- [27] J.M.G. Gómez, K. Kar, V.K.B. Kota, R.A. Molina, A. Relaño, J. Retamosa, *Many-body quantum chaos: Recent developments and applications to nuclei*, Phys. Rep. **499**, 103 (2011).
- [28] M. Rigol, V. Dunjko, V. Yurovsky, and M. Olshanii, *Relaxation in a completely integrable many-body quantum system: An ab initio study of the dynamics of the highly excited states of 1d lattice hard-core bosons*, Phys. Rev. Lett. **98**, 050405 (2007).
- [29] Y. Elon, *Eigenvectors of the discrete Laplacian on regular graphs a statistical approach*, J. Phys. A: Math. Theor. **41**, 435203 (2008).
- [30] Y. Elon, *Gaussian waves on the regular tree*, arXiv: 0907.5065 (2009).
- [31] P. Jordan and E. Wigner, Z. Physik, *Über das Paulische Äquivalenzverbot*, **47**, 631 (1928).
- [32] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Two soluble models of an antiferromagnetic chain*, Annals of Physics **16**, 407 (1961).
- [33] A. B. Zamolodchikov, *Integrals of motion and S-matrix of the (scaled) $T = T_c$ Ising-model with magnetic-field*, Int. J. Mod. Phys. A **4**, 4235 (1989).
- [34] S. Sachdev, *Quantum phase transitions* (Camb. Univ. Press, 1999).
- [35] Y. Y. Atas and E. Bogomolny, *Multifractality of eigenfunctions in spin chains*, Phys. Rev. E **86**, 021104, (2012).
- [36] Y. Y. Atas and E. Bogomolny, *Spectral density of the quantum Ising model in two fields: Gaussian and multi-Gaussian approximations*, arXiv:1402.6858 (2014).
- [37] J. P. Keating, N. Linden, and H. J. Wells, *Random matrices and spin chains*, Markov Processes and Related Fields, arXiv: 1403.1114 (2014).
- [38] J. P. Keating, N. Linden, and H. J. Wells, *Spectra and eigenstates of spin chain Hamiltonians*, arXiv: 1403.1121 (2014).
- [39] E. T. Jaynes,
- [40] , Phys. Rev. **106**, 620 (1957), *ibid* Phys. Rev. **108**, 171 (1957).
- [41] M. L. Mehta, *Matrix theory, selected topics and useful results*, Les Editions de Physique, Courtaboeuf, France (1989).
- [42] F. Leyvraz, C. Schmit, and T. H. Seligman, *Anomalous spectral statistics in a symmetrical billiard*, J. Phys. A: Math. Gen. **29**, L575 (1996).

NOTIONS DE THÉORIE DES NOMBRES

Cette annexe a pour but de présenter quelques notions de théorie des nombres. On s'intéressera en premier lieu à la notion de primalité relative, puis nous présenterons deux fonctions arithmétiques importantes : les fonctions d'Euler et de Möbius.

A.1 Nombres premiers entre eux

Deux nombres m et n sont dits premiers entre eux si leur plus grand diviseur commun (PGCD) est égal à 1. Par exemple, 6 et 35 sont premiers entre eux, mais 6 et 27 ne le sont pas parce qu'ils sont tous les deux divisibles par 3. 1 est premier avec tout entier. Dans la suite, nous adopterons la notation suivante

$$m \perp n \Leftrightarrow m, n \in \mathbb{N} \text{ et } \text{PGCD}(m, n) = 1. \quad (\text{A.1})$$

A.2 Fonction d'Euler $\phi(n)$

La fonction d'Euler, notée $\phi(n)$, est définie comme étant le nombre d'entiers positifs inférieurs à n et qui sont relativement premiers avec n . Par exemple $\phi(24) = 8$ puisque $\{1, 5, 7, 11, 13, 17, 19, 23\}$ sont relativement premiers à 24. Pour un nombre premier p , on a

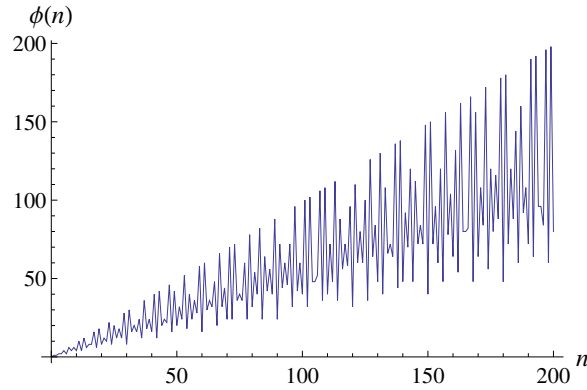


FIGURE A.1 – Fonction d'Euler $\phi(n)$.

$$\phi(p) = p - 1, \quad (\text{A.2})$$

car tous les entiers plus petits que p sont relativement premiers à p . Si $m = p^\alpha$ est un nombre premier élevé à une certaine puissance, alors les multiples de p : $p, 2p, \dots, p^{\alpha-1}p$ sont relativement premiers à m . Il s'ensuit que

$$\phi(p^\alpha) = p^\alpha - p^{\alpha-1} = p^\alpha \left(1 - \frac{1}{p}\right). \quad (\text{A.3})$$

De plus, il est montré dans [HWS07] que

$$\phi(n) = n \prod_{\substack{p|n \\ p \text{ premier}}} \left(1 - \frac{1}{p}\right), \quad (\text{A.4})$$

la notation $p|n$ signifie que p divise n . Par exemple,

$$\phi(10) = 10 \left(1 - \frac{1}{2}\right) \left(1 - \frac{1}{5}\right) = 4. \quad (\text{A.5})$$

La fonction $\phi(n)$ peut aussi être vue comme le nombre de fractions de l'intervalle $[0, 1]$ réduites à leur plus simple forme et ayant pour dénominateur n . Considérons les fractions non réduites de l'intervalle $[0, 1]$ ayant pour dénominateur 10,

$$\frac{0}{10}, \frac{1}{10}, \frac{2}{10}, \frac{3}{10}, \frac{4}{10}, \frac{5}{10}, \frac{6}{10}, \frac{7}{10}, \frac{8}{10}, \frac{9}{10}. \quad (\text{A.6})$$

Une fois réduites, on obtient

$$\frac{0}{1}, \frac{1}{10}, \frac{1}{5}, \frac{3}{10}, \frac{2}{5}, \frac{1}{2}, \frac{3}{5}, \frac{7}{10}, \frac{4}{5}, \frac{9}{10}. \quad (\text{A.7})$$

Les dénominateurs qui apparaissent sont les diviseurs de 10 et on compte bien $\phi(10) = 4$ fractions avec dénominateur 10. Le nombre de fractions par diviseur d est $\phi(d)$ et il est assez facile de voir que

$$\phi(1) + \phi(2) + \phi(5) + \phi(10) = 10.$$

La formule générale est donnée par

$$\sum_{d|n} \phi(d) = n. \quad (\text{A.8})$$

Nous verrons plus loin comment relier la fonction d'Euler à la fonction de Möbius en utilisant la formule d'inversion de Möbius.

A.3 Fonction de Möbius $\mu(n)$

La fonction de Möbius $\mu(n)$ est définie comme suit :

1. $\mu(1) = 1$;
2. si n possède un facteur carré, $\mu(n) = 0$;
3. si tous les nombres premiers $p_1, p_2, \dots, p_k$ sont distincts, $\mu(p_1 p_2 \cdots p_k) = (-1)^k$.

Il s'agit d'une fonction multiplicative par définition. Il est intéressant de noter la formule

$$\sum_{d|n} \mu(d) = 1 \quad (n = 1), \quad \sum_{d|n} \mu(d) = 0 \quad (n > 1). \quad (\text{A.9})$$

Voir [HWS07] pour la démonstration de ce résultat.

Dans ce qui suit, nous ferons usage de la formule d'inversion de Möbius. Si

$$g(n) = \sum_{d|n} f(d), \quad (\text{A.10})$$

alors

$$f(n) = \sum_{d|n} \mu\left(\frac{n}{d}\right) g(d) = \sum_{d|n} \mu(d) g\left(\frac{n}{d}\right). \quad (\text{A.11})$$

Afin de démontrer ce résultat, écrivons

$$\sum_{d|n} \mu(d) g\left(\frac{n}{d}\right) = \sum_{d|n} \mu(d) \sum_{c|\frac{n}{d}} f(c) = \sum_{cd|n} \mu(d) f(c) = \sum_{c|n} f(c) \sum_{d|\frac{n}{c}} \mu(d). \quad (\text{A.12})$$

En utilisant les propriétés (A.9), il vient que le seul terme non-nul dans la dernière somme est donné par $\frac{n}{c} = 1$ de sorte que la somme se réduit à $f(n)$. La réciproque de ce théorème est aussi vraie [HWS07]. En utilisant la formule d'inversion de Möbius sur l'équation (A.8), on trouve que la fonction d'Euler est reliée à la fonction de Möbius par

$$\phi(n) = \sum_{d|n} \mu(d) \frac{n}{d}. \quad (\text{A.13})$$

A.4 Et si on comptait des colliers

On se propose ici de retrouver la formule donnant le nombre de classe d'équivalence $a(N)$ du groupe des translations (1.39) sans passer par la formule de Witt (1.37). Un collier de longueur N à k symboles est une suite de N lettres¹ choisies parmi les k symboles disponibles. Les colliers à deux symboles sont en bijection directe avec les configurations de la chaîne de spins. Compter les colliers primitifs est donc équivalent à calculer le nombre d'orbites primitives de la chaîne de spins : le nombre de classes d'équivalence $a(N)$ est aussi égal au nombre de colliers primitifs de longueur N dans un alphabet à deux symboles $\{0, 1\}$.

Par exemple, avec les couleurs 0 et 1, nous pouvons faire des colliers de longueur $N = 4$ de $a(4) = 6$ manières différentes (voir la figure A.2). Toutes les autres configurations sont équivalentes puisque l'on considère qu'une rotation ne change pas le collier. La formule générale pour $a(N)$ a été trouvée par MacMahon [Mac91] en 1892. Nous utiliserons ici l'argument présenté dans [KGP⁺89] pour démontrer la formule de MacMahon. Reprenons donc les colliers de longueur $N = 4$ à $k = 2$ symboles et écrivons dans un tableau les configurations engendrées par l'application successive de l'opérateur de translation T^q , $q = 0, 1, 2, \dots, N - 1$ aux colliers primitifs de la figure A.2. Nous placerons chaque collier sur une ligne avec ses quatre représentations (voir Table A.1).

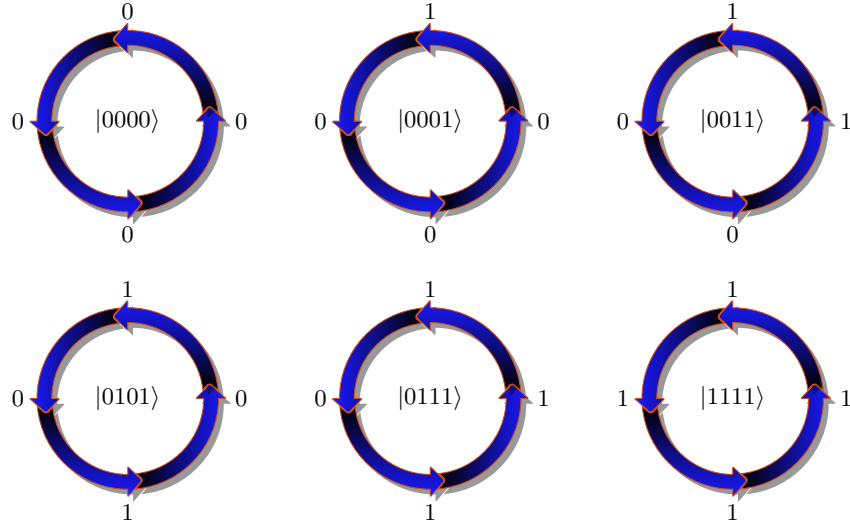


FIGURE A.2 – Colliers de longueur $N = 4$ utilisant l'alphabet $\{0, 1\}$. Les kets correspondent les représentants des classes d'équivalence.

$ n\rangle$	$\hat{T}^0 n\rangle$	$\hat{T} n\rangle$	$\hat{T}^2 n\rangle$	$\hat{T}^3 n\rangle$
$ 0\rangle$	0000	0000	0000	0000
$ 1\rangle$	0001	0010	0100	1000
$ 3\rangle$	0011	0110	1100	1001
$ 5\rangle$	0101	1010	0101	1010
$ 7\rangle$	0111	1110	1101	1011
$ 15\rangle$	1111	1111	1111	1111

TABLE A.1 – Action de l'opérateur de translation sur les colliers primitifs ou de manière équivalente sur les représentants des classes d'équivalence $|n\rangle$.

Notons tout d'abord que les 2^N mots (ou configurations) apparaissent au moins une fois dans ce tableau de $a(N) \times N$ mots, certains apparaissant plus d'une fois. Le nombre de fois où un mot ou configuration $|\sigma_0\sigma_1\cdots\sigma_{N-1}\rangle$ apparaît est égal au nombre de translations $|\sigma_p\cdots\sigma_{N-1}\sigma_0\cdots\sigma_{p-1}\rangle = \hat{T}^p|\sigma_0\sigma_1\cdots\sigma_{N-1}\rangle$ qui engendrent un mot identique au mot initial. Ainsi, $|0101\rangle$ apparaît deux fois car les 4 translations possibles de

1. Les symboles sont aussi appelés « lettres » ou « couleurs ». Une suite de symboles est appelée un mot ou configuration. Dans la suite, nous utiliserons ces différents termes de manière équivalente. Ainsi, le mot $\sigma_0\sigma_1\cdots\sigma_{N-1}$ est équivalent à la configuration $|\sigma_0\sigma_1\cdots\sigma_{N-1}\rangle$.

ce collier donnent $\{|0101\rangle, |1010\rangle, |0101\rangle, |1010\rangle\}$, ce qui n'engendre que deux configurations différentes, à savoir $|0101\rangle$ et $|1010\rangle$, qui reviennent chaque fois deux fois.

De manière générale, le nombre de fois où un mot de longueur N apparaît dans la matrice des $a(N) \times N$ mots est donné par la formule

$$\sum_{0 \leq q < N-1} \delta_{|\sigma_0 \sigma_1 \dots \sigma_{N-1}\rangle, \hat{T}^q |\sigma_0 \sigma_1 \dots \sigma_{N-1}\rangle} = \sum_{0 \leq q < N-1} \delta_{|\sigma_0 \sigma_1 \dots \sigma_{N-1}\rangle, |\sigma_q \dots \sigma_{N-1} \sigma_0 \dots \sigma_{q-1}\rangle}, \quad (\text{A.14})$$

où $\delta_{|a\rangle, |b\rangle}$ est le symbole de Kronecker valant 1 si les configurations $|a\rangle$ et $|b\rangle$ sont égales, 0 sinon. On a

$$\begin{aligned} Na(N) &= \sum_{\{\vec{\sigma}\}} \sum_{0 \leq q < N-1} \delta_{|\sigma_0 \sigma_1 \dots \sigma_{N-1}\rangle, |\sigma_q \dots \sigma_{N-1} \sigma_0 \dots \sigma_{q-1}\rangle}, \\ &= \sum_{0 \leq q < N-1} \sum_{\{\vec{\sigma}\}} \delta_{|\sigma_0 \sigma_1 \dots \sigma_{N-1}\rangle, |\sigma_q \dots \sigma_{N-1} \sigma_0 \dots \sigma_{q-1}\rangle}, \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

où la seconde somme court sur l'ensemble de toutes les configurations possibles. Trouvons maintenant combien de mots satisfont l'équation

$$\sigma_0 \sigma_1 \dots \sigma_{N-1} = \sigma_q \dots \sigma_{N-1} \sigma_0 \dots \sigma_{q-1} \quad (\text{A.16})$$

lorsque q est donné. Prenons l'exemple $N = 12$ et $q = 8$, nous cherchons les solutions de

$$\sigma_0 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \sigma_5 \sigma_6 \sigma_7 \sigma_8 \sigma_9 \sigma_{10} \sigma_{11} = \sigma_8 \sigma_9 \sigma_{10} \sigma_{11} \sigma_0 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \sigma_5 \sigma_6 \sigma_7. \quad (\text{A.17})$$

Il est clair que l'on doit avoir

$$\sigma_0 = \sigma_8 = \sigma_4; \quad \sigma_1 = \sigma_9 = \sigma_5; \quad \sigma_2 = \sigma_{10} = \sigma_6; \quad \sigma_3 = \sigma_{11} = \sigma_7. \quad (\text{A.18})$$

Le choix des $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ permet de fixer les valeurs des autres σ_i automatiquement. On a 2^4 possibilités pour le choix de ces premières positions. De manière générale, nous avons

$$\sigma_j = \sigma_{j+q \bmod N} \quad \forall j < N. \quad (\text{A.19})$$

dont les solutions sont données en égalisant σ_j avec $\sigma_{(j+lq) \bmod N}$ pour $l = 1, 2, \dots$. Nous savons que les multiples de q modulo N sont $\{0, d, 2d, \dots, N-d\}$ avec $d = \text{PGCD}(q, N)$. Il s'ensuit que la solution générale consiste à choisir $\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{d-1}$ de façon indépendante et d'assigner $\sigma_j = \sigma_{j-d}$ pour $d \leq j < N$. Il y a 2^d solutions².

Il vient donc que

$$Na(N) = \sum_{0 \leq q < N} 2^{\text{PGCD}(q, N)}. \quad (\text{A.20})$$

Comme $d|N$, nous pouvons simplifier cette somme en écrivant

$$a(N) = \frac{1}{N} \sum_{d|N} 2^d \sum_{0 \leq q < N} \delta_{d, \text{PGCD}(q, N)}, \quad (\text{A.21})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{d|N} 2^d \sum_{0 \leq q < N} [q/d \perp N/d], \quad (\text{A.22})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{d|N} 2^d \sum_{0 \leq q < N/d} [q \perp N/d], \quad (\text{A.23})$$

où le symbole $[Q]$ renvoie 1 si la propriété Q est vérifiée, 0 dans le cas contraire. La seconde somme compte le nombre d'entiers plus petits que N/d et relativement premier à N/d . Par définition, on a $\sum_{0 \leq q < N/d} [q \perp N/d] = \phi(N/d)$ où ϕ est la fonction d'Euler (voir sections A.1 et A.2). Nous avons ainsi démontré que

$$a(N) = \frac{1}{N} \sum_{d|N} 2^d \phi\left(\frac{N}{d}\right) = \frac{1}{N} \sum_{d|N} 2^{N/d} \phi(d). \quad (\text{A.24})$$

2. Dans le cas d'un alphabet à k lettres, le nombre de solutions de l'équation (A.16) à q fixé est donné par k^d avec $d = \text{PGCD}(q, N)$.

