

Etude d'une transition de phase quantique

stage du Master I 2003/2004
au LPM2C Grenoble

stagiaire: Johannes Rauh
maître de stage: Frédéric Faure

15 juin 2004

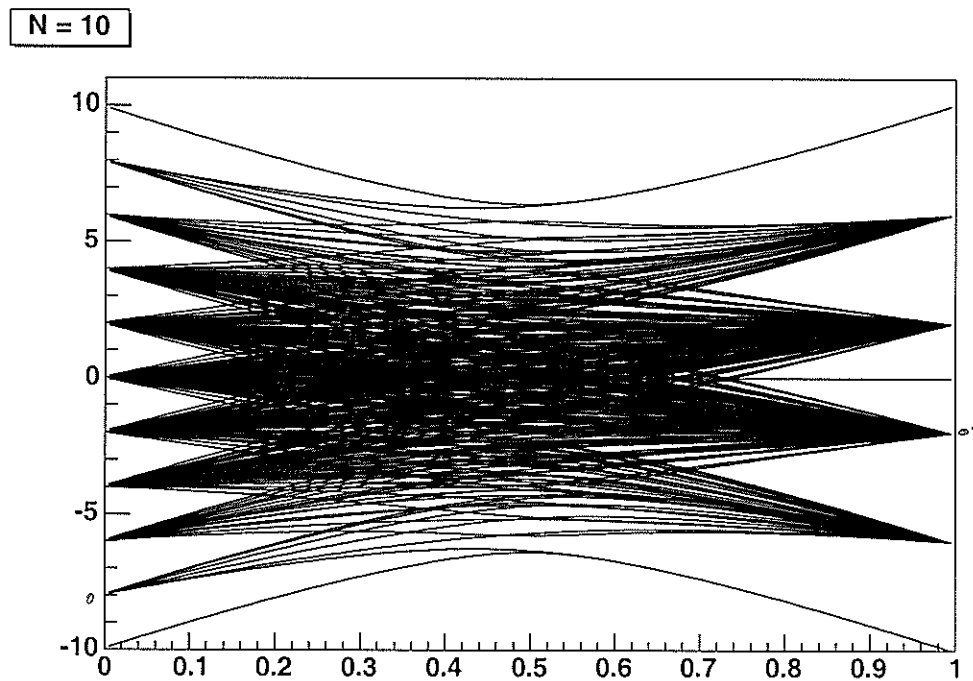


Table des matières

I	Introduction	3
1	Le laboratoire	3
2	Le modèle analysé	3
3	L'intérêt du modèle et le but du stage	4
II	Les résultats du travail	7
4	Propriétés générales du spectre	7
4.1	Le point critique	8
5	L'interprétation en termes de quasi-particules	10
5.1	Les états à une onde de spin	10
5.2	Les états à une paire de parois de domaines	14
5.3	Les spins comme fermions	15
5.4	La deuxième bande : fermions ou bosons ?	18
5.5	Résumée	20
6	Décomposition de l'espace Hilbert en sphères	21
6.1	L'état fondamental classique	21
6.2	La sphère des spins parallèles	23
6.3	Les sphères de largeur $N/2 - 1$	24
6.4	Les sphères de largeur $N/2 - 2$	25
6.5	Deux spins effectifs	26
6.6	Perspectives	27
7	l'effet tunnel	29
8	Remerciements	31
A	Complément à la section 4	32
A.1	La symétrie du Hamiltonien	32
B	Complément à la section 5	33
B.1	La restriction du Hamiltonien au sous-espace d'une seule onde de spin	33
B.2	L'impulsion \hat{p} dans la chaîne des spins	33
C	Complément à la section 6	34
C.1	La sphère de rayon $N/2$: la base et les éléments de matrice	34
C.2	Les sphères de largeur $N/2 - 2$: la base	35
C.3	Les deux sphères effectifs de rayon $N/2$: les éléments de matrice	35
D	Complément à la section 7	37
D.1	le temps de tunnel dans un double-puits	37

Première partie

Introduction

1 Le laboratoire

Le LPM2C (Laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés) qui fait partie du CNRS a été fondé en 1991 pour combiner les approches théoriques et numériques à l'investigation de la matière condensée. Aujourd'hui il y a trois principaux thèmes de recherche :