FORMALISME GÉNÉRAL POUR LES DENSITÉS D'ÉTATS DES MODÈLES INTÉGRABLES

B.1 Méthode du col

Considérons un modèle intégrable dont les énergies propres $\{E_p\}_{0 \leq p \leq M-1}$ sont données par la forme (2.43)

$$E_{\vec{n}} = \sum_{k=0}^{N-1} \Lambda_k \left(n_k - \frac{1}{2} \right), \quad \vec{n} = |n_0, n_1, \dots, n_{N-1}\rangle \quad (\text{B.1})$$

avec M la taille de l'espace de Hilbert ($M = 2^N$ pour les systèmes de chaînes de spins 1/2). Comme il est montré dans l'Annexe C, le spectre du modèle d'Ising en champ transverse prend effectivement cette forme avec des excitations de type fermioniques. Soit

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{M} \sum_{\{\vec{n}\}} e^{-\beta E_{\vec{n}}} \quad (\text{B.2})$$

la fonction de partition du modèle. C'est une quantité très importante puisqu'elle donne accès à l'ensemble des quantités thermodynamiques du problème. De plus, il est facile de voir que la densité d'état est donnée par la transformée de Laplace inverse de la fonction de partition

$$\rho(E) = \frac{1}{2i\pi} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} Z_N(\beta) e^{\beta E} d\beta. \quad (\text{B.3})$$

Il s'ensuit que si la fonction de partition $Z_N(\beta)$ du modèle est connue, on peut alors espérer calculer exactement l'intégrale (B.3). Cependant, l'intégrale ne peut généralement pas être obtenue exactement car étant trop compliquée. Une approche approximative est alors nécessaire. Ce type d'intégrale est souvent rencontrée en physique : afin d'en donner une approximation, les physiciens utilisent souvent la méthode du point col [BM98, Bet37, GC65, Bri16]. Réécrivons à cet effet la densité comme

$$\rho(E) = \frac{1}{2i\pi} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp(N S(E, \beta)) d\beta \quad (\text{B.4})$$

avec

$$S(E, \beta) = \beta \frac{E}{N} + \frac{1}{N} \ln Z_N(\beta) \quad (\text{B.5})$$

l'entropie du système à la température β . Notons qu'il s'agit là d'une quantité extensive [Gri04] : c'est une fonction uniquement de $e = E/N$. Nous verrons que dans le cas particulier du modèle d'Ising et en général, le terme $1/N \ln Z_N(\beta)$ est indépendant de N dans la limite thermodynamique. L'approximation du col consiste à développer l'entropie $S(E, \beta)$ en série de Taylor autour d'un maximum β_0 . Pour $N \rightarrow \infty$, seuls les points au voisinage de β_0 vont contribuer significativement au calcul de l'intégrale (B.4) et on obtient

$$\rho(E) = \frac{\exp(N S(E, \beta_0))}{\sqrt{2\pi N |S''(E, \beta_0)|}} \quad (\text{B.6})$$

où β_0 est la solution de

$$\left. \frac{\partial S(E, \beta)}{\partial \beta} \right|_{\beta=\beta_0} = \frac{E}{N} + \frac{1}{N} \left. \frac{\partial \ln Z_N(\beta)}{\partial \beta} \right|_{\beta=\beta_0} = 0. \quad (\text{B.7})$$

En utilisant la forme de l'entropie (B.5) et la relation thermodynamique pour les fluctuations d'énergie à la température β ,

$$\sigma_N^2(\beta) = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \frac{\partial^2 \ln Z_N(\beta)}{\partial \beta^2}, \quad (\text{B.8})$$

on trouve que la densité s'écrit comme

$$\rho(E) = \frac{Z_N(\beta_0)}{\sigma_N(\beta_0)} \frac{e^{\beta_0 E}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (\text{B.9})$$

Cette dernière équation ne signifie nullement que la densité se comporte exponentiellement avec l'énergie E puisque la solution β_0 de (B.7) dépend de manière non-triviale de l'énergie E .

B.2 Cas du spectre fermionique

Dans le cas d'un spectre d'excitation fermionique de la forme (2.43), la fonction de partition s'écrit

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{2^N} \sum_{n_0=0}^1 \sum_{n_1=0}^1 \cdots \sum_{n_{N-1}=0}^1 \exp \left[-\beta \sum_{k=0}^{N-1} \Lambda_k \left(n_k - \frac{1}{2} \right) \right] = \exp \left(\sum_{k=0}^{N-1} \ln \cosh \left(\beta \frac{\Lambda_k}{2} \right) \right)$$

Il vient que l'entropie du système (B.5) s'écrit

$$S(E, \beta) = \beta \frac{E}{N} + \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \ln \cosh \left(\beta \frac{\Lambda_k}{2} \right) \quad (\text{B.10})$$

et l'équation définissant le point col est donnée par

$$\sum_{k=0}^{N-1} \frac{\Lambda_k}{2} \tanh \left(\beta_0 \frac{\Lambda_k}{2} \right) = -E. \quad (\text{B.11})$$

Dans la limite thermodynamique, les sommes sur k apparaissant dans (B.10) et (B.11) peuvent être transformées en des intégrales à condition que les intégrands soient des fonctions assez lisses.

B.3 Approximation gaussienne dans le bulk

Pour $E \sim 0$, une solution approximative de (B.11) est donnée par

$$\beta_0 = -\frac{4E}{\sum_{k=0}^{N-1} \Lambda_k^2} \ll 1. \quad (\text{B.12})$$

En utilisant (B.9), il vient que la densité dans le bulk est bien approchée par la gaussienne

$$\rho(E) = \frac{1}{\sigma_N \sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{4E^2}{2 \sum_{k=0}^{N-1} \Lambda_k^2} \right), \quad \sigma_N^2 = \sum_{k=0}^{N-1} \left(\frac{\Lambda_k}{2} \right)^2. \quad (\text{B.13})$$

Le facteur 2 au dénominateur dans l'exponentielle a été introduit afin d'assurer la normalisation de la densité. Le comportement aux queues de la densité peut être étudié en regardant la limite $\beta_0 \rightarrow \pm\infty$. En première approximation, l'équation du col conduit à

$$E \underset{\beta_0 \rightarrow \pm\infty}{\sim} \mp \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \Lambda_k \pm \sum_{k=0}^{N-1} \Lambda_k \exp(\mp \beta_0 \Lambda_k) = \pm E_0 + \text{corrections}. \quad (\text{B.14})$$

C'est la méthode du col appliqué aux queues de la densité qui a permis à Bethe d'obtenir le résultat (2.3). Pour aller plus loin dans le développement, il faut abandonner le point de vue général que nous avons adopté jusqu'à présent et spécifier une forme pour le spectre d'excitation Λ_k . Par exemple, nous verrons dans la suite que dans le cas particulier du modèle d'Ising en champ transverse, la forme du spectre d'excitation conduit à des comportements qui ressemblent au résultat de Bethe (2.3).

B.4 Limite de l'approximation du col

La fonction Λ_k dépend d'un paramètre du problème. Par exemple, dans le cas du modèle d'Ising en champ transverse (2.51), Λ_k dépend du champ transverse λ et il existe des valeurs de ce champ (les valeurs extrêmes $\lambda \rightarrow 0$ et $\lambda \rightarrow \infty$ correspondant aux limites classiques du Hamiltonien quantique) pour lesquelles la fonction Λ_k devient indépendante de k . Dans ces limites l'approximation du point col ne tient plus en raison de la forte dégénérescence des états d'énergies.

DIAGONALISATION EXACTE DU MODÈLE D'ISING EN CHAMP TRANSVERSE

Nous allons utiliser des méthodes de seconde quantification pour diagonaliser exactement l'Hamiltonien d'Ising en champ transverse. Nous commençons par la chaîne avec des conditions aux bords périodiques, puis détaillons le calcul pour la chaîne libre.

C.1 Transformation de Jordan-Wigner ou comment obtenir des fermions à partir de spins 1/2

Le Hamiltonien de Ising unidimensionnel en présence d'un champ transverse s'écrit

$$\hat{H} = - \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x - \lambda \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^z. \quad (\text{C.1})$$

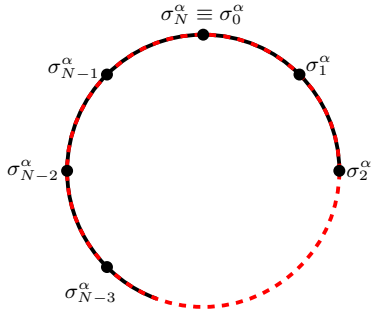


FIGURE C.1 – Réseau unidimensionnel de N spins quantiques avec conditions aux bords périodiques. À chaque noeud du réseau, on définit un ensemble d'opérateurs de Pauli $\hat{\sigma}_n^\alpha$ avec $\alpha = x, y, z$.

Jordan et Wigner proposent en 1928 une transformation qui transforme le modèle en un Hamiltonien de fermions sans interaction [JW93]. Leur idée consiste à introduire un facteur de phase de nature non locale afin que les relations d'anticommutation fermionique soient respectées. La transformation proposée s'écrit

$$a_n = \prod_{j=0}^{n-1} e^{i\pi \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^-} \hat{\sigma}_n^-, \quad a_n^\dagger = \hat{\sigma}_n^+ \prod_{j=0}^{n-1} e^{-i\pi \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^-}, \quad (\text{C.2})$$

avec $\hat{\sigma}_n^+ = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_n^x + i\hat{\sigma}_n^y)$ et $\hat{\sigma}_n^- = (\hat{\sigma}_n^+)^{\dagger}$. Nous allons montrer qu'elles redonnent exactement les relations d'anticommutation

$$\{a_n, a_m^\dagger\} = \delta_{n,m}, \quad \{a_n^\dagger, a_m^\dagger\} = \{a_n, a_m\} = 0 \quad (\text{C.3})$$

Vérifions à titre d'exemple le premier anticommutateur. En utilisant le développement en série de l'exponentielle et le fait que $(\hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^-)^2 = \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^-$, on trouve que

$$e^{i\pi \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^-} = 1 - 2\hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^- = e^{-i\pi \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^-} \quad (\text{C.4})$$

Il s'ensuit que l'on a

$$e^{i\pi \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^-} = -\hat{\sigma}_j^z. \quad (\text{C.5})$$

En utilisant cette expression dans (C.2), on peut exprimer l'anticommutateur dans le cas $n \geq m$

$$\begin{aligned} \{a_n, a_m^\dagger\} &= \prod_{j=0}^{n-1} (-\hat{\sigma}_j^z) \hat{\sigma}_n^- \hat{\sigma}_m^+ \prod_{k=0}^{m-1} (-\hat{\sigma}_k^z) + \hat{\sigma}_m^+ \prod_{k=0}^{m-1} (-\hat{\sigma}_k^z) \prod_{j=0}^{n-1} (-\hat{\sigma}_j^z) \hat{\sigma}_n^-, \\ &= \hat{\sigma}_n^- \prod_{j=m}^{n-1} (-\hat{\sigma}_j^z) \hat{\sigma}_m^+ + \hat{\sigma}_m^+ \prod_{k=m}^{n-1} (-\hat{\sigma}_k^z) \hat{\sigma}_n^-. \end{aligned}$$

Si $n = m$ on a

$$\{a_n, a_n^\dagger\} = \hat{\sigma}_n^- \hat{\sigma}_n^+ + \hat{\sigma}_n^+ \hat{\sigma}_n^- = \{\hat{\sigma}_n^-, \hat{\sigma}_n^+\} = 1 \quad (\text{C.6})$$

et si $n > m$ on peut écrire

$$\{a_n, a_m^\dagger\} = \hat{\sigma}_n^- (-\hat{\sigma}_m^z \hat{\sigma}_m^+ - \hat{\sigma}_m^+ \hat{\sigma}_m^z) \prod_{j=m+1}^{n-1} (-\hat{\sigma}_j^z). \quad (\text{C.7})$$

Comme

$$\begin{aligned} (\hat{\sigma}_m^z \hat{\sigma}_m^+ + \hat{\sigma}_m^+ \hat{\sigma}_m^z) |\uparrow\rangle_m &= 0, \\ (\hat{\sigma}_m^z \hat{\sigma}_m^+ + \hat{\sigma}_m^+ \hat{\sigma}_m^z) |\downarrow\rangle_m &= 0, \end{aligned}$$

il vient que $\{a_n, a_m^\dagger\} = \delta_{n,m}$ ce qu'il fallait montrer. Le calcul des autres relations d'anticommutation se fait de la même manière.

Le facteur de phase apparaissant devant les opérateurs d'échelles $\prod_{j=0}^{n-1} e^{i\pi \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^-}$ comptent le nombre de spins *up* ou de manière équivalente le nombre de fermions sur la chaîne avant le site n . De plus comme $a_n^\dagger a_n = \hat{\sigma}_n^+ \hat{\sigma}_n^-$ il vient les relations inverses¹

$$\hat{\sigma}_n^+ = a_n^\dagger \prod_{j=0}^{n-1} e^{i\pi a_j^\dagger a_j}, \quad \hat{\sigma}_n^- = \prod_{j=0}^{n-1} e^{-i\pi a_j^\dagger a_j} a_n. \quad (\text{C.8})$$

Ceci permet d'exprimer facilement les produits de la forme $\hat{\sigma}_n^\pm \hat{\sigma}_m^\pm$. Ici nous n'aurons besoin que du cas où $m = n + 1$ puisque notre Hamiltonien (C.1) ne contient que des termes d'interaction avec les plus proches voisins. Calculons à titre d'exemple $\hat{\sigma}_n^+ \hat{\sigma}_{n+1}^-$. On a en utilisant les expressions (C.8)

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_n^+ \hat{\sigma}_{n+1}^- &= a_n^\dagger \prod_{j=0}^{n-1} e^{i\pi a_j^\dagger a_j} \prod_{j=0}^n e^{-i\pi a_j^\dagger a_j} a_{n+1}, \\ &= a_n^\dagger e^{-i\pi a_n^\dagger a_n} a_{n+1}. \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Développons l'exponentielle en série entière

$$e^{-i\pi a_n^\dagger a_n} = \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{(-i\pi)^j}{j!} (a_n^\dagger a_n)^j. \quad (\text{C.10})$$

Utilisant le fait que $\{a_n^\dagger, a_n\} = 1$ et $a_n^2 = 0$, on a la relation suivante $(a_n^\dagger a_n)^2 = a_n^\dagger a_n$. Il s'ensuit que

$$e^{-i\pi a_n^\dagger a_n} = 1 + a_n^\dagger a_n \sum_{j=1}^{+\infty} \frac{(-i\pi)^j}{j!} = 1 - 2a_n^\dagger a_n. \quad (\text{C.11})$$

On trouve finalement

$$\hat{\sigma}_n^+ \hat{\sigma}_{n+1}^- = a_n^\dagger (1 - 2a_n^\dagger a_n) a_{n+1} = a_n^\dagger a_{n+1}.$$

De la même manière, on a

$$\hat{\sigma}_n^+ \hat{\sigma}_{n+1}^- = a_n^\dagger a_{n+1}, \quad (\text{C.12})$$

$$\hat{\sigma}_n^+ \hat{\sigma}_{n+1}^+ = a_n^\dagger a_{n+1}^\dagger, \quad (\text{C.13})$$

$$\hat{\sigma}_n^- \hat{\sigma}_{n+1}^+ = -a_n a_{n+1}^\dagger, \quad (\text{C.14})$$

$$\hat{\sigma}_n^- \hat{\sigma}_{n+1}^- = -a_n a_{n+1}. \quad (\text{C.15})$$

Il est clair que si les opérateurs de Pauli vérifient la relation de périodicité, il en va de même pour les opérateurs d'échelles (de spins) :

$$\hat{\sigma}_{n+N}^\pm = \hat{\sigma}_n^\pm. \quad (\text{C.16})$$

1. Pour $n = 0$ on a de manière triviale $\hat{\sigma}_0^+ = a_0^\dagger$ et $\hat{\sigma}_0^- = a_0$.

En utilisant (C.8), ceci impose les conditions suivantes sur les opérateurs fermioniques :

$$a_{n+N}^\dagger = a_n^\dagger e^{-i\pi\hat{\mathcal{N}}}, \quad (\text{C.17})$$

$$a_{n+N} = e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}} a_n, \quad (\text{C.18})$$

où $\hat{\mathcal{N}} = \sum_{n=0}^{N-1} a_n^\dagger a_n$ est le nombre total de fermions sur la chaîne quantique.

Exprimons maintenant le Hamiltonien d'Ising en champ transverse en fonction des opérateurs fermioniques en faisant attention au terme cyclique $j = N-1$. En utilisant les relations (C.12)-(C.15), on trouve que le terme qui retourne des spins voisins s'exprime comme

$$\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x = (\hat{\sigma}_j^+ + \hat{\sigma}_j^-) (\hat{\sigma}_{j+1}^+ + \hat{\sigma}_{j+1}^-) = (a_j^\dagger - a_j) (a_{j+1}^\dagger + a_{j+1}). \quad (\text{C.19})$$

et le terme diagonal s'écrit

$$\hat{\sigma}_j^z = 2\hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^- - 1 = 2a_j^\dagger a_j - 1. \quad (\text{C.20})$$

Pour $n = N-1$, les relations (C.12)-(C.15) se transforment en

$$\hat{\sigma}_{N-1}^+ \hat{\sigma}_0^- = -a_{N-1}^\dagger a_0 e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}}, \quad (\text{C.21})$$

$$\hat{\sigma}_{N-1}^+ \hat{\sigma}_0^+ = -a_{N-1}^\dagger a_0^\dagger e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}}, \quad (\text{C.22})$$

$$\hat{\sigma}_{N-1}^- \hat{\sigma}_0^+ = a_{N-1} a_0^\dagger e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}}, \quad (\text{C.23})$$

$$\hat{\sigma}_{N-1}^- \hat{\sigma}_0^- = a_{N-1} a_0 e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}}. \quad (\text{C.24})$$

A titre d'exemple montrons comment on obtient la formule (C.21). Tout d'abord en utilisant (C.8) on a

$$\hat{\sigma}_{N-1}^+ \hat{\sigma}_0^- = a_{N-1}^\dagger \prod_{j=0}^{N-1} e^{i\pi a_j^\dagger a_j} a_0. \quad (\text{C.25})$$

Comme $(\sigma_k^\pm)^2 = 0$, il vient

$$\hat{\sigma}_{N-1}^+ \hat{\sigma}_0^- = \hat{\sigma}_{N-1}^+ (1 - 2\hat{\sigma}_{N-1}^+ \hat{\sigma}_{N-1}^-) \hat{\sigma}_0^-. \quad (\text{C.26})$$

Maintenant, en se souvenant que $e^{i\pi a_{N-1}^\dagger a_{N-1}} = (1 - 2\hat{\sigma}_{N-1}^+ \hat{\sigma}_{N-1}^-)$ on a

$$\begin{aligned} \sigma_{N-1}^+ \sigma_0^- &= \sigma_{N-1}^+ e^{i\pi a_{N-1}^\dagger a_{N-1}} \sigma_0^-, \\ &= a_{N-1}^\dagger \prod_{j=0}^{N-1} e^{i\pi a_j^\dagger a_j} a_0, \\ &= a_{N-1}^\dagger e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}} a_0 \end{aligned} \quad (\text{C.27})$$

Il faut maintenant faire passer l'opérateur a_0 à gauche de l'exponentielle, on utilise pour cela les relations d'anticommuation. On utilise à cet effet l'astuce habituelle qui consiste à écrire l'exponentielle comme

$$\prod_{j=0}^{N-1} e^{i\pi a_j^\dagger a_j} a_0 = \prod_{j=0}^{N-1} (1 - 2a_j^\dagger a_j) a_0. \quad (\text{C.28})$$

Pour $j \neq 0$ on a facilement $(1 - 2a_j^\dagger a_j) a_0 = a_0 (1 - 2a_j^\dagger a_j)$ et pour $j = 0$, $(1 - 2a_0^\dagger a_0) a_0 = a_0 = -a_0 (1 - 2a_0^\dagger a_0)$. Il en résulte que

$$\hat{\sigma}_{N-1}^+ \hat{\sigma}_0^- = -a_{N-1}^\dagger a_0 e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}}. \quad (\text{C.29})$$

Finalement on obtient la forme suivante pour le Hamiltonien d'Ising en termes des opérateurs fermioniques

$$\hat{H} = - \sum_{j=0}^{N-2} (a_j^\dagger - a_j) (a_{j+1}^\dagger + a_{j+1}) - \lambda \sum_{j=0}^{N-1} (2a_j^\dagger a_j - 1) + (a_{N-1}^\dagger - a_{N-1}) (a_0^\dagger + a_0) e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}}. \quad (\text{C.30})$$

Cette expression du Hamiltonien est presque quadratique : seul la présence de l'opérateur $\hat{\mathcal{N}}$ qui compte le nombre de fermions sur la chaîne fait défaut. Cependant, nous savons que le spectre de l'opérateur $\hat{\mathcal{N}}$ prend ses

valeurs dans $\mathbb{N}$ (i.e ses valeurs propres sont des entiers comptant le nombre de fermions N_f dans l'état quantique de la chaîne). Il s'ensuit que $e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}}$ ne peut prendre que les valeurs ± 1 . Le nombre de fermion n'est pas fixé (la présence des opérateurs de création et annihilation en est une preuve) : au maximum on en a N mais il peut y en avoir moins sur la chaîne (certains sites pouvant être vides).

Le Hamiltonien (C.1) possède la symétrie $\mathbb{Z}_2$: il est invariant par la transformation de parité

$$\hat{\mathcal{P}}\hat{\sigma}_j^x\hat{\mathcal{P}}^{-1} = -\hat{\sigma}_j^x, \quad \hat{\mathcal{P}} = \prod_{j=0}^{N-1} \hat{\sigma}_j^z. \quad (\text{C.31})$$

Comme $\hat{\mathcal{P}}$ commute avec $\hat{H}$ on peut classer les états propres de l'Hamiltonien selon la parité qui constitue un *bon* nombre quantique. De plus $\hat{\mathcal{N}}$ s'exprime assez facilement en fonction de $\hat{\mathcal{P}}$. En effet, en utilisant (C.5) on a

$$e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}} = (-1)^N \hat{\mathcal{P}}. \quad (\text{C.32})$$

Dans le Hamiltonien on peut choisir $e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}} = \pm 1$ de manière à ce que $\hat{H}$ prennent une forme quadratique mais ce choix doit se répercuter sur les conditions aux limites. Par exemple en se restreignant au chaîne quantique avec N pair, $e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}}$ et $\hat{\mathcal{P}}$ sont confondus et on peut écrire le hamiltonien comme

$$\hat{H} = - \sum_{j=0}^{N-1} \left[\left(a_j^\dagger - a_j \right) \left(a_{j+1}^\dagger + a_{j+1} \right) + \lambda \left(2a_j^\dagger a_j - 1 \right) \right], \quad (\text{C.33})$$

et les conditions aux limites dépendent de la parité du nombre d'excitations fermioniques de la chaîne quantique. Si le nombre d'excitations fermioniques sur la chaîne est pair, $\hat{\mathcal{P}} = +1$ et on obtient des conditions aux bords antipériodique pour les fermions de Jordan-Wigner, $a_N = -a_0$. Par contre si le nombre d'excitations fermioniques est impair, $\hat{\mathcal{P}} = -1$ et il vient des conditions aux bords périodiques pour les fermions $a_N = a_0$. Nous allons voir que ces conditions aux limites entraînent une quantification différente pour les impulsions des modes de Fourier. Dans la limite thermodynamique, $N \rightarrow \infty$, les conditions aux bords ne jouent pas de rôle important et les valeurs des impulsions dans les différents secteur de parité se confondent (les termes correctifs sont en $1/N$).

C.1.1 Décomposition de Fourier

Le Hamiltonien (C.33) est invariant par translation, nous pouvons donc décomposer les opérateurs fermioniques sur la base de Fourier

$$a_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikn} b_k^\dagger, \quad (\text{C.34})$$

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikn} b_k. \quad (\text{C.35})$$

Pour éviter tout risques de confusion les opérateurs de l'espace réciproque auront un indice k et ceux de l'espace réel un indice n . Les conditions aux bords antipériodiques ou périodiques entraînent une quantification différente de k suivant le secteur de parité dans lequel on se trouve. Dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$, nous avons des conditions aux bords antipériodiques, $a_N = -a_0$ qui conduisent à la condition de quantification

$$e^{\pm ikN} = -1. \quad (\text{C.36})$$

Il s'ensuit que les valeurs des modes de Fourier k dans le secteur $\mathcal{P} = +1$ sont données par

$$k_p = (2p+1)\frac{\pi}{N} - \pi, \quad p = 0, 1, \dots, N-1. \quad (\text{C.37})$$

Dans le secteur de parité $\mathcal{P} = -1$, les conditions aux bords périodiques $a_N = a_0$ entraînent que

$$e^{\pm ikN} = 1. \quad (\text{C.38})$$

Il vient que l'on a la quantification suivante pour les impulsions k

$$k_p = \frac{2p\pi}{N} - \pi, \quad p = 0, 1, \dots, N-1. \quad (\text{C.39})$$

Les séries de Fourier (C.34) et (C.35) s'inversent facilement, on a

$$b_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{-ikn} a_n^\dagger, \quad (\text{C.40})$$

$$b_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{ikn} a_n. \quad (\text{C.41})$$

En utilisant les relations d'orthogonalisation on montre sans trop de peine que

$$\sum_{n=0}^{N-1} a_n^\dagger a_n = \sum_k b_k^\dagger b_k, \quad (\text{C.42})$$

$$\sum_{n=0}^{N-1} a_n^\dagger a_{n+1}^\dagger = \sum_k e^{-ik} b_k^\dagger b_{-k}^\dagger, \quad (\text{C.43})$$

$$\sum_{n=0}^{N-1} a_n^\dagger a_{n+1} = \sum_k e^{-ik} b_k^\dagger b_k, \quad (\text{C.44})$$

$$\sum_{n=0}^{N-1} a_n a_{n+1}^\dagger = \sum_k e^{+ik} b_k b_k^\dagger, \quad (\text{C.45})$$

$$\sum_{n=0}^{N-1} a_n a_{n+1} = \sum_k e^{+ik} b_k b_{-k}. \quad (\text{C.46})$$

En remplaçant dans le Hamiltonien (C.33), on trouve que dans l'espace réciproque le Hamiltonien s'exprime comme

$$\hat{H} - N\lambda = - \sum_k \left[2(\lambda + \cos k) b_k^\dagger b_k + e^{-ik} b_k^\dagger b_{-k}^\dagger - e^{ik} b_k b_{-k} \right]. \quad (\text{C.47})$$

Notons que ce Hamiltonien possède une forme analogue au Hamiltonien de la théorie BCS de la superconductivité et se diagonalise par conséquent avec les mêmes techniques [BCS57].

C.1.2 Transformation de Bogoliubov

Nous cherchons à écrire le Hamiltonien sous la forme diagonale

$$\hat{H} = \sum_k \Lambda_k \eta_k^\dagger \eta_k + \text{cste}, \quad (\text{C.48})$$

où les opérateurs $\eta_k^\dagger$ et η_k sont des opérateurs de création et d'annihilation fermioniques. La méthode de Bogoliubov-Valatin consiste à poser

$$\begin{cases} \eta_k = u_k b_k + i v_k b_{-k}^\dagger, \\ \eta_k^\dagger = u_k b_k^\dagger - i v_k b_{-k}. \end{cases} \quad (\text{C.49})$$

On impose ensuite les relations d'anticommutation fermionique sur les opérateurs η_k et $\eta_k^\dagger$

$$\left\{ \eta_k, \eta_{k'}^\dagger \right\} = \delta_{k,k'}, \quad \left\{ \eta_k^\dagger, \eta_{k'}^\dagger \right\} = \left\{ \eta_k, \eta_{k'} \right\} = 0 \quad (\text{C.50})$$

ce qui nous permet de poser

$$u_k = \cos \theta_k \quad \text{et} \quad v_k = \sin \theta_k \quad (\text{C.51})$$

où les θ_k sont les angles de la rotation de Bogoliubov qui vont être déterminé en éliminant les éléments non-diagonaux dans la nouvelle représentation. Les relations (C.49) s'inversent assez facilement, on a

$$\begin{cases} b_k = \cos \theta_k \eta_k - i \sin \theta_k \eta_{-k}^\dagger, \\ b_k^\dagger = \cos \theta_k \eta_k^\dagger + i \sin \theta_k \eta_{-k}. \end{cases} \quad (\text{C.52})$$

On peut alors exprimer les différents termes apparaissant dans (C.47)

$$b_k^\dagger b_k = \cos^2 \theta_k \eta_k^\dagger \eta_k + \sin^2 \theta_k \eta_{-k} \eta_{-k}^\dagger + \frac{i}{2} \sin 2\theta_k \left(\eta_{-k} \eta_k - \eta_k^\dagger \eta_{-k}^\dagger \right), \quad (\text{C.53})$$

$$b_k^\dagger b_{-k}^\dagger = \cos^2 \theta_k \eta_k^\dagger \eta_{-k}^\dagger + \sin^2 \theta_k \eta_{-k} \eta_k + \frac{i}{2} \sin 2\theta_k \left(\eta_{-k} \eta_{-k}^\dagger - \eta_k^\dagger \eta_k \right), \quad (\text{C.54})$$

$$b_k b_{-k} = \cos^2 \theta_k \eta_k \eta_{-k} + \sin^2 \theta_k \eta_{-k}^\dagger \eta_k^\dagger + \frac{i}{2} \sin 2\theta_k \left(\eta_k \eta_k^\dagger - \eta_{-k}^\dagger \eta_{-k} \right). \quad (\text{C.55})$$

En injectant ces expressions dans le Hamiltonien (C.47) et en utilisant astucieusement les relations d'anticommutation, on obtient une somme de termes diagonaux et non-diagonaux.

Termes diagonaux

Intéressons nous tout d'abord aux termes diagonaux du type $\eta^\dagger \eta$ et $\eta \eta^\dagger$, on a (la somme sur k est sous entendue)

$$\begin{aligned} & \eta_k^\dagger \eta_k \left[2(\lambda + \cos k) \cos^2 \theta_k - e^{-ik} \frac{i}{2} \sin 2\theta_k + e^{ik} \frac{i}{2} \sin 2\theta_k \right] - e^{ik} \frac{i}{2} \sin 2\theta_k \\ & + \eta_{-k} \eta_{-k}^\dagger \left[2(\lambda + \cos k) \sin^2 \theta_k + e^{-ik} \frac{i}{2} \sin 2\theta_k - e^{ik} \frac{i}{2} \sin 2\theta_k \right] + e^{ik} \frac{i}{2} \sin 2\theta_k. \end{aligned} \quad (\text{C.56})$$

Les deux termes scalaires proviennent des relations d'anticommutation et se simplifient. En remplaçant $\eta_{-k} \eta_{-k}^\dagger$ par $1 - \eta_{-k}^\dagger \eta_{-k}$, il vient

$$\begin{aligned} & \eta_k^\dagger \eta_k [2(\lambda + \cos k) \cos^2 \theta_k - \sin 2\theta_k \sin k] \\ & - \eta_{-k}^\dagger \eta_{-k} [2(\lambda + \cos k) \sin^2 \theta_k + \sin 2\theta_k \sin k] \\ & + [2(\lambda + \cos k) \sin^2 \theta_k + \sin 2\theta_k \sin k] \end{aligned} \quad (\text{C.57})$$

Dans le deuxième terme, si on fait le changement d'indice $k \rightarrow -k$ et que l'on suppose que $\sin 2\theta_k$ est une fonction impaire de k , ce que nous vérifierons après coup, on trouve que la contribution de la partie diagonale est donnée par

$$- \sum_k \eta_k^\dagger \eta_k [2(\lambda + \cos k) \cos 2\theta_k - 2 \sin 2\theta_k \sin k] - \sum_k [2(\lambda + \cos k) \sin^2 \theta_k + \sin 2\theta_k \sin k]. \quad (\text{C.58})$$

Termes non diagonaux

La partie non diagonale du Hamiltonien provient des termes de la forme $\eta^\dagger \eta^\dagger$ et $\eta \eta$. On a

$$\begin{aligned} & \eta_k^\dagger \eta_{-k}^\dagger \left[-2(\lambda + \cos k) \frac{i}{2} \sin 2\theta_k + e^{-ik} \cos^2 \theta_k + e^{ik} \sin^2 \theta_k \right] \\ & + \eta_k \eta_{-k} \left[-2(\lambda + \cos k) \frac{i}{2} \sin 2\theta_k - e^{-ik} \sin^2 \theta_k - e^{ik} \cos^2 \theta_k \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.59})$$

Dans le deuxième terme, en faisant la substitution $k \rightarrow -k$ et l'hypothèse $\sin 2\theta_{-k} = -\sin 2\theta_k$ on peut regrouper les deux termes pour obtenir

$$- \sum_k (\eta_k^\dagger \eta_{-k}^\dagger + \eta_k \eta_{-k}) (-i(\lambda + \cos k) \sin 2\theta_k + e^{-ik} \cos^2 \theta_k + e^{ik} \sin^2 \theta_k) \quad (\text{C.60})$$

Il est facile de voir que

$$e^{-ik} \cos^2 \theta_k + e^{ik} \sin^2 \theta_k = \cos k - i \sin k \cos 2\theta_k. \quad (\text{C.61})$$

Comme la fonction cosinus est paire, en faisant le changement d'indice $k \rightarrow -k$ et en utilisant les relations d'anticommutation $\eta_{-k}^\dagger \eta_k^\dagger = -\eta_k^\dagger \eta_{-k}^\dagger$ et $\eta_{-k} \eta_k = -\eta_k \eta_{-k}$, on trouve que

$$- \sum_k (\eta_k^\dagger \eta_{-k}^\dagger + \eta_k \eta_{-k}) \cos k = 0. \quad (\text{C.62})$$

Par conséquent, la contribution des termes non diagonaux se simplifie en

$$i \sum_k (\eta_k^\dagger \eta_{-k}^\dagger + \eta_k \eta_{-k}) [(\lambda + \cos k) \sin 2\theta_k + \sin k \cos 2\theta_k]. \quad (\text{C.63})$$

L'expression du Hamiltonien en fonction des opérateurs $\eta^\dagger$ et η est donc donnée par la somme des contributions diagonales et non diagonales

$$\begin{aligned} \hat{H} - N\lambda = & - \sum_k \eta_k^\dagger \eta_k [2(\lambda + \cos k) \cos 2\theta_k - 2 \sin 2\theta_k \sin k] \\ & - \sum_k [2(\lambda + \cos k) \sin^2 \theta_k + \sin 2\theta_k \sin k] \\ & + i \sum_k (\eta_k^\dagger \eta_{-k}^\dagger + \eta_k \eta_{-k}) [(\lambda + \cos k) \sin 2\theta_k + \sin k \cos 2\theta_k]. \end{aligned} \quad (\text{C.64})$$

La compatibilité avec la forme diagonale (C.48) impose d'annuler le dernier terme entre crochet

$$(\lambda + \cos k) \sin 2\theta_k + \sin k \cos 2\theta_k = 0 \quad (\text{C.65})$$

donnant ainsi les angles de Bogoliubov

$$\tan(2\theta_k) = -\frac{\sin k}{\lambda + \cos k}. \quad (\text{C.66})$$

De la trigonométrie élémentaire donne

$$\sin 2\theta_k = \frac{\sin k}{(1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k)^{1/2}} \quad \text{et} \quad \cos 2\theta_k = -\frac{\lambda + \cos k}{(1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k)^{1/2}},$$

ce qui prouve que $\sin 2\theta_k$ est bien une fonction impaire de k . En remplaçant dans (C.64), on trouve que

$$\hat{H} - N\lambda = \sum_k 2\sqrt{1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k} \eta_k^\dagger \eta_k + cste \quad (\text{C.67})$$

où la constante est donnée par

$$- \sum_k [2(\lambda + \cos k) \sin^2 \theta_k + \sin 2\theta_k \sin k] = -N\lambda - \sum_k \sqrt{1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k}. \quad (\text{C.68})$$

Le Hamiltonien prend donc finalement la forme diagonale suivante

$$\hat{H} = \sum_k \Lambda_k \left(\eta_k^\dagger \eta_k - \frac{1}{2} \right) = \sum_k \Lambda_k \eta_k^\dagger \eta_k + E_0 \quad (\text{C.69})$$

avec

$$\Lambda_k = 2\sqrt{1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k} \quad \text{et} \quad E_0 = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda_k. \quad (\text{C.70})$$

Les Λ_k constituent le spectre d'excitation des fermions et E_0 correspond à l'énergie du fondamental.