- La stabilité des structures complexes : Ce groupe sous la direction d'Alain Pasturel analyse l'auto-organisation de la matière. Par exemple, on analyse les modèles de couches minces pour calculer les propriétés magnétiques telles que l'énergie d'anisotropie. Un autre problème étudié est la stabilité de molécules adsorbées sur un substrat. Cette adsorption peut se passer de façon régulière, dans un réseau où le long d'une ligne, ou irrégulière.
- Les ondes en milieux complexes : Les ondes analysées dans le groupe de Bart van Tiggele sont surtout des ondes électromagnétiques, et les milieux complexes sont les matériaux désordonnés comme des cristaux avec beaucoup d'impuretés. Mais on analyse aussi des phénomènes de diffusion assez généraux qui apparaissent aux ondes acoustiques où aux ondes sismiques lors d'un tremblement de terre.
- La physique théorique des systèmes mésoscopiques : Les systèmes étudiés par le groupe de Frank Hekking sont caractérisés par une petite taille (nano- ou mésoscopique) et l'interaction de beaucoup de particules. Ce groupe s'intéresse surtout aux propriétés de transport, comme par exemple la décohérence quantique, la supraconductivité et les fluctuations.

Ces thèmes ne sont pas traités séparément, et c'est surtout au croisement des thèmes que la physique devient intéressante. Ainsi on ne peut pas mettre le sujet de mon stage dans une seule catégorie. Le modèle étudié a été inventé pour expliquer le magnétisme, donc ceci correspond bien au premier thème. Or parmi les outils que j'ai utilisés, comme la théorie semiclassique, sont des méthodes utilisées pour le traitement des autres deux thèmes.

En ce moment, le laboratoire comprend dix employés scientifiques, un post-doc, un diplomand et cinq thésards. Pendant mon stage, il y avait trois autres stagiaires, dont deux du Master 1 de Physique. Le laboratoire se trouve sur le site du CNRS au polygone scientifique dans la Maison des Magistères[1].

2 Le modèle analysé

Le modèle d'Ising dans un champ transverse est un modèle relativement simple qui présente une transition de phase près d'un champ critique. On regarde une chaîne linéaire de N spins $1/2$ (figure 1). L'espace de Hilbert du problème est donc de dimension 2^N , et une base est donnée par exemple par les états $|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle_z$, où $\sigma_i \in \{+1, -1\}$ donne la composante z du spin numéro i . Une autre base est donnée par les états analogues $|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle_x$.

Le Hamiltonien examiné est :

$$\hat{H} = -J\hat{H}_{Ising} - (1-J)\hat{H}_{champ} \quad (1)$$

$$= -J \sum_i \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x - (1-J) \sum_i \hat{\sigma}_i^z \quad (2)$$

$$= -J \sum_i 4\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x - (1-J) \sum_i 2\hat{S}_i^z \quad (3)$$

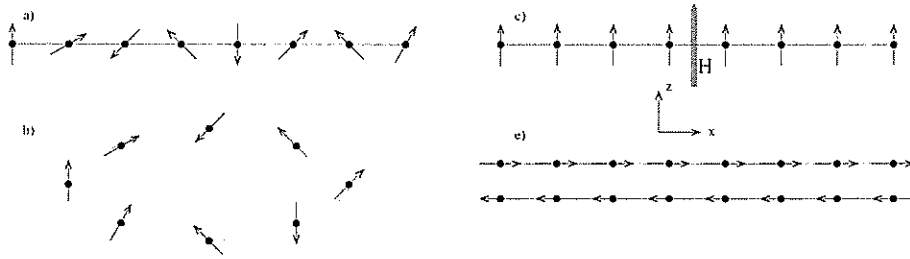


FIG. 1 – schéma du modèle analysé : a) avec les conditions aux bornes libres b) avec les conditions aux bornes périodiques c) l'état fondamental si le champs est fort ($J = 0$) d) les deux états fondamentaux si l'interaction d'Ising domine ($J = 1$)

Ici, \hat{S}_i^c dénote l'opérateur de la composante c du spin du spin situé à la place i . $\hat{\sigma}_i^c = 2\hat{S}_i^c$ dénote la matrice de Pauli correspondante agissant sur ce même spin.

Pour un système de taille fini il reste encore à préciser les conditions aux bornes. Les conditions les plus naturelles seraient les conditions aux bornes libres. Ceci veut dire, que l'indice i dans le terme \hat{H}_{Ising} va de 1 à $N - 1$ (l'indice i du deuxième terme \hat{H}_{champ} va toujours de 1 à N). Une autre possibilité est donnée par les conditions aux limites périodiques, c'est à dire on identifie le spin 1 avec le spin $N + 1$. Dans ce cas-là, l'indice i de la première somme va de 1 à N . Ceci est une astuce bien connue dans la physique de la matière condensée : Elle permet de rendre le système symétrique par translation sans passant à un système de taille infinie.