C.2 Construction des niveaux d'énergie du modèle d'Ising

Nous présentons maintenant en détail la méthode de construction des niveaux d'énergies du modèle d'Ising pour des valeurs finies du nombre de spins N . La méthode de construction est assez subtile en raison de la conservation de la parité et de la structure du vide de Bogoliubov dans la représentation fermionique b . Nous pouvons construire deux énergies minimales dans chacun des secteurs de parité $\mathcal{P} = \pm 1$

$$E_0^{(\mathcal{P})} = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda_k \quad (\text{C.71})$$

avec le spectre d'excitation fermionique donné par (C.70) et où la somme court sur les impulsions de la forme

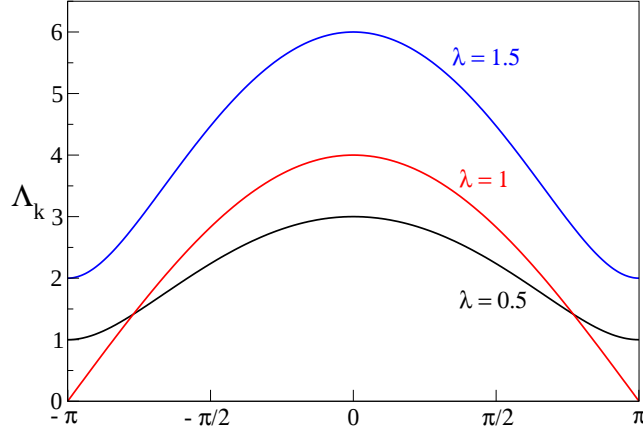
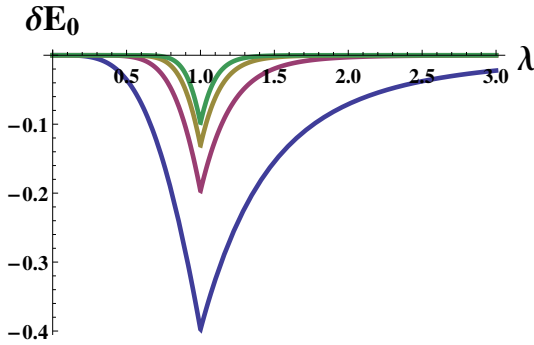


FIGURE C.2 – Relation de dispersion du modèle d'Ising en champ transverse.

- $k_p = (2p + 1)\frac{\pi}{N} - \pi$, dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$,
- $k_p = 2p\frac{\pi}{N} - \pi$, dans le secteur de parité $\mathcal{P} = -1$ avec $p = 0, 1, \dots, N - 1$.


 FIGURE C.3 – Différence entre les énergies minimales dans les secteurs de parité $\mathcal{P} = +1$ et $\mathcal{P} = -1$ pour différentes valeurs du nombre de spins N . Du bas vers le haut, $N = 4, 8, 12, 16$ respectivement.

Dans la figure C.3 nous avons représenté la différence d'énergie

$$\delta E_0 = E_0^{(\mathcal{P}=+1)} - E_0^{(\mathcal{P}=-1)} \quad (\text{C.72})$$

entre les énergies minimales dans les secteurs de parité $\mathcal{P} = +1$ et $\mathcal{P} = -1$ en fonction du champ λ et pour différentes valeurs du nombre de spins N . Comme $\delta E_0 < 0$ pour toutes les valeurs du champ λ , on en déduit que l'énergie fondamentale de la chaîne de spins se trouve toujours dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$. Dans la limite thermodynamique, $\delta E_0 \rightarrow 0$ puisque les conditions aux limites, qui sont à l'origine de la différence de quantification des impulsions des excitations dans les secteurs de parité $\mathcal{P} = \pm 1$, deviennent sans grande importance.

Notons aussi l'apparition d'un point d'inflexion au point critique $\lambda = 1$. Comme il existe une bijection entre le modèle d'Ising classique bidimensionnel et le modèle quantique unidimensionnel, il est possible de trouver les caractéristiques de la transition de phase critique classique à partir du modèle quantique.

L'état fondamental de (C.69) est par définition l'état qui est annihilé par les opérateurs η_k . Nous appellerons cet état le vide de Bogoliubov puisqu'il ne contient aucun fermions de type η . Notons que cet état contient un certain nombre de fermions de type b comme on peut le voir à travers la relation (C.49). Les états d'énergies de la chaîne de spins s'obtiennent en ajoutant des excitations fermioniques à l'énergie (C.71). Comme nous l'avons vu précédemment, l'opérateur parité

$$\hat{\mathcal{P}} = \prod_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^z \quad (\text{C.73})$$

commute avec le Hamiltonien et est relié au nombre d'excitations sur la chaîne par

$$e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}} = (-1)^N \hat{\mathcal{P}}. \quad (\text{C.74})$$

avec $\hat{\mathcal{N}} = \sum_k b_k^\dagger b_k = \sum_n a_n^\dagger a_n$. La parité est une quantité conservée du problème, il s'ensuit que le nombre d'excitations que l'on doit ajouter à (C.71) doit posséder une parité bien définie afin de respecter la condition

(C.74). Ajouter un mauvais nombre d'excitations peut faire quitter le système du sous espace de parité auquel appartient l'état fondamental, menant ainsi à des énergies non physique. L'existence d'énergie non physique se voit aussi dans le fait que l'on peut construire 2^N états d'énergies dans chaque secteur de parité² : comme la chaîne d'Ising possède 2^N énergies propres, il y en a donc deux fois trop et celles qui ne vérifient pas la relation (C.74) doivent être éliminées. Chaque secteur de parité apporte donc la moitié du spectre de la chaîne d'Ising. La connaissance du nombre de fermions de type b dans le vide de Bogoliubov est de ce fait une question primordiale. Dans ce qui suit nous développons nos idées dans le cas d'un nombre de spins N pair mais la généralisation à N impair est quasi immédiate. On s'intéresse en particulier à la structure du vide de Bogoliubov.

C.2.1 Structure du vide de Bogoliubov et règles de construction des états d'énergies

Nous différencions ici les différents types de conditions aux bords et leur conséquences sur la méthode de construction des états d'énergies. Écrivons tout d'abord (C.47) comme

$$H = -2 \sum_k (\lambda + \cos k) \left(b_k^\dagger b_k - \frac{1}{2} \right) + 2i \sum_{k \geq 0} \sin k (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k}). \quad (\text{C.75})$$

Cette forme nous sera utile dans la suite.

Conditions aux bords antipériodique, secteur de parité $\mathcal{P} = +1$

L'état fondamental de (C.48) est l'état qui est annihilé par tous les η_k , $\forall k$ et est appelé vide de Bogoliubov. Les impulsions des excitations dans ce secteur de parité sont données par

$$k_p = (2p + 1) \frac{\pi}{N} - \pi, \quad p = 0, 1, \dots, N - 1. \quad (\text{C.76})$$

En raison du fait que $\sin k \neq 0$ pour les valeurs autorisées de l'impulsion, le vide de Bogoliubov (dans la représentation des fermions de type b) peut être écrit comme

$$|\Psi_0^{\text{ap}}\rangle \equiv \prod_{k > 0} \left(u_k - i v_k b_k^\dagger b_{-k}^\dagger \right) |0\rangle, \quad \eta_k |\Psi_0^{\text{ap}}\rangle = 0, \quad (\text{C.77})$$

où u_k et v_k sont les paramètres de la transformation de Bogoliubov (C.49) et sont reliés aux angles de la rotation qui permettent de passer des fermions de type b aux fermions de type η . Le produit court sur les valeurs permises de l'impulsion (C.76). L'état $|0\rangle$ est le vide des fermions de type b , i.e $b_k |0\rangle = 0$, $\forall k$. Notons que la forme du vide de Bogoliubov est analogue à l'état fondamental de la théorie BCS de la superconductivité [BCS57]. Vérifions qu'il s'agit bien de l'état fondamental de (C.48). Il suffit pour cela de prouver que $\eta_k |\Psi_0^{\text{ap}}\rangle = 0$. En utilisant l'expression pour η_k donné par (C.49), on a

$$\begin{aligned} \eta_k |\Psi_0^{\text{ap}}\rangle &= \left(u_k b_k + i v_k b_{-k}^\dagger \right) \prod_{k' > 0} \left(u_{k'} - i v_{k'} b_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger \right) |0\rangle, \\ &= \prod_{\substack{k' > 0 \\ k' \neq \pm k}} \left(u_{k'} - i v_{k'} b_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger \right) \left(u_k b_k + i v_k b_{-k}^\dagger \right) \left(u_k - i v_k b_k^\dagger b_{-k}^\dagger \right) |0\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.78})$$

En développant le produit sur k et en utilisant les relations d'anticommutations fermioniques sur les opérateurs b , on trouve

$$\begin{aligned} &u_k^2 b_k - i u_k v_k b_k b_{-k}^\dagger b_{-k}^\dagger + i v_k u_k b_{-k}^\dagger + v_k^2 b_{-k}^\dagger b_k^\dagger b_{-k}^\dagger \\ &= u_k^2 b_k - i u_k v_k \left(1 - b_k^\dagger b_k \right) b_{-k}^\dagger + i v_k u_k b_{-k}^\dagger - v_k^2 b_k^\dagger (b_{-k}^\dagger)^2 \\ &= u_k^2 b_k - i u_k v_k b_k^\dagger b_{-k}^\dagger b_k - v_k^2 b_k^\dagger (b_{-k}^\dagger)^2. \end{aligned} \quad (\text{C.79})$$

Comme $b_k |0\rangle = 0$ et $(b_{-k}^\dagger)^2 |0\rangle = 0$, puisqu'il s'agit de fermion, ceci prouve que $\eta_k |\Psi_0^{\text{ap}}\rangle = 0$. L'état $|\Psi_0^{\text{ap}}\rangle$ est donc composé d'un nombre pair de fermions de type b puisqu'ils sont créés par paires d'impulsions opposées $b_k^\dagger b_{-k}^\dagger$. De ce fait, pour construire les états d'énergie dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$, il faut ajouter un nombre paires d'excitations fermioniques à $E_0^{(\mathcal{P}=+1)}$ pour satisfaire (C.74). On obtient ainsi la moitié des énergies propres. L'autre moitié du spectre vient du secteur de parité $\mathcal{P} = -1$.

2. En effet, il existe N excitations d'énergies différentes possibles et pour chacune on peut choisir de l'ajouter ou non à l'énergie minimale dans le secteur $\mathcal{P} = \pm 1$.

Conditions aux bords périodiques, secteur de parité $\mathcal{P} = -1$

Les impulsions autorisées par les conditions aux bords périodiques sont données par

$$k_p = \frac{2p\pi}{N} - \pi, \quad p = 0, 1, \dots, N-1. \quad (\text{C.80})$$

Puisque $\sin k$ s'annule maintenant pour deux valeurs d'impulsions autorisées, ce secteur de parité présente un comportement un peu plus complexe que le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$.

En effet, $\sin k$ s'annule maintenant pour $k = 0$ (correspondant à $p = N/2$) et $k = -\pi$ (pour $p = 0$), le Hamiltonien (C.75) prend alors la forme

$$H = -2(\lambda + 1) \left(b_0^\dagger b_0 - \frac{1}{2} \right) - 2(\lambda - 1) \left(b_{-\pi}^\dagger b_{-\pi} - \frac{1}{2} \right) - \sum_{\substack{k \neq 0 \\ k \neq -\pi}} (\dots) \quad (\text{C.81})$$

Les modes d'impulsions $k = 0, -\pi$ sont donc déjà sous forme diagonale et ont pour énergie respective

$$\epsilon_0 = 2(1 + \lambda), \quad \epsilon_{-\pi} = 2(\lambda - 1). \quad (\text{C.82})$$

Il n'est donc pas nécessaire d'accomplir la rotation de Bogoliubov (C.49) sur ces modes et deux cas particulier sont à différencier

- si $\lambda > 1$, les deux excitations d'impulsions 0 et $-\pi$ sont à prendre en compte dans la construction du vide de Bogoliubov et on a

$$|\Psi_0^{\mathcal{P}}\rangle \equiv b_0^\dagger b_{-\pi}^\dagger \prod_{\substack{k > 0 \\ k \neq -\pi}} \left(u_k - i v_k b_k^\dagger b_{-k}^\dagger \right) |0\rangle, \quad \eta_k |\Psi_0^{\mathcal{P}}\rangle = 0. \quad (\text{C.83})$$

Ce vide contient un nombre pair de fermions de type b , il s'ensuit que les énergies de la chaîne de spins s'obtiennent en ajoutant un nombre impairs d'excitation à $E_0^{(\mathcal{P}=-1)}$ afin de respecter la relation (C.74).

- Si $\lambda < 1$, l'énergie $\epsilon_{-\pi}$ du mode d'impulsion $k = -\pi$ devient négative ($(\lambda - 1) < 0$) et ne doit donc pas être pris dans la construction du vide de Bogoliubov. Il vient donc

$$|\Psi_0^{\mathcal{P}}\rangle \equiv b_0^\dagger \prod_{\substack{k > 0 \\ k \neq -\pi}} \left(u_k - i v_k b_k^\dagger b_{-k}^\dagger \right) |0\rangle, \quad \eta_k |\Psi_0^{\mathcal{P}}\rangle = 0 \quad (\text{C.84})$$

qui contient un nombre impair de fermions de type b . De ce fait, le nombre d'excitations nécessaires à la construction des énergies de la chaîne de spins est pair afin de respecter (C.74).

En résumé, les 2^N énergies propres de la chaîne d'Ising quantique (C.1) s'obtiennent en ajoutant un nombre fixé d'excitations à l'énergie fondamentale et en prenant en compte les prescriptions faites plus haut

$$E_{\vec{n}} = \sum_{p=0}^{N-1} \left(n_p - \frac{1}{2} \right) \Lambda_p, \quad \vec{n} = (n_0, n_1, \dots, n_{N-1}), \quad (\text{C.85})$$

avec $n_p = 0, 1$ et Λ_k donné par (C.70). Chaque secteur de parité apporte la moitié du spectre. Par exemple, pour N pair et $\lambda < 1$ le nombre d'excitations que l'on doit ajouter au fondamental doit être pair dans chaque secteur de parité et vérifier

$$\prod_{n=0}^{N-1} (2n_p - 1) = 1. \quad (\text{C.86})$$

C.3 Calcul d'observables dans l'état fondamental

Nous montrons ici comment calculer des valeurs moyennes d'observables dans l'état fondamental de la chaîne d'Ising. Nous nous intéressons en particulier au calcul de la valeur moyenne de l'aimantation. En utilisant (C.35) et (C.49), on peut réécrire les opérateurs de création et annihilation dans l'espace direct comme

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikn} \left(\cos \theta_k \eta_k - i \sin \theta_k \eta_{-k}^\dagger \right), \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (\text{C.87})$$

où les angles θ_k sont donnés par (C.66). Pour simplifier les notations on procède au changement de notation :

$$k_l = \frac{2l\pi}{N} + \sigma \frac{\pi}{N} - \pi, \quad l = 0, 1, \dots, N-1. \quad (\text{C.88})$$

avec $\sigma = +1$ pour les excitations dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$ et $\sigma = 0$ pour les excitations du secteur de parité $\mathcal{P} = -1$. L'intérêt d'une telle réécriture (que nous avons en fait utilisé depuis le début de notre étude) est que n et l parcourent maintenant le même ensemble d'indices. Notons aussi la formule importante

$$k_l = -k_{N-l-\sigma}. \quad (\text{C.89})$$

On réécrit ainsi (C.87) sous la forme :

$$a_n = \frac{(-1)^n e^{-in\pi\frac{\sigma}{N}}}{\sqrt{N}} \sum_{l=0}^{N-1} e^{-2iln\frac{\pi}{N}} \left(\cos \theta_{k_l} \eta_l - i \sin \theta_{k_l} \eta_{N-l-\sigma}^\dagger \right). \quad (\text{C.90})$$

La formule (C.90) permet de calculer assez facilement des valeurs moyennes de grandeurs physiques telle que l'aimantation. Calculons par exemple la valeur de l'aimantation au site n . Comme le problème est invariant par translation (d'une longueur de chaîne N), on s'attend à ce que le résultat ne dépendent pas du site n . L'opérateur $\hat{\sigma}_n^z$ s'écrit facilement en fonctions des opérateurs a_n

$$\hat{\sigma}_n^z = 2a_n^\dagger a_n - 1 \quad (\text{C.91})$$

En utilisant (C.90) on a

$$\hat{\sigma}_n^z = \frac{2}{N} \sum_{l,l'=0}^{N-1} e^{2in\frac{\pi}{N}(l-l')} \left(\cos \theta_{k_l} \eta_l^\dagger + i \sin \theta_{k_l} \eta_{N-l-\sigma} \right) \left(\cos \theta_{k_{l'}} \eta_{l'} - i \sin \theta_{k_{l'}} \eta_{N-l'-\sigma}^\dagger \right) - 1. \quad (\text{C.92})$$

Si on décide de calculer la valeur moyenne de cette observable dans l'état fondamental $|0\rangle$, on a $\sigma = +1$ puisque le fondamental se trouve dans le secteur de parité $\mathcal{P} = +1$. Ici le ket $|0\rangle$ correspond au fondamental dans la représentation des fermions de type η , i.e $\eta|0\rangle = 0$. Dans la représentation des fermions de type b , ce fondamental s'exprime comme le produit (C.77). Comme nous avons exprimé l'opérateur $\hat{\sigma}_z$ en fonction des opérateurs η , il est judicieux de travailler avec le vide $|0\rangle$ dans la représentation η . Les termes contenant deux opérateurs du même type $\eta\eta$ ou $\eta^\dagger\eta^\dagger$ ainsi que ceux ayant un opérateur d'annihilation à droite $\eta^\dagger\eta$, apportent une contribution nulle à $\langle 0|\hat{\sigma}_n^z|0\rangle$. Seul le terme $\eta_{N-l-1}\eta_{N-l'-1}^\dagger$ donne une contribution et on obtient finalement :

$$\langle 0|\hat{\sigma}_n^z|0\rangle = \frac{2}{N} \sum_{l=0}^{N-1} \sin^2 \theta_{k_l} - 1 \quad (\text{C.93})$$

qui est bien indépendant du site n . En utilisant les relations (C.66) et un peu de trigonométrie, on montre sans trop de peine que

$$\sin^2 \theta_k = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\lambda + \cos k}{\sqrt{1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k}}. \quad (\text{C.94})$$

Dans la limite thermodynamique, on trouve que l'aimantation est donnée par (voir figure C.4)

$$m_z = \langle 0|\hat{\sigma}_n^z|0\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\lambda - \cos u}{\sqrt{1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u}} du. \quad (\text{C.95})$$

C.4 Diagonalisation du hamiltonien de la chaîne ouverte

Nous nous intéressons ici à la diagonalisation du hamiltonien avec des **conditions aux bords libres**

$$\hat{H} = - \sum_{n=0}^{N-2} \hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x - \lambda \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\sigma}_n^z. \quad (\text{C.96})$$

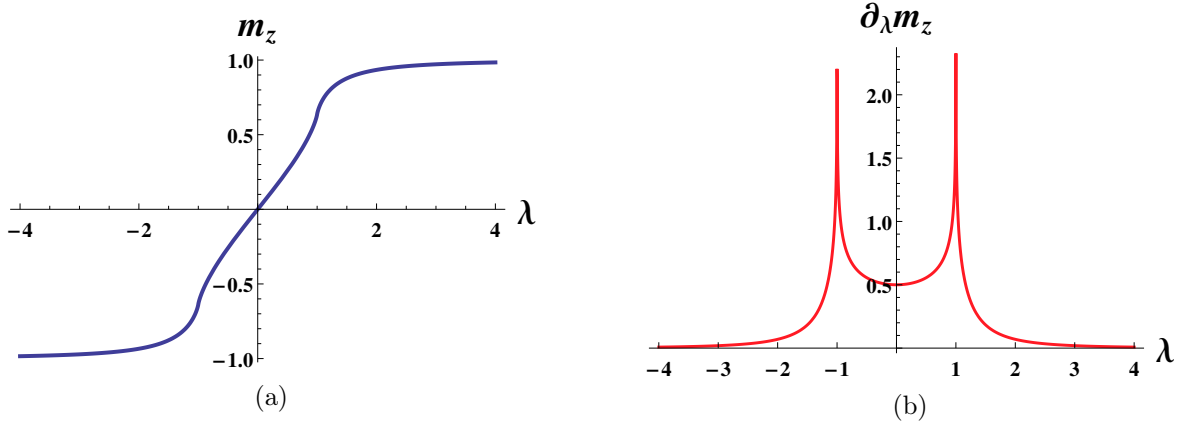


FIGURE C.4 – (a) Évolution de l'aimantation en fonction du champ magnétique λ . Dans la limite $|\lambda| \gg 1$, l'aimantation tend vers ± 1 correspondant à la configuration où tous les spins pointent dans la direction du champ. (b) Dérivée de l'aimantation en fonction du champ λ . La divergence observée au point critique $|\lambda_c| = 1$ est la signature d'une transition de phase quantique.

Étant donné le caractère non périodique de la chaîne on ne peut pas passer dans l'espace réciproque comme précédemment. Introduisons les deux opérateurs auto-adjoint reliés aux parties réelle et imaginaire des opérateurs fermioniques de Jordan-Wigner

$$\zeta_n = (a_n^\dagger + a_n) = \zeta_n^\dagger, \quad \xi_n = -i(a_n^\dagger - a_n) = \xi_n^\dagger. \quad (\text{C.97})$$

Il est facile de vérifier que ces opérateurs vérifient les relations d'anticommutation suivantes

$$\{\zeta_n, \zeta_m^\dagger\} = 2\delta_{n,m}, \quad \{\xi_n, \xi_m^\dagger\} = 2\delta_{n,m}, \quad \{\zeta_n, \xi_m\} = 0. \quad (\text{C.98})$$

Les différents termes du hamiltonien de la chaîne d'Ising s'expriment alors comme

$$\hat{\sigma}_n^x \hat{\sigma}_{n+1}^x = i\xi_n \zeta_{n+1}, \quad (\text{C.99})$$

$$\hat{\sigma}_n^z = i\xi_n \zeta_n, \quad (\text{C.100})$$

de sorte que le Hamiltonien de Ising se réécrit

$$H = -i \sum_{n=0}^{N-1} (\xi_n \zeta_{n+1} + \lambda \xi_n \zeta_n), \quad (\text{C.101})$$

On cherche à écrire le hamiltonien sous la forme diagonale

$$\hat{H} = \sum_k \Lambda_k \left(\Psi_k^\dagger \Psi_k - \frac{1}{2} \right) = \sum_k \Lambda_k \Psi_k^\dagger \Psi_k + E_0, \quad (\text{C.102})$$

les Ψ_k étant des combinaisons linéaires des champs d'opérateurs ζ_n et ξ_n :

$$\Psi_k = \sum_{n=0}^{N-1} a_n^{(k)} \zeta_n + b_n^{(k)} \xi_n, \quad a_n^{(k)}, b_n^{(k)} \in \mathbb{C}. \quad (\text{C.103})$$

E_0 est une constante correspondant à l'énergie de l'état fondamental et les Λ_k les énergies d'excitation des fermions. Comme précédemment l'énergie du fondamental est donnée par

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda_k, \quad (\text{C.104})$$

où la somme k court sur les valeurs autorisées par les conditions de quantification de l'impulsion que nous allons démontrer dans ce qui suit. Les coefficients $a_n^{(k)}$ et $b_n^{(k)}$ vont être choisis de manière à ce que les $\Psi_k^\dagger$ et Ψ_k constituent des opérateurs de création et d'annihilation fermioniques

$$\{\Psi_n, \Psi_m^\dagger\} = \delta_{n,m}, \quad \{\Psi_n, \Psi_m\} = \{\Psi_n^\dagger, \Psi_m^\dagger\} = 0. \quad (\text{C.105})$$

Calculons le commutateur de $\hat{H}$ et Ψ_l de deux manières différentes. Premièrement, en appliquant $\hat{H}$ à Ψ_l on obtient en utilisant la forme diagonale (C.102) et les relations d'anticommutation (C.105)

$$[\hat{H}, \Psi_l] = -\Lambda_l \Psi_l. \quad (\text{C.106})$$

Le calcul est assez simple et nous le détaillons ici

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi_l &= \sum_k \Lambda_k \Psi_k^\dagger \Psi_k \Psi_l + \Psi_l E_0, \\ &= -\sum_k \Lambda_k \left(\Psi_k \delta_{k,l} - \Psi_l \Psi_k^\dagger \Psi_k \right) + \Psi_l E_0, \\ &= -\Lambda_l \Psi_l + \Psi_l \hat{H}. \end{aligned}$$

On montre aussi que l'on a :

$$[\hat{H}, \Psi_l] = -2i \sum_n \left\{ a_n^{(l)} (\xi_{n-1} + \lambda \xi_n) - b_n^{(l)} (\zeta_{n+1} + \lambda \zeta_n) \right\}. \quad (\text{C.107})$$

Pour démontrer cette formule, nous utilisons (C.101), la décomposition (C.103) et les relations d'anticommutation. On a

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi_l &= -i \sum_{n,m} \left\{ a_n^{(l)} (\xi_m \zeta_{m+1} \zeta_n + \lambda \xi_m \zeta_m \zeta_n) + b_n^{(l)} (\xi_m \zeta_{m+1} \xi_n + \lambda \xi_m \zeta_m \xi_n) \right\}, \\ &= -i \sum_{n,m} \left\{ a_n^{(l)} \xi_m (2\delta_{n,m+1} - \zeta_n \zeta_{m+1} + \lambda(2\delta_{n,m} - \zeta_n \zeta_m)) \right. \\ &\quad \left. - b_n^{(l)} ((2\delta_{n,m} - \xi_n \xi_m) \zeta_{m+1} + \lambda(2\delta_{n,m} - \xi_n \xi_m) \zeta_m) \right\}, \\ &= -2i \sum_n \left\{ a_n^{(l)} (\xi_{n-1} + \lambda \xi_n) - b_n^{(l)} (\zeta_{n+1} + \lambda \zeta_n) \right\} - i \sum_{n,m} \left(a_n^{(l)} \zeta_n + b_n^{(l)} \xi_n \right) (\xi_m \zeta_{m+1} + \lambda \xi_m \zeta_m), \\ &= -2i \sum_n \left\{ a_n^{(l)} (\xi_{n-1} + \lambda \xi_n) - b_n^{(l)} (\zeta_{n+1} + \lambda \zeta_n) \right\} + \Psi_l \hat{H}. \end{aligned}$$

Ce qu'il fallait montrer. En comparant (C.106) et (C.107), il vient

$$\Lambda_l \sum_n (a_n^{(l)} \zeta_n + b_n^{(l)} \xi_n) = 2i \sum_n \left\{ a_n^{(l)} (\xi_{n-1} + \lambda \xi_n) - b_n^{(l)} (\zeta_{n+1} + \lambda \zeta_n) \right\} \quad (\text{C.108})$$

et on obtient les relations de récurrences suivantes

$$a_n^{(l)} \Lambda_l = -2ib_{n-1}^{(l)} - 2i\lambda b_n^{(l)}, \quad (\text{C.109})$$

$$b_n^{(l)} \Lambda_l = 2ia_{n+1}^{(l)} + 2i\lambda a_n^{(l)}. \quad (\text{C.110})$$

En éliminant $a_n^{(l)}$ de la deuxième équation on a :

$$b_n^{(l)} (\Lambda_l^2 - 4 - 4\lambda^2) = 4\lambda (b_{n+1}^{(l)} + b_{n-1}^{(l)}), \quad 0 \leq n \leq N-1. \quad (\text{C.111})$$

Les solutions générales de cette récurrence peuvent être recherchées sous la forme :

$$b_n^{(l)} = \beta_l e^{iln} + \tilde{\beta}_l e^{-iln}, \quad (\text{C.112})$$

Comme les coefficients $a_n^{(l)}$ et $b_n^{(l)}$ ne sont définis que pour $n = 0, \dots, N-1$, il s'ensuit que

$$a_N^{(l)} = 0 \rightarrow b_N^{(l)} = -\frac{b_{N-1}^{(l)}}{\lambda}, \quad b_{-1}^{(l)} = 0. \quad (\text{C.113})$$

La condition $b_{-1}^{(l)} = 0$ entraîne que les constantes β_l et $\tilde{\beta}_l$ sont reliées par

$$\beta_l = -\tilde{\beta}_l e^{2il}. \quad (\text{C.114})$$

En remplaçant dans $b_N^{(l)} = -b_{N-1}^{(l)}/\lambda$ il vient alors la condition de quantification de l

$$\frac{\sin(lN)}{\sin(l(N+1))} = -\lambda. \quad (\text{C.115})$$

L'insertion de l'expression (C.112) dans la relation de récurrence donne :

$$\Lambda_l^2 = 4 + 4\lambda^2 + 8\lambda \cos l. \quad (\text{C.116})$$

avec l donné par (C.115). En utilisant un peu de trigonométrie on peut montrer que les excitations de la chaîne sont données par :

$$\Lambda_l = 2 \left| \frac{\sin(l)}{\sin(l(N+1))} \right| \quad (\text{C.117})$$

La dépendance de Λ_l avec le paramètre λ est caché dans la quantification de l . Le spectre d'excitation (C.116) est exactement le même que celui obtenu dans le cas de la chaîne avec des conditions aux bords périodiques (C.70), la seule différence résidant dans la condition de quantification (C.115). Les coefficients $a_n^{(k)}$ et $b_n^{(k)}$ s'écrivent

$$a_n^{(k)} = 2\beta_{l_k} e^{-i l_k} \sin((n-N)l_k), \quad (\text{C.118})$$

$$b_n^{(k)} = 2i\beta_{l_k} e^{-i l_k} \sin((n+1)l_k), \quad (\text{C.119})$$

où l_k , $k = 0, \dots, N-1$ prend N valeurs données par les solutions de (C.115). Il est assez facile de vérifier que ces formes satisfont (C.113). La norme des nombres complexes β_{l_k} peut être trouvée en utilisant les relations d'anticommutation (C.98) et (C.105), on a

$$\sum_{n=0}^{N-1} |a_n^{(k)}|^2 + |b_n^{(k)}|^2 = \frac{1}{2}. \quad (\text{C.120})$$

On trouve ainsi que

$$|\beta_{l_k}|^2 = \frac{\sin(l_k)}{4((2N+1)\sin(l_k) - 4\sin(l_k(2N+1)))}. \quad (\text{C.121})$$

Il n'est pas nécessaire de connaître la phase de ces nombres complexes. En effet, celles-ci s'annulent mutuellement lorsqu'on calcule des valeurs moyennes de grandeurs physique telle que l'aimantation.

C.4.1 Condition de quantification de la chaîne ouverte

Les énergies d'excitation des quasi-particules associées à la chaîne ouverte sont donnés par l'expression (C.115) où l ne peut prendre que certaine valeurs données par les solutions de l'équation

$$f_N(l) = \frac{\sin(Nl)}{\sin((N+1)l)} = -\lambda, \quad (\text{C.122})$$

La fonction $f_N(z)$ possède des pôles simples en

$$z_p = \frac{p\pi}{N+1}, \quad p = 1, 2, \dots, N. \quad (\text{C.123})$$

Les zéros de $f_N(z)$ sont donnés par les zéros du numérateur, i.e

$$z_m = \frac{m\pi}{N}, \quad m = 1, 2, \dots, N-1. \quad (\text{C.124})$$

De plus on a

$$f_N(0) = \frac{N}{N+1}. \quad (\text{C.125})$$

Les solutions de (C.122) arrivent par paires. On se restreint à l'intervalle $[0, \pi]$ car la fonction $f_N(z)$ est paire. Sur cet intervalle, l'équation (C.122) possède N solutions. La figure qui suit montre une résolution graphique de l'équation (C.122) pour $N=2$. Comme on le voit, la nature des solutions changent selon la valeur du paramètre λ . Dans ce qui suit nous faisons une étude détaillé du comportement des solutions en fonction du paramètre λ .

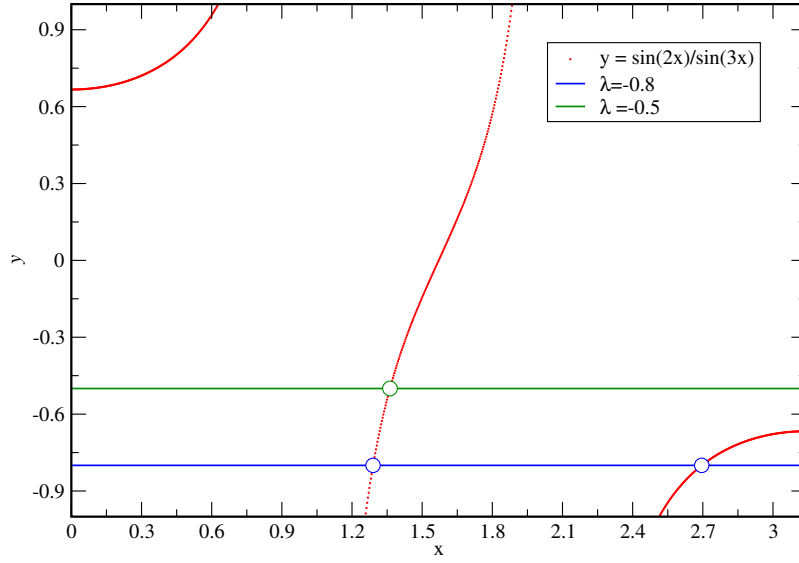
Quantification des valeurs de l pour $N=2$


FIGURE C.5 – Valeurs permises des impulsions des excitations l dans le cas de la chaîne ouverte de $N = 2$ spins. Pour $|\lambda| > \frac{N}{N+1}$, il y a deux solutions réelles (en bleu). Quand $0 < |\lambda| < \frac{N}{N+1}$, une des solutions est projetée dans le plan complexe.

 Discussion de la nature des solutions selon la valeur de λ

- Si $|\lambda| > \frac{N}{N+1}$ alors (C.122) possède N solutions réelles sur $[0, \pi]$.
- Si $0 < |\lambda| < \frac{N}{N+1}$, une des solutions est projetée dans le plan complexe et deux cas sont à différencier :
 1. si λ est positif la solution complexe peut être recherchée sous la forme $z = \pi + iv$. L'équation (C.122) devient :

$$\frac{\sinh(Nv)}{\sinh((N+1)v)} = |\lambda|. \quad (\text{C.126})$$

Cette équation a toujours deux solutions réelles (Figure 8).

2. si λ est négatif la solution complexe est de la forme $z = iv$ avec v vérifiant (C.126).

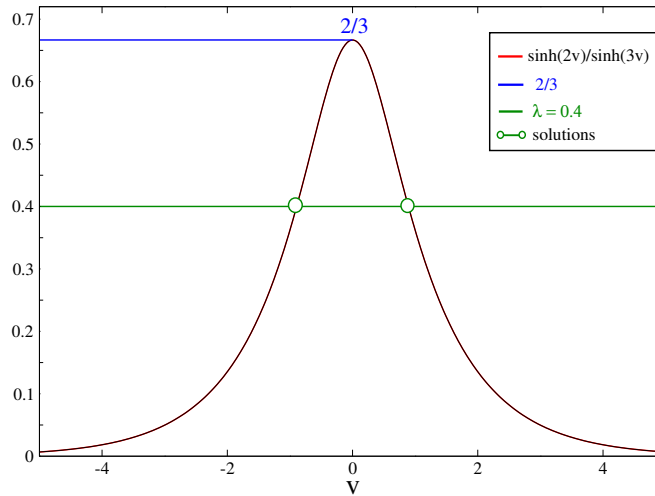
 Solutions de l'équation hyperbolique pour $N=2$


FIGURE C.6 – Solutions de l'équation $\frac{\sinh(2v)}{\sinh(3v)} = \lambda$. Pour $0 < \lambda < \frac{2}{3}$ il y a toujours deux solutions de signe opposé (ce qui revient à dire que les solutions z sont complexes conjuguées l'une de l'autre.)