Dans la suite, j'utiliserai surtout les conditions aux limites périodiques à cause de cette symétrie supplémentaire¹.

Avec cette paramétrisation, le point critique se trouve à $J = \frac{1}{2}$ (ceci est expliqué en plus de détails dans 4.1). Loin du point critique, le spectre consiste en différentes bandes avec un certain nombre d'états. Pour chaque phase, cette structure s'interprète en termes de quasi-particules. Dans la phase d'Ising (ferromagnétique), où le champ est petit, ce sont des parois de domaines. Dans la phase paramagnétique (champ élevé) ce sont des ondes de spin. J'étudierai cette interprétation en plus en détail dans la section 5.

3 L'intérêt du modèle et le but du stage

Les chaînes de spin unidimensionnelles sont souvent utilisées pour modéliser la propagation d'ondes de spin dans des matériaux magnétiques. Bien que le cas $S = 1/2$ est relativement spécial, il y a des matériaux qu'on peut décrire avec un tel modèle (par exemple les matériau LiHoF_4 [2, section 1.3 et références] et CsCoCl_3 [3]).

Pour analyser les ondes de spin, beaucoup d'articles cherchent et étudient des solution particulières dans ces modèles appelées «solitons». Ce sont des solutions bien localisées qui se propagent dans la chaîne de spins. A l'origine le nom «solitons» se réfère à des solutions d'équations différentielles partielles, qu'on peut obtenir par exemple si on regarde un modèle classique, mais on peut aussi trouver des analogues dans la version quantique des modèles[4].

Dans mon travail, le but est un peu plus général :

¹En plus le changement dans la structure en bandes du spectre si J traverse le point critique est plus grand : Pour $J \rightarrow 0$ on a toujours $N + 1$ bandes, et pour $J \rightarrow 1$ on a $[N/2] + 1$ bandes dans le cas périodique et $N + 1$ bandes dans le cas non-périodique (voir 4).

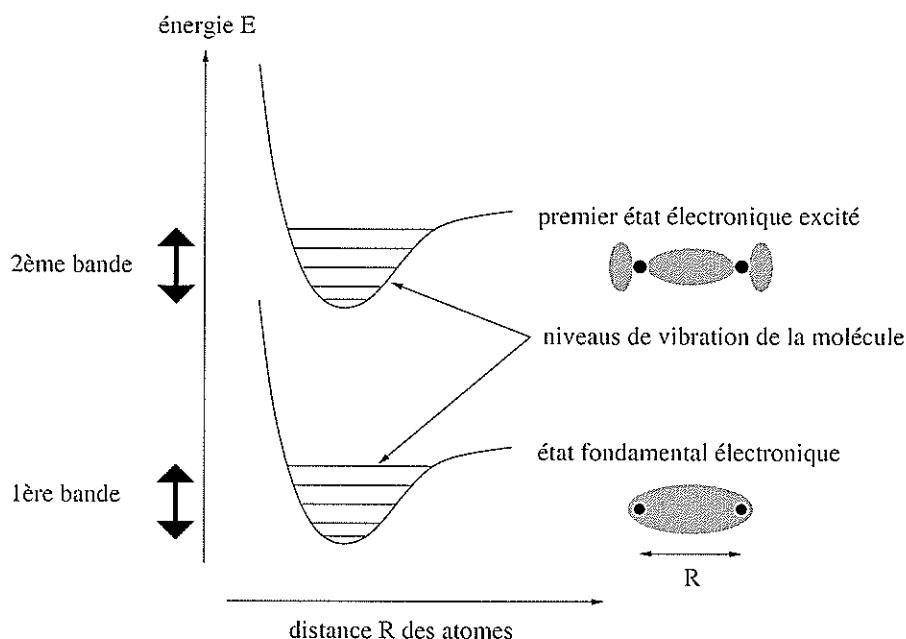


FIG. 2 – Un schéma expliquant l'approximation de Born-Oppenheimer à l'aide d'une molécule diatomique fictive : Pour chaque distance R des deux atomes fixés, les deux premiers états électroniques ont les orbitales indiquées. L'énergie de ces orbitales varie avec R : Les orbitales peuvent former une liaison, mais si R est trop petite, les électrons négatives et les noyaux positives se repoussent. Dans le potentiel résultant, la molécule vibre.

Numériquement on observe que le spectre du modèle