C.4.2 Valeur moyenne de l'observable σ_j^z

Appelons $\hat{n}_k$ l'opérateur nombre d'occupation de l'orbitale d'énergie Λ_{l_k}

$$\hat{n}_k = \Psi_k^\dagger \Psi_k, \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (\text{C.127})$$

vérifiant la relation :

$$\hat{n}_l |n_1, \dots, n_l, \dots\rangle = n_l |n_1, \dots, n_l, \dots\rangle \quad (\text{C.128})$$

Cet opérateur compte le nombre d'excitations d'énergie donnée dans un certain état $|n_1, n_2, \dots\rangle$. Les n_i ne peuvent prendre que les valeurs 0 ou 1 du fait qu'on a affaire à des fermions. Soit $|GS\rangle$ l'état fondamental du hamiltonien exprimé dans la base qui rend le hamiltonien diagonal

$$\hat{H}|GS\rangle = E_0|GS\rangle. \quad (\text{C.129})$$

avec E_0 l'énergie du fondamental. Il est facile de montrer que le vide de Bogoliubov

$$|GS\rangle = |0\rangle, \quad (\text{C.130})$$

où $|0\rangle$ est l'état ne contenant aucun fermions de type Ψ . Dans cette base, nous pouvons exprimer assez facilement la valeur moyenne de l'observable σ_j^z dans l'état fondamental

$$\langle \sigma_j^z \rangle = \langle 0 | \sigma_j^z | 0 \rangle, \quad (\text{C.131})$$

Nous utilisons la représentation de σ_j^z dans la base fermionique

$$\hat{\sigma}_j^z = i\xi_j \zeta_j = 4i \sum_{k,k'} a_j^{(k')} b_j^{(k)} \left(\Psi_k^\dagger - \Psi_k \right) \left(\Psi_{k'}^\dagger + \Psi_{k'} \right). \quad (\text{C.132})$$

ou nous avons utilisé les relations inverses suivantes

$$\zeta_n = 2 \sum_{k=0}^{N-1} a_n^{(k)} \left(\Psi_k^\dagger + \Psi_k \right), \quad \xi_n = 2 \sum_{k=0}^{N-1} b_n^{(k)} \left(\Psi_k^\dagger - \Psi_k \right), \quad (\text{C.133})$$

avec $a_n^{(k)}$ et $b_n^{(k)}$ donnés par (C.118) et (C.119). Prenant en compte le fait que

$$\Psi_p^\dagger |0_0, 0_1, \dots, 0_p, \dots, 0_{N-1}\rangle = |0_0, 0_1, \dots, 1_p, \dots, 0_{N-1}\rangle, \quad (\text{C.134})$$

$$\Psi_p |0_0, 0_1, \dots, 0_p, \dots, 0_{N-1}\rangle = 0. \quad (\text{C.135})$$

il vient que le seul terme non-nul dans (C.132) est

$$\langle \hat{\sigma}_j^z \rangle = -4i \sum_{k,k'} a_j^{(k')} b_j^{(k)} \langle 0 | \Psi_k \Psi_{k'}^\dagger | 0 \rangle \quad (\text{C.136})$$

et on obtient

$$\langle \hat{\sigma}_j^z \rangle = -4i \sum_{k=0}^{N-1} a_j^{(k)} b_j^{(k)}. \quad (\text{C.137})$$

Notez la symétrie suivante

$$\langle \hat{\sigma}_{N-j-1}^z \rangle = \langle \hat{\sigma}_j^z \rangle, \quad j = 0, \dots, N-1. \quad (\text{C.138})$$

découlant du fait que le hamiltonien garde la même forme par le changement d'indice muet $j \rightarrow N-j-1$. Il s'agit en fait de la symétrie miroir par rapport au milieu de la chaîne.

MÉTHODE DE LA FONCTION GÉNÉRATRICE POUR LES MOMENTS DE LA DENSITÉ D'ÉTATS

Nous détaillons dans cette annexe la méthode de calcul des moments d'ordre 1 et 2 dans les sous-espace avec un nombre de spins up fixé. La fonction de partition est donnée par

$$Z_N(\beta, x) = \frac{1}{2^N} e^{\frac{\beta}{2} \sum_p \Lambda_p} \prod_{p=0}^{N-1} (1 + x e^{-\beta \Lambda_p}), \quad (\text{D.1})$$

où x joue le rôle d'un paramètre de Lagrange qui va nous permettre de fixer le nombre d'excitations. La stratégie consiste à trouver le développement en puissance de β de la fonction de partition (D.1) puis à extraire les moments $m_k(x)$ pour en déduire $\langle E^k \rangle_n$. Prenons le logarithme de l'expression (D.1), on a

$$\ln Z_N(\beta, x) = -N \ln 2 + \frac{\beta}{2} \sum_p \Lambda_p + \sum_{p=0}^{N-1} \ln (1 + x e^{-\beta \Lambda_p}) \quad (\text{D.2})$$

En développant l'exponentielle dans l'argument du logarithme, on obtient

$$\begin{aligned} \ln (1 + x e^{-\beta \Lambda_p}) &= \ln(1+x) + \ln \left(1 + \frac{x}{1+x} \left(-\beta \Lambda_p + \frac{\Lambda_p^2}{2} \beta^2 + \dots \right) \right), \\ &= \ln(1+x) + \frac{x}{1+x} \left(-\beta \Lambda_p + \frac{\Lambda_p^2}{2} \beta^2 + \dots \right) - \frac{x^2}{2(1+x)^2} \left(-\beta \Lambda_p + \frac{\Lambda_p^2}{2} \beta^2 + \dots \right)^2 \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

où le développement a été tronqué à l'ordre 2 puisque nous ne recherchons que les deux premiers moments du Hamiltonien. En regroupant par puissance de β , on trouve donc que

$$\ln Z_N(\beta, x) = -N \ln 2 + \beta \sum_p \Lambda_p \left(\frac{1}{2} - \frac{x}{1+x} \right) + N \ln(1+x) + \frac{\beta^2}{2} \frac{x}{(1+x)^2} \sum_p \Lambda_p^2.$$

En prenant de nouveau l'exponentielle de cette expression, on trouve finalement

$$Z_N(\beta, x) = m_0(x) - m_1(x)\beta + \frac{\beta^2}{2} m_2(x) + \dots \quad (\text{D.4})$$

où les moments de la distribution d'énergie s'expriment comme

$$m_0(x) = \frac{(1+x)^N}{2^N}, \quad (\text{D.5})$$

$$m_1(x) = -\frac{1}{2} \frac{(1+x)^N}{2^N} \left(\frac{1-x}{1+x} \right) \sum_p \Lambda_p, \quad (\text{D.6})$$

$$m_2(x) = \frac{(1+x)^N}{2^N} \left[\frac{x}{(1+x)^2} \sum_p \Lambda_p^2 + \frac{1}{4} \left(\frac{1-x}{1+x} \right)^2 \left(\sum_p \Lambda_p \right)^2 \right]. \quad (\text{D.7})$$

Nous devons maintenant développer les moments en séries de la variable x puis comparer à (2.164) pour pouvoir obtenir les quantités que nous recherchons, à savoir $\langle E^k \rangle_n$ pour $k = 1, 2$. Le développement du moment d'ordre 0 donne de manière triviale

$$m_0(x) = \frac{1}{2^N} \sum_{n=0}^N C_N^n x^n \Rightarrow \langle 1 \rangle_n = 1 = \frac{1}{C_N^n} \text{Tr}_n \mathbb{1}. \quad (\text{D.8})$$

Pour le moment d'ordre 1, on a

$$\begin{aligned} (1-x)(1+x)^{N-1} &= \sum_{n=0}^N (C_{N-1}^n - C_{N-1}^{n-1}) x^n, \\ &= \sum_{n=0}^N C_N^n \left(1 - \frac{2n}{N}\right) x^n. \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

On en déduit donc que

$$\langle E \rangle_n = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{2n}{N}\right) \sum_p \Lambda_p. \quad (\text{D.10})$$

De la même manière, pour le moment d'ordre 2 on trouve que

$$\langle E^2 \rangle_n = \frac{1}{4} \left(\sum_p \Lambda_p \right)^2 \left(1 - \frac{4n(N-n)}{N(N-1)}\right) + \frac{n(N-n)}{N(N-1)} \sum_p \Lambda_p^2 \quad (\text{D.11})$$

Pour $\lambda < 1$, il ne faut regarder que les puissances paires $n = 2k$ de x car les états se construisent en ajoutant un nombre pair d'excitations. En faisant $n = 2k$ dans (D.10) et (D.11) avec $k = 1, \dots, N/2 - 1$, on obtient

$$\langle E \rangle_k = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{4k}{N}\right) \sum_p \Lambda_p = -\frac{N}{2\pi} \left(1 - \frac{4k}{N}\right) \int_0^{2\pi} (1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u)^{1/2} du, \quad (\text{D.12})$$

$$\sigma_k^2 = \langle E^2 \rangle_k - \langle E \rangle_k^2 = \frac{2k(N-2k)}{N-1} \left[4(1 + \lambda^2) - \frac{1}{\pi^2} \left(\int_0^{2\pi} (1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u)^{1/2} du \right)^2 \right]. \quad (\text{D.13})$$

Les cas $k = 0$ et $k = N/2$ apportent une contribution sous forme de pics delta centrées sur l'énergie fondamentale et l'énergie de l'état le plus excité. En effet, on a

$$\langle E \rangle_0 = -\frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} (1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u)^{1/2} du = E_0, \quad (\text{D.14})$$

$$\langle E \rangle_{N/2} = \frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} (1 + \lambda^2 - 2\lambda \cos u)^{1/2} du = -E_0, \quad (\text{D.15})$$

avec E_0 l'énergie de l'état fondamental. Du fait que le spectre est symétrique pour les chaînes avec un nombre de spins N pair, il vient que $-E_0$ correspond à l'énergie de l'état le plus excité. De plus dans ces deux cas, on a d'après (D.13)

$$\sigma_0^2 = \sigma_{N/2}^2 = 0 \quad (\text{D.16})$$

et il est bien connu que

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(E - E_0)^2}{2\sigma^2}\right) = \delta(E - E_0) \quad (\text{D.17})$$

ce qui prouve que ces états apportent une contribution sous forme de fonction delta. Chacune de ces deux configurations viennent avec un poids $1/2^{N-1}$ de sorte que dans la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$, elles deviennent négligeables et la densité s'écrit alors comme une somme de gaussiennes

$$\rho(E) = 2 \sum_{k=1}^{N/2-1} \frac{C_N^{2k}}{2^N} \frac{\exp\left(-\frac{(E - \langle E \rangle_k)^2}{2\sigma_k^2}\right)}{\sqrt{2\pi}\sigma_k}. \quad (\text{D.18})$$

Le facteur 2 provient des conditions aux bords périodiques et anti-périodiques. Nous voyons donc que la densité est une somme d'approximations gaussiennes autour des différents pics créés par $2k$ excitations. Le poids $C_N^{2k}/2^N$ correspond au nombre de manières de choisir $2k$ excitations parmi N .

MÉTHODE DE LATTA POUR LES ÉQUATIONS INTÉGRALES DE FREDHOLM

On montre dans cette annexe une méthode développée par Latta dans les années 50 pour résoudre les équations intégrales de Fredholm de première espèce dont le noyau satisfait une équation différentielle linéaire. Le problème général peut se formuler ainsi : trouver les solutions $f(x)$ de l'équation intégral avec le noyau $K(x, t)$

$$g(x) = \int_a^b f(t)K(x, t)dt, \quad a < x < b \quad (\text{E.1})$$

avec $g(x)$ et $K(x, t)$ donné. La méthode proposée par Latta dans son article de 1956 consiste à transformer l'équation intégrale en une équation différentielle [Lat56]. Nous illustrons ici la méthode de Latta sur un exemple simple puis nous adaptons la méthode à notre problème intégral.

E.1 Équation intégrale avec noyau $K(x, t) = \ln |x - t|$.

Considérons l'équation intégrale :

$$\int_{-1}^1 f(t) \ln |x - t| dt = g(x) \quad (\text{E.2})$$

où nous avons choisi les bornes de l'intégrale égales à ± 1 . On définit l'opérateur intégral Γ dont l'action sur une fonction f est donné par :

$$\Gamma f = \int_{-1}^1 \ln |x - t| f(t) dt. \quad (\text{E.3})$$

Un calcul assez simple donne :

$$\begin{aligned} \Gamma x f &= \int_{-1}^1 t \ln |x - t| f(t) dt, \\ &= x \Gamma f - \int_{-1}^1 (x - t) \ln |x - t| f(t) dt. \end{aligned}$$

Dérivons par rapport à x et utilisons la propriété du noyau $xK'(x) = 1$, il vient :

$$\frac{d}{dx} \Gamma x f = \Gamma' x f = x \Gamma' f - \int_{-1}^1 f(t) dt. \quad (\text{E.4})$$

Montrons maintenant que pour une fonction intégrable $y(x)$ telle que $y(\pm 1) = 0$ on a :

$$\Gamma' y = \Gamma y'. \quad (\text{E.5})$$

Soit

$$p(u) = \int_0^u K(v) dv.$$

Une intégration par partie donne :

$$\Gamma y = \int_{-1}^1 K(x - t) y(t) dt = -p(x - t) y(t) \Big|_{-1}^x - p(x - t) y(t) \Big|_x^1 + \int_{-1}^1 p(x - t) y'(t) dt \quad (\text{E.6})$$

Le terme tout intégré s'annule pour des fonctions $y(x)$ présentant la propriété citée plus haut. Il s'ensuit qu'en dérivant par rapport à x on retrouve (E.5). Les équations (E.4) et (E.5) sont les deux équations fondamentales dans la réduction du problème intégral en problème différentiel.

Supposons maintenant que l'on veuille résoudre :

$$\Gamma f = 1, \quad -1 < x < 1. \quad (\text{E.7})$$

L'équation (E.4) donne :

$$\Gamma' x f = - \int_{-1}^1 f(t) dt = -\alpha, \quad (\text{E.8})$$

d'où :

$$\Gamma x f = -\alpha x + \beta. \quad (\text{E.9})$$

Il est clair que la combinaison

$$y(x) = \int_{-1}^x t f(t) dt, \quad (\text{E.10})$$

vérifie $y(\pm 1) = 0$. En effet, $f(x)$ possède la parité de $g(x)$ (en l'occurrence $g(x) = 1$ ici) ce qui fait que l'intégrand est impair. On a donc d'après l'équation (E.5) :

$$\Gamma' y = \Gamma y' = \Gamma x f = -\alpha x, \quad (\text{E.11})$$

soit en intégrant :

$$\Gamma y = -\frac{\alpha x^2}{2} + A. \quad (\text{E.12})$$

On montre de manière analogue qu'on a

$$\Gamma x^2 f = -\frac{\alpha x^2}{2} + B. \quad (\text{E.13})$$

On a alors :

$$\Gamma y = \Gamma x^2 f + (A - B) \Gamma f, \quad (\text{E.14})$$

et donc

$$y = x^2 f + (A - B) f, \quad (\text{E.15})$$

$$y' = x f. \quad (\text{E.16})$$

En éliminant y , il vient :

$$(x^2 + C) f' + x f = 0, \quad C = A - B. \quad (\text{E.17})$$

La condition $y(\pm 1) = 0$ conduit à $C = -1$ et la solution de l'équation intégrale (E.7) s'écrit alors :

$$f(x) = \frac{C_1}{\sqrt{1-x^2}}. \quad (\text{E.18})$$

La constante C_1 est donnée par :

$$C_1 = \frac{1}{\int_{-1}^1 \frac{\ln(x-t)}{\sqrt{1-t^2}} dt} \quad -1 < x < 1. \quad (\text{E.19})$$

Par construction C_1 est bel et bien une constante malgré la présence de la variable x dans l'intégrale ! Pour trouver sa valeur, nous faisons $x = 0$ et on utilise le résultat connu :

$$\int_0^1 \frac{\ln(t)}{\sqrt{1-t^2}} dt = -\frac{1}{2} \pi \ln(2). \quad (\text{E.20})$$

On trouve alors :

$$C_1 = -\frac{1}{\pi \ln(2)}. \quad (\text{E.21})$$

La solution du problème intégral (E.7) est alors donnée par :

$$f(x) = -\frac{1}{\pi \ln(2) \sqrt{1-x^2}}. \quad (\text{E.22})$$

References

- [AASA96] A. V. Andreev, O. Agam, B. D. Simons, and B. L. Altshuler. Quantum chaos, irreversible classical dynamics, and random matrix theory. *Physical review letters*, 76(21) :3947, 1996.
- [AB12] Y. Y. Atas and E. Bogomolny. Multifractality of eigenfunctions in spin chains. *Phys. Rev. E*, 86 :021104, Aug 2012.
- [AB14a] Y. Y. Atas and E. Bogomolny. Calculation of multi-fractal dimensions in spin chains. *Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 372(2007) :20120520, 2014.
- [AB14b] Y. Y. Atas and E. Bogomolny. Spectral density of the quantum ising model in two fields : Gaussian and multi-Gaussian approximations. *arXiv preprint arXiv :1402.6858*, 2014.
- [ABG⁺13] Y. Y. Atas, E. Bogomolny, O. Giraud, P. Vivo, and E. Vivo. Joint probability densities of level spacing ratios in random matrices. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 46(35) :355204, 2013.
- [ABGR13] Y. Y. Atas, E. Bogomolny, O. Giraud, and G. Roux. Distribution of the Ratio of Consecutive Level Spacings in Random Matrix Ensembles. *Phys. Rev. Lett.*, 110 :084101, Feb 2013.
- [And58] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109 :1492–1505, Mar 1958.
- [And59] P. W. Anderson. New Approach to the Theory of Superexchange Interactions. *Phys. Rev.*, 115 :2, 1959.
- [Aok83] H. Aoki. Critical behaviour of extended states in disordered systems. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 16(6) :L205, 1983.
- [AS64] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions : With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, volume 55. DoverPublications. com, 1964.
- [BAA06] D. M. Basko, I. L. Aleiner, and B. L. Altshuler. Metal–insulator transition in a weakly interacting many-electron system with localized single-particle states. *Annals of physics*, 321(5) :1126–1205, 2006.
- [Bax71] R. J. Baxter. One-dimensional anisotropic Heisenberg chain. *Phys. Rev. Lett.*, 26 :834–834, Apr 1971.
- [Bax07] R. J. Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics*. Courier Dover Publications, 2007.
- [BBD⁺13] S. Bittner, E. Bogomolny, B. Dietz, M. Miski-Oglu, and A. Richter. Experimental observation of localized modes in a dielectric square resonator. *Physical Review E*, 88(6) :062906, 2013.
- [BCS57] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of Superconductivity. *Phys. Rev.*, 108 :1175–1204, Dec 1957.
- [Ber86] M. V. Berry. Riemann’s Zeta function : A model for quantum chaos? In *Quantum chaos and statistical nuclear physics*, pages 1–17. Springer, 1986.
- [Ber93] B. Berche. Limite Hamiltonienne du modèle d’Ising. *Document de cours de l’Université de Lorraine*, 1993.
- [Bet31] H. Bethe. Zur theorie der metalle. *Zeitschrift für Physik*, 71(3-4) :205–226, 1931.
- [Bet36] H. A. Bethe. An Attempt to Calculate the Number of Energy Levels of a Heavy Nucleus. *Phys. Rev.*, 50 :332–341, 1936.
- [Bet37] H. A. Bethe. Nuclear physics B. Nuclear dynamics, theoretical. *Reviews of Modern Physics*, 9(2) :69, 1937.

-
- [BFF⁺81] T. A. Brody, J. Flores, J. B. French, P. A. Mello, A. Pandey, and S. S. M. Wong. Random-matrix physics : spectrum and strength fluctuations. *Reviews of Modern Physics*, 53(3) :385, 1981.
- [BG84] O. Bohigas and M. J. Giannoni. *Mathematical and Computational Methods in Nuclear Physics, Proceedings of the Sixth Granada Workshop, Granada, Spain, 1983*. Springer, 1984.
- [BGS97] E. B. Bogomolny, B. Georgeot, M.-J. Giannoni, and C. Schmit. Arithmetical chaos. *Physics Reports*, 291(5) :219–324, 1997.
- [BGS84] O. Bohigas, M.-J. Giannoni, and C. Schmit. Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws. *Physical Review Letters*, 52 :1–4, 1984.
- [BH76] H. P. Baltes and E. R. Hilf. *Spectra of finite systems*. BI Wissenschaftsverlag Mannheim, 1976.
- [BHP83] O. Bohigas, R. U. Haq, and A. Pandey. Fluctuation properties of nuclear energy levels and widths : comparison of theory with experiment. In *Nuclear data for science and technology*, pages 809–813. Springer, 1983.
- [BK96] E. B. Bogomolny and J. P. Keating. Gutzwiller’s trace formula and spectral statistics : beyond the diagonal approximation. *Physical review letters*, 77(8) :1472, 1996.
- [BK99] M. V. Berry and J. P. Keating. The Riemann zeros and eigenvalue asymptotics. *SIAM review*, 41(2) :236–266, 1999.
- [BLS96] E. Bogomolny, F. Leyvraz, and C. Schmit. Distribution of eigenvalues for the modular group. *Communications in mathematical physics*, 176(3) :577–617, 1996.
- [BM98] A. Bohr and B. R. Mottelson. *Nuclear structure*, volume 1. World Scientific, 1998.
- [BMB06] B. Basu-Mallick and N. Bondyopadhyaya. Exact partition function of $SU(m|n)$ supersymmetric Haldane–Shastry spin chain. *Nuclear Physics B*, 757(3) :280–302, 2006.
- [Bog07] E. Bogomolny. Riemann zeta function and quantum chaos. *arXiv preprint arXiv :0708.4223*, 2007.
- [Bos86] Jean-Benoît Bost. Tores invariants des systemes dynamiques hamiltoniens. *Séminaire Bourbaki*, 27 :113–157, 1986.
- [BRA96] D. Bitko, T. F. Rosenbaum, and G. Aeppli. Quantum Critical Behavior for a Model Magnet. *Phys. Rev. Lett.*, 77 :940, 1996.
- [Bri16] L. Brillouin. Sur une méthode de calcul approchée de certaines intégrales dite méthode du col. In *Annales Scientifiques de L’école Normale Supérieure*, volume 33, pages 17–69. Société mathématique de France, 1916.
- [Bri26] L. Brillouin. La mécanique ondulatoire de Schrödinger ; une méthode générale de résolution par approximations successives. *CR Acad. Sci*, 183(11) :24–26, 1926.
- [BRTT12] G. Biroli, A. C. Ribeiro-Teixeira, and M. Tarzia. Difference between level statistics, ergodicity and localization transitions on the Bethe lattice. *arXiv preprint arXiv :1211.7334*, 2012.
- [BT76] M. V. Berry and M. Tabor. Closed orbits and the regular bound spectrum. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 349(1656) :101–123, 1976.
- [BT77a] M. V. Berry and M. Tabor. Calculating the bound spectrum by path summation in action-angle variables. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 10(3) :371, 1977.
- [BT77b] M. V. Berry and M. Tabor. Level clustering in the regular spectrum. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 356(1686) :375–394, 1977.
- [CARK12] M. Collura, H. Aufderheide, G. Roux, and D. Karevski. Entangling many-body bound states with propagative modes in Bose-Hubbard systems. *Physical Review A*, 86(1) :013615, 2012.
- [CC06] P. Calabrese and J. Cardy. Time dependence of correlation functions following a quantum quench. *Physical review letters*, 96(13) :136801, 2006.
- [CDK14] N. D. Chavda, H. N. Deota, and V. K. B. Kota. Poisson to GOE transition in the distribution of ratio of consecutive level spacings. *arXiv preprint arXiv :1405.6321*, 2014.
- [CEF11] P. Calabrese, F. H. L. Essler, and M. Fagotti. Quantum quench in the transverse-field Ising chain. *Physical review letters*, 106(22) :227203, 2011.
- [CFIM12] Emilio Cuevas, Mikhail Feigel’Man, Lev Ioffe, and Marc Mezard. Level statistics of disordered spin-1/2 systems and materials with localized Cooper pairs. *Nature communications*, 3 :1128, 2012.

- [CFZ07] B. Conrey, D. W. Farmer, and M. R. Zirnbauer. Autocorrelation of ratios of L-functions. *arXiv preprint arXiv:0711.0718*, 2007.
- [CK13] N. D. Chayda and V. K. B. Kota. Probability distribution of the ratio of consecutive level spacings in interacting particle systems. *Physics Letters A*, 377(42) :3009–3015, 2013.
- [CS11] L. Cantini and A. Sportiello. Proof of the Razumov–Stroganov conjecture. *Journal of Combinatorial Theory, Series A*, 118(5) :1549–1574, 2011.
- [CTW⁺10] R. Coldea, D. A. Tennant, E. M. Wheeler, E. Wawrzynska, D. Prabhakaran, M. Telling, K. Habicht, P. Smeibidl, and K. Kiefer. Quantum criticality in an ising chain : experimental evidence for emergent E_8 symmetry. *Science*, 327(5962) :177–180, 2010.
- [CW02] J. K. Cullum and R. A Willoughby. *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations : Vol. 1 : Theory*, volume 41. SIAM, 2002.
- [Dag94] E. Dagotto. Correlated electrons in high-temperature superconductors. *Reviews of Modern Physics*, 66(3) :763, 1994.
- [DE02] I. Dumitriu and A. Edelman. Matrix models for beta ensembles. *Journal of Mathematical Physics*, 43(11) :5830–5847, 2002.
- [Deu91] J. M. Deutsch. Quantum statistical mechanics in a closed system. *Physical Review A*, 43(4) :2046, 1991.
- [DGM⁺68] P. Decowski, W. Grochulski, A. Marcinkowski, K. Siwek, and Z. Wilhelmi. On superconductivity effects in nuclear level density. *Nuclear Physics A*, 110(1) :129–141, 1968.
- [DGSP⁺09] D. Delande, J.-C. Garreau, L. Sanchez-Palencia, B. Van Tiggelen, et al. La localisation forte d’Anderson. *Images de la Physique 2009*, pages 70–74, 2009.
- [DIMO⁺13] B. Dietz, F. Iachello, M. Miski-Oglu, N. Pietralla, A. Richter, L. von Smekal, and J. Wambach. Lifshitz and excited-state quantum phase transitions in microwave Dirac billiards. *Physical Review B*, 88(10) :104101, 2013.
- [Dir29] P. A. M. Dirac. Quantum mechanics of many-electron systems. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 123(729) :714–733, 1929.
- [DR14] L. D’Alessio and M. Rigol. Long-time behavior of periodically driven isolated interacting quantum systems. *arXiv preprint arXiv:1402.5141*, 2014.
- [Dys04a] F. J. Dyson. Statistical theory of the energy levels of complex systems. I. *Journal of Mathematical Physics*, 3(1) :140–156, 2004.
- [Dys04b] F. J. Dyson. The threefold way. Algebraic structure of symmetry groups and ensembles in quantum mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, 3(6) :1199–1215, 2004.
- [Dys04c] Freeman J Dyson. Statistical theory of the energy levels of complex systems. II. *Journal of Mathematical Physics*, 3(1) :157–165, 2004.
- [EFGLO9] A. Enciso, F. Finkel, and A. González-López. Spin chains of Haldane-Shastry type and a generalized central limit theorem. *Physical Review E*, 79(6) :060105, 2009.
- [EM00] F. Evers and A. D. Mirlin. Fluctuations of the inverse participation ratio at the Anderson transition. *Physical review letters*, 84(16) :3690, 2000.
- [EMM05] A. Eskin, G. Margulis, and S. Mozes. Quadratic forms of signature $(2, 2)$ and eigenvalue spacings on rectangular 2-tori. *Annals of mathematics*, pages 679–725, 2005.
- [ES08] A. Edelman and B. D. Sutton. The beta-Jacobi matrix model, the CS decomposition, and generalized singular value problems. *Foundations of Computational Mathematics*, 8(2) :259–285, 2008.
- [FGL05] F. Finkel and A. González-López. Global properties of the spectrum of the Haldane-Shastry spin chain. *Physical Review B*, 72(17) :174411, 2005.
- [FJK86] H. Fredricksen and I. J. Kessler. An algorithm for generating necklaces of beads in two colors. *Discrete mathematics*, 61(2) :181–188, 1986.
- [FOR09] Y. V. Fyodorov, A. Ossipov, and A. Rodriguez. The Anderson localization transition and eigenfunction multifractality in an ensemble of ultrametric random matrices. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2009(12) :L12001, 2009.

-
- [FSP⁺09] S. Faez, A. Strybulevych, J. H. Page, Ad. Lagendijk, and B. A. van Tiggelen. Observation of multifractality in Anderson localization of ultrasound. *Phys. Rev. Lett.*, 103 :155703, Oct 2009.
- [FW71] J. B. French and S. S. M. Wong. Some random-matrix level and spacing distributions for fixed-particle-rank interactions. *Physics Letters B*, 35(1) :5–7, 1971.
- [Gau00] C. F. Gauss. Werke, vol. VIII, Teubner, Leipzig, page 272, 1900.
- [GC65] A. Gilbert and A. G. W. Cameron. A composite nuclear-level density formula with shell corrections. *Canadian Journal of Physics*, 43(8) :1446–1496, 1965.
- [Ger72] A. Gervois. Level densities for random one-or two-body potentials. *Nuclear Physics A*, 184(2) :507–532, 1972.
- [GHL⁺92] H.-D. Gräf, H. L. Harney, H. Lengers, C. H. Lewenkopf, C. Rangacharyulu, A. Richter, P. Schardt, and H. A. Weidenmüller. Distribution of eigenmodes in a superconducting stadium billiard with chaotic dynamics. *Physical review letters*, 69(9) :1296, 1992.
- [Gir02] O. Giraud. Statistiques spectrales des systèmes diffractifs. *Thèse de Doctorat de l’Université Paris XI*, 2002.
- [GMC⁺96] G. E. Granroth, M. W. Meisel, M. Chaparala, Th. Jolicoeur, B. H. Ward, and D. R. Talham. Experimental evidence of a Haldane gap in an $S = 2$ quasi-linear-chain antiferromagnet. *Physical review letters*, 77(8) :1616, 1996.
- [GMGW98] T. Guhr, A. Müller-Groeling, and H. A. Weidenmüller. Random-matrix theories in quantum physics : common concepts. *Physics Reports*, 299(4) :189–425, 1998.
- [GMRnR02] J. M. G. Gómez, R. A. Molina, A. Relaño, and J. Retamosa. Misleading signatures of quantum chaos. *Phys. Rev. E*, 66 :036209, Sep 2002.
- [Gri04] R. B. Griffiths. A proof that the free energy of a spin system is extensive. *Journal of Mathematical Physics*, 5(9) :1215–1222, 2004.
- [GS89] T. Giamarchi and H. J. Schulz. Correlation functions of one-dimensional quantum systems. *Physical Review B*, 39(7) :4620, 1989.
- [Gut90] M. C. Gutzwiller. *Chaos in classical and quantum mechanics*, volume 1. Springer, 1990.
- [Gut03] M. C. Gutzwiller. Periodic orbits and classical quantization conditions. *Journal of Mathematical Physics*, 12(3) :343–358, 2003.
- [H⁺76] D. A. Hejhal et al. The Selberg trace formula and the Riemann zeta function. *Duke Mathematical Journal*, 43(3) :441–482, 1976.
- [Haa10] F. Haake. *Quantum signatures of chaos*, volume 54. Springer, 2010.
- [Hal83] F. D. M. Haldane. Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets : semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis néel state. *Physical Review Letters*, 50 :1153–1156, 1983.
- [HCC⁺14] S. K. Haldar, B. Chakrabarti, N. D. Chavda, T. K. Das, S. Canuto, and V. K. B. Kota. Level-spacing statistics and spectral correlations in diffuse van der Waals clusters. *Physical Review A*, 89(4) :043607, 2014.
- [Hei28] W. Heisenberg. Zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 49(9-10) :619–636, 1928.
- [HJK⁺86] T. C. Halsey, M. H. Jensen, L. P. Kadanoff, I. Procaccia, and B. I. Shraiman. Fractal measures and their singularities : the characterization of strange sets. *Physical Review A*, 33(2) :1141, 1986.
- [HK⁺00] C. P. Hughes, J. P. Keating, et al. Random matrix theory and the derivative of the Riemann zeta function. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 456(2003) :2611–2627, 2000.
- [HR18] G. H. Hardy and S. Ramanujan. Asymptotic formulae in combinatory analysis. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 2(1) :75–115, 1918.
- [HWS07] G. H. Hardy, E. M. Wright, and F. Sauvageot. *Introduction à la théorie des nombres*. Vuibert, 2007.
- [IK09] A. R. Its and V. E. Korepin. The Fisher-Hartwig formula and entanglement entropy. *Journal of Statistical Physics*, 137(5-6) :1014–1039, 2009.
- [Isi25] E. Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 31(1) :253–258, 1925.

- [Jan94] M. Janssen. Multifractal analysis of broadly-distributed observables at criticality. *International Journal of Modern Physics B*, 8(08) :943–984, 1994.
- [Jan98] M. Janssen. Statistics and scaling in disordered mesoscopic electron systems. *Physics Reports*, 295(1) :1–91, 1998.
- [JBM⁺12] F. Jendrzejewski, A. Bernard, K. Mueller, P. Cheinet, V. Josse, M. Piraud, L. Pezzé, L. Sanchez-Palencia, A. Aspect, and P. Bouyer. Three-dimensional localization of ultracold atoms in an optical disordered potential. *Nature Physics*, 8(5) :398–403, 2012.
- [JW93] P. Jordan and E. P. Wigner. über das paulische äquivalenzverbot. In *The Collected Works of Eugene Paul Wigner*, pages 109–129. Springer, 1993.
- [KFM⁺14] A. W. Kinross, M. Fu, T. J. Munsie, H. A. Dabkowska, G. M. Luke, S. Sachdev, and T. Imai. Quantum Fluctuations of the Transverse Field Ising Chain. *arXiv preprint arXiv :1401.6917*, 2014.
- [KGP⁺89] D. E. Knuth, R. Graham, O. Patashnik, et al. *Concrete mathematics*. Citeseer, 1989.
- [KH13] H. Kim and D. A. Huse. Ballistic spreading of entanglement in a diffusive nonintegrable system. *Physical review letters*, 111(12) :127205, 2013.
- [KHM98] M. Karbach, K. Hu, and G. Muller. Introduction to the Bethe ansatz II. *arXiv preprint cond-mat/9809163*, 1998.
- [KHM00] M. Karbach, K. Hu, and G. Muller. Introduction to the Bethe ansatz III. *arXiv preprint cond-mat/0008018*, 2000.
- [Kit86] C. Kittel. *Introduction to solid state physics*. Wiley New York, 1986.
- [KLNS03] V. E. Korepin, S. Lukyanov, Y. Nishiyama, and M. Shiroishi. Asymptotic behavior of the emptiness formation probability in the critical phase of XXZ spin chain. *Physics Letters A*, 312(1) :21–26, 2003.
- [KLW14a] J. P. Keating, N. Linden, and H. J. Wells. Random matrices and quantum spin chains. *arXiv preprint arXiv :1403.1114*, 2014.
- [KLW14b] JP Keating, N Linden, and HJ Wells. Spectra and eigenstates of spin chain Hamiltonians. *arXiv preprint arXiv :1403.1121*, 2014.
- [KM98] M. Karbach and G. Muller. Introduction to the Bethe ansatz I. *arXiv preprint cond-mat/9809162*, 1998.
- [KMST02] N. Kitanine, J. M. Maillet, N. A. Slavnov, and V. Terras. Large distance asymptotic behavior of the emptiness formation probability of the XXZ spin-1/2 heisenberg chain. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 35 :L753–L758, 2002.
- [Kog79] J. B. Kogut. An introduction to lattice gauge theory and spin systems. *Reviews of Modern Physics*, 51(4) :659, 1979.
- [Kot14] V. K. B. Kota. Interpolating and other extended classical ensembles. In *Embedded Random Matrix Ensembles in Quantum Physics*, pages 39–68. Springer, 2014.
- [Kra26] H. A. Kramers. Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung. *Zeitschrift für Physik*, 39(10-11) :828–840, 1926.
- [KRBL10] C. Kollath, G. Roux, G. Biroli, and A. M. Läuchli. Statistical properties of the spectrum of the extended Bose–Hubbard model. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2010(08) :P08011, 2010.
- [KS00] J. P. Keating and N. C. Snaith. Random matrix theory and $\zeta(1/2 + it)$. *Communications in Mathematical Physics*, 214(1) :57–89, 2000.
- [KTM82] J. Kurmann, H. Thomas, and G. Müller. Antiferromagnetic long-range order in the anisotropic quantum spin chain. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 112(1) :235–255, 1982.
- [KW41] H. A. Kramers and G. H. Wannier. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. Part I. *Physical Review*, 60(3) :252, 1941.
- [Lan52] C. Lanczos. Solution of systems of linear equations by minimized iterations. *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 49(1) :33–53, 1952.
- [Lat56] G. E. Latta. The solution of a class of integral equations. *J. Rat. Mech*, 5(5) :821–834, 1956.

-
- [LCB⁺07] P. Lugan, D. Clément, P. Bouyer, A. Aspect, M. Lewenstein, and L. Sanchez-Palencia. Ultracold Bose gases in 1d disorder : From Lifshits glass to Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 98 :170403, Apr 2007.
- [LCBP99] L. Laloux, P. Cizeau, J.-P. Bouchaud, and M. Potters. Noise Dressing of Financial Correlation Matrices. *Phys. Rev. Lett.*, 83 :1467–1470, Aug 1999.
- [Lia90] S. Liang. Monte Carlo calculations of the correlation functions for Heisenberg spin chains at $T = 0$. *Physical review letters*, 64(13) :1597, 1990.
- [LMR05] P. Leboeuf, A. G. Monastra, and A. Relano. Fluctuations in the level density of a Fermi gas. *Physical review letters*, 94(10) :102502, 2005.
- [LP04] N. Laflorencie and D. Poilblanc. Simulations of pure and doped low-dimensional spin-1/2 gapped systems. In *Quantum Magnetism*, pages 227–252. Springer, 2004.
- [LR06] P. Leboeuf and J. Roccia. Level density of a Fermi gas : average growth and fluctuations. *Physical review letters*, 97(1) :010401, 2006.
- [LSM61] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Annals of Physics*, 16(3) :407–466, 1961.
- [Lyn54] R.C. Lyndon. On Burnside’s problem. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 77 :202–215, 1954.
- [Mac91] P. A. MacMahon. Applications of a Theory of Permutations in Circular Procession to the Theory of Numbers. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 1(1) :305–318, 1891.
- [Man83] B. B. Mandelbrot. The fractal geometry of nature/Revised and enlarged edition. *New York, WH Freeman and Co., 1983, 495 p.*, 1, 1983.
- [Mat65] D. C. Mattis. *The theory of magnetism*, volume 1. Harper & Row New York, 1965.
- [Mat93] D. C. Mattis. *The many-body problem : an encyclopedia of exactly solved models in one dimension*. Springer Science & Business, 1993.
- [mdL10] Pierre Simon marquis de Laplace. *Mémoire sur les approximations des formules qui sont fonctions de très-grands nombres, et sur leur application aux probabilités*. Baudouin, 1810.
- [Meh04] M. L. Mehta. *Random matrices*, volume 142. Academic press, 2004.
- [MFD⁺96] A. D. Mirlin, Y. V. Fyodorov, F.-M. Dittes, J. Quezada, and T. H. Seligman. Transition from localized to extended eigenstates in the ensemble of power-law random banded matrices. *Physical Review E*, 54(4) :3221, 1996.
- [MFME06] A. D. Mirlin, Y. V. Fyodorov, A. Mildenberger, and F. Evers. Exact relations between multifractal exponents at the Anderson transition. *Phys. Rev. Lett.*, 97 :046803, Jul 2006.
- [MKS04] W. Magnus, A. Karrass, and D. Solitar. *Combinatorial group theory : Presentations of groups in terms of generators and relations*. Courier Dover Publications, 2004.
- [MLSF11] I. O. Morales, E. Landa, P. Stránský, and A. Frank. Improved unfolding by detrending of statistical fluctuations in quantum spectra. *Phys. Rev. E*, 84 :016203, Jul 2011.
- [Mon73] H. L. Montgomery. The pair correlation of zeros of the zeta function. In *Proc. Symp. Pure Math*, volume 24, pages 181–193, 1973.
- [Mot69] N. F. Mott. Conduction in non-crystalline materials : III. localized states in a pseudogap and near extremities of conduction and valence bands. *Philosophical Magazine*, 19(160) :835–852, 1969.
- [MS85] G. Müller and R. E. Shrock. Implications of direct-product ground states in the one-dimensional quantum XYZ and XY spin chains. *Physical Review B*, 32(9) :5845, 1985.
- [Nad11] C. Nadal. Matrices aléatoires et leurs applications à la physique statistique et quantique. *Thèse de Doctorat de l’Université Paris XI*, 2011.
- [Nom89] K. Nomura. Spin correlation function of the $S = 1$ antiferromagnetic Heisenberg chain by the large-cluster-decomposition Monte Carlo method. *Physical Review B*, 40 :2421–2425, 1989.
- [Odl] A. Odlyzko. *Andrew Odlyzko : Tables of zeros of the Riemann zeta function*. http://www.dtc.umn.edu/~odlyzko//zeta_tables/index.html.
- [Odl87] A. M. Odlyzko. On the distribution of spacings between zeros of the zeta function. *Mathematics of Computation*, 48(177) :273–308, 1987.
- [OH07] V. Oganessian and D. A. Huse. Localization of interacting fermions at high temperature. *Phys. Rev. B*, 75 :155111, Apr 2007.

- [Ons44] L. Onsager. Crystal statistics. I. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, 65(3-4) :117, 1944.
- [OPH09] V. Oganesyan, A. Pal, and D. A. Huse. Energy transport in disordered classical spin chains. *Physical Review B*, 80(11) :115104, 2009.
- [Orb58] R. Orbach. Linear antiferromagnetic chain with anisotropic coupling. *Phys. Rev.*, 112 :309–316, Oct 1958.
- [PASP12] M. Piraud, A. Aspect, and L. Sanchez-Palencia. Anderson localization of matter waves in tailored disordered potentials. *Phys. Rev. A*, 85 :063611, Jun 2012.
- [PBG89] A. Pandey, O. Bohigas, and M. J. Giannoni. Level repulsion in the spectrum of two-dimensional harmonic oscillators. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 22(18) :4083, 1989.
- [PH10] A. Pal and D. A. Huse. Many-body localization phase transition. *Physical Review B*, 82(17) :174411, 2010.
- [Poi81] H. Poincaré. Les methodes nouvelles de la mécanique céleste. Vol. 1-3, Verlag Gauthier-Villars, Paris 1892. Siehe auch : Poincare, H. : Sur les courbes definies par une equation differentielle. *Journ. de Math*, pages 3–7, 1881.
- [Pól21] G. Pólya. Über eine Aufgabe der Wahrscheinlichkeitsrechnung betreffend die Irrfahrt im Strassen-netz. *Mathematische Annalen*, 84(1) :149–160, 1921.
- [Por65] C. E. Porter. *Statistical theories of spectra : fluctuations*, volume 1665. Academic Press New York, 1965.
- [PPMS08] I. Pižorn, T. Prosen, S. Mossmann, and T. H. Seligman. The two-body random spin ensemble and a new type of quantum phase transition. *New Journal of Physics*, 10(2) :023020, 2008.
- [PSP11] L. Pezzé and L. Sanchez-Palencia. Localized and extended states in a disordered trap. *Phys. Rev. Lett.*, 106 :040601, Jan 2011.
- [Rad38] H. Rademacher. On the partition function $p(n)$. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 2(1) :241–254, 1938.
- [RCH⁺72] F. Rahn, H. S. Camarda, G. Hacken, W. W. Havens Jr, H. I. Liou, J. Rainwater, M. Slagowitz, and S. Wynchank. Neutron Resonance Spectroscopy. X. Th 232 and U 238. *Physical Review C*, 6(5) :1854, 1972.
- [RDO08] M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii. Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems. *Nature*, 452(7189) :854–858, 2008.
- [Ren61] A. Renyi. On measures of entropy and information. In *Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, pages 547–561, 1961.
- [Ric14] A. Richter. From an experimental test of the BGS conjecture to modeling relativistic effects in microwave billiards. *Talk given at Wandering from Nuclei to Chaos, Colloquium in memory of Oriol Bohigas*, 2014. Accessible at <http://lptms.u-psud.fr/wandering-from-nuclei-to-chaos/program/>.
- [Rie92] B. Riemann. Über die Anzahl der Primzahlen unter einer gegebenen Grosse (1859). *Collected Works*, Teubner, Leipzig, 1892.
- [Rou07] G. Roux. *Echelles de spins dopées sous champ magnétique*. PhD thesis, Université Paul Sabatier-Toulouse III, 2007.
- [Rou09] G. Roux. Quenches in quantum many-body systems : One-dimensional Bose-Hubbard model reexamined. *Physical Review A*, 79(2) :021608, 2009.
- [RS01] A. V. Razumov and Y. G. Stroganov. Spin chains and combinatorics. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 34(14) :3185, 2001.
- [RS10] M. Rigol and L. F. Santos. Quantum chaos and thermalization in gapped systems. *Physical Review A*, 82(1) :011604, 2010.
- [RVR08] A. Rodriguez, L. J. Vasquez, and R. A. Römer. Multifractal analysis of the metal-insulator transition in the three-dimensional Anderson model. II. symmetry relation under ensemble averaging. *Phys. Rev. B*, 78 :195107, Nov 2008.
- [RVSR11] A. Rodriguez, L. J. Vasquez, K. Slevin, and R. A. Römer. Multifractal finite-size scaling and universality at the Anderson transition. *Physical Review B*, 84(13) :134209, 2011.

-
- [RZRV94] L. P. Regnault, I. Zaliznyak, J. P. Renard, and C. Vettier. Inelastic-neutron-scattering study of the spin dynamics in the Haldane-gap system $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2\text{ClO}_4$. *Phys. Rev. B*, 50 :9174, 1994.
 - [Sac07] S. Sachdev. *Quantum phase transitions*. Wiley Online Library, 2007.
 - [San11] A. W. Sandvik. Computational studies of quantum spin systems. *arXiv :1101.3281*, 2011.
 - [SFMP09] J.-M. Stéphan, S. Furukawa, G. Misguich, and V. Pasquier. Shannon and entanglement entropies of one-and two-dimensional critical wave functions. *Physical Review B*, 80(18) :184421, 2009.
 - [SFS89] R. R. P. Singh, M. E. Fisher, and R. Shankar. Spin-(1/2 antiferromagnetic xxz chain : New results and insights. *Physical Review B*, 39(4) :2562, 1989.
 - [SGJ96] U. Schollwöck, O. Golinelli, and Th. Jolicœur. $S = 2$ antiferromagnetic quantum spin chain. *Physical Review B*, 54(6) :4038, 1996.
 - [SGRZ99] M. Schreiber, U. Grimm, R. A. Römer, and J. Zhong. Energy levels of quasiperiodic Hamiltonians, spectral unfolding, and random matrix theory. *Computer physics communications*, 121 :499–501, 1999.
 - [SM88] H. E. Stanley and P. Meakin. Multifractal phenomena in physics and chemistry. *Nature*, 335(6189) :405–409, 1988.
 - [SML64] T. D. Schultz, D. C. Mattis, and E. H. Lieb. Two-dimensional Ising model as a soluble problem of many fermions. *Rev. Mod. Phys.*, 36 :856–871, Jul 1964.
 - [SMP10] J.-M. Stéphan, G. Misguich, and V. Pasquier. Rényi entropy of a line in two-dimensional Ising models. *Physical Review B*, 82(12) :125455, 2010.
 - [SN86] T. H. Seligman and H. Nishioka. Quantum chaos and statistical nuclear physics. In *Quantum Chaos and Statistical Nuclear Physics*, volume 263, 1986.
 - [SP06] L. Sanchez-Palencia. Smoothing effect and delocalization of interacting Bose-Einstein condensates in random potentials. *Phys. Rev. A*, 74 :053625, Nov 2006.
 - [SR10] L. F. Santos and M. Rigol. Localization and the effects of symmetries in the thermalization properties of one-dimensional quantum systems. *Physical Review E*, 82(3) :031130, 2010.
 - [Sre94] M. Srednicki. Chaos and quantum thermalization. *Physical Review E*, 50(2) :888, 1994.
 - [Sre11] M. Srednicki. Nonclassical Degrees of Freedom in the Riemann Hamiltonian. *Phys. Rev. Lett.*, 107 :100201, 2011.
 - [Str01] Y. Stroganov. The importance of being odd. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 34(13) :L179, 2001.
 - [Sze15] G. Szegő. Ein Grenzwertsatz über die Toeplitzischen Determinanten einer reellen positiven Funktion. *Mathematische Annalen*, 76(4) :490–503, 1915.
 - [Tak05] Minoru Takahashi. *Thermodynamics of one-dimensional solvable models*. Cambridge University Press, 2005.
 - [Tit86] E. C. Titchmarsh. *The theory of the Riemann zeta-function*. Oxford University Press, 1986.
 - [TL11] O. Tsyplatyev and D. Loss. Spectrum of an electron spin coupled to an unpolarized bath of nuclear spins. *Physical review letters*, 106(10) :106803, 2011.
 - [TPCN93] D. A. Tennant, T. G. Perring, R. A. Cowley, and S. E. Nagler. Unbound spinons in the $S = 1/2$ antiferromagnetic chain KCuF_3 . *Phys. Rev. Lett.*, 70 :4003, 1993.
 - [Tri85] F. G. Tricomi. *Integral equations*, volume 5. Courier Dover Publications, 1985.
 - [Viv11] P. Vivo. Random Matrix Theory : a Matlab based tutorial. *Lecture given at the LPTMS*, 2011.
 - [Wen26] G. Wentzel. Eine verallgemeinerung der quantenbedingungen für die zwecke der wellenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, 38(6-7) :518–529, 1926.
 - [Wid75] H. Widom. On the limit of block Toeplitz determinants. *Proceedings of the American Mathematical Society*, pages 167–173, 1975.
 - [Wig51] E. P. Wigner. On the statistical distribution of the widths and spacings of nuclear resonance levels. In *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, volume 47, pages 790–798. Cambridge Univ Press, 1951.
 - [Wig58] E. P. Wigner. On the distribution of the roots of certain symmetric matrices. *Ann. Math*, 67(2) :325–327, 1958.

REFERENCES

- [Wig93] E. P. Wigner. Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions I. In *The Collected Works of Eugene Paul Wigner*, pages 524–540. Springer, 1993.
- [Wit53] E. Witt. Treue darstellungen beliebiger liescher ringe. *Collectanea Mathematica*, 6(1) :107–114, 1953.
- [YY66] C. N. Yang and C. P. Yang. One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. I. proof of Bethe’s hypothesis for ground state in a finite system. *Phys. Rev.*, 150 :321–327, Oct 1966.
- [ZJ02] J. Zinn-Justin. *Quantum field theory and critical phenomena*. Clarendon Press, 2002.

Résumé

Cette thèse est consacrée à l'étude de quelques aspects du chaos quantiques dans les chaînes de spins quantiques. On s'intéresse en particulier aux propriétés spectrales de modèles de chaînes de spins tels que le modèle d'Ising en champs transverse et longitudinal. Le chapitre 1 présente les techniques numériques standards utilisées pour obtenir les valeurs et vecteurs propres des Hamiltoniens de chaînes de spins. Le chapitre 2 est consacré au calcul de la densité d'états des chaînes de spins quantiques. Les densités d'états des modèles quantiques constituent des quantités importantes et très simples qui permettent de caractériser les propriétés spectrales des systèmes avec un grand nombre de degrés de liberté. En raison du théorème de la limite centrale, la densité d'états des modèles intégrables dont le spectre consiste en le remplissage de niveaux fermioniques, ce qui est le cas du modèle d'Ising en champ transverse par exemple, converge vers une loi normale dans la limite thermodynamique et dans le centre du spectre. Cependant, dans certaines limites de couplage de la chaîne de spins au champ magnétique, nous observons l'apparition de pics dans la densité d'états. Dans la limite thermodynamique, les pics se recouvrent et on retrouve l'approximation gaussienne. En pratique, la limite thermodynamique n'est pas atteignable et nous montrons que la connaissance des deux premiers moments du Hamiltonien dans le sous-espace dégénéré associé à chaque pics donne une bonne approximation de la densité d'états. Nous montrons ensuite comment cette technique peut être utilisée pour trouver des approximations de la densité d'états même dans le cas de modèles non intégrables. Dans le chapitre 3, nous étudions les propriétés statistiques des valeurs propres des modèles de chaînes de spins. L'un des principal résultats sur la statistique spectrale des systèmes quantiques concerne le comportement universel des fluctuations des mesures telles que l'espacement entre valeurs propres consécutives. Ces fluctuations sont bien décrites par la théorie des matrices aléatoires mais la comparaison avec les prédictions de cette théorie nécessite généralement une opération sur le spectre du Hamiltonien appelée *unfolding*. Cet *unfolding* est facile à implémenter pour les modèles dont la densité d'états est connue exactement (ce qui est le cas pour la plupart des modèles intégrables) et pour les modèles où une approximation de la densité d'états est connue. Dans les problèmes quantiques de N corps, la taille de l'espace de Hilbert croît généralement exponentiellement avec le nombre de particules, entraînant un manque de données pour pouvoir faire une statistique. Ces limitations ont amené l'introduction d'une nouvelle mesure se passant de la procédure d'*unfolding* basée sur le rapport d'espacements successifs plutôt que les espacements. Cette mesure est indépendante de la densité d'états locale. En suivant l'idée du "surmise" de Wigner pour le calcul de la distribution de l'espacement, nous avons calculé une approximation de la distribution du rapport d'espacements dans les trois ensembles gaussiens invariants en faisant le calcul pour des matrices 3×3 . Les résultats que nous avons obtenus pour les différents ensembles de matrices aléatoires se sont révélés être en excellent accord avec les résultats numériques. Enfin, dans le chapitre 4, nous étudions les propriétés des coefficients des fonctions d'onde fondamentales de divers modèles de chaînes de spins. Nous démontrons en particulier la nature multifractale des fonctions d'ondes fondamentales en calculant numériquement l'entropie de Rényi puis en extrapolant celle-ci, nous en déduisons la dimension multifractale.

Mots clefs

Chaînes de spins quantiques, modèle d'Ising quantique, statistique spectrale, densité d'états, chaos quantique, matrices aléatoires, Wigner "surmise", distribution de l'espacement, multifractalité, entropie de Rényi.

Some aspects of quantum chaos in many body interacting systems Quantum spin chains and random matrices

Abstract

This thesis is devoted to the study of some aspects of quantum chaos in quantum spins chains. In particular, we look at spectral properties of quantum spins model such as the quantum Ising model in longitudinal and transverse fields. The first chapter presents the standard numerical techniques used for computing eigenvalues and eigenvectors of quantum spin chain Hamiltonians. The second chapter is dedicated to the computation of level densities of quantum spins chains. Level densities of quantum models are important and simple quantities which permit to characterize spectral properties of systems with large number of degree of freedom. Due to the central limit theorem, the level density of integrable systems with spectrum obtained by filling of one particle fermionic level tends to the normal law in the thermodynamic limit and in the bulk of the spectrum. This is the case for the Ising model in transverse field for instance. However, in certain limit of coupling with the magnetic field, we observe the appearance of peaks in the level density. In the thermodynamic limit, peaks overlap and we recover the gaussian shape. In practice, the thermodynamic is not reachable and we show that the knowledge of the two first moments of the Hamiltonian in the degenerated subspace associated with each peak give good approximation of the level density. We then show how this technique can be used to obtain approximation of the level density in the case of a non integrable model. In the chapter 3 we study the statistical properties of the eigenvalues of spins chains Hamiltonians. One of the main achievement in the study of the spectral statistic of quantum complex systems concerns the universal behaviour in the fluctuation of measure such as the distribution of spacing between two consecutive eigenvalues. These fluctuations are very well described by the theory of random matrices but the comparison with the theoretical prediction requires generally a transformation on the spectrum of the Hamiltonian called the unfolding procedure. This procedure is very easy to implement when the smooth part of the level density is exactly known, which is the case for almost all integrable models, or when an approximation is known. For many-body quantum systems, the size of the Hilbert space generally grows exponentially with the number of particles leading thus to a lack of data to make a clean statistical study. These constraints have led to the introduction of a new measure freed from the unfolding procedure and based on the ratio of consecutive level spacings rather than the spacings. This measure is independant of the local level density. By following the Wigner surmise for the computation of level spacing distribution, we obtained approximation for the distribution of the ratio of consecutive level spacings by analyzing random 3×3 matrices from the three canonical ensembles. The prediction are compared to numerical results and show excellent agreement. Finally, in the last chapter we investigate eigenfunctions statistics of some canonical spin-chain Hamiltonians. We demonstrate that the groundstate eigenfunctions of all these models are multifractal by computing numerically the Rényi entropy and extrapolating it to obtain the multifractal dimensions.

Keywords

Quantum spin chains, quantum Ising model, spectral statistics, level density, quantum chaos, random matrices, Wigner surmise, spacing distribution, multifractality, Rényi entropy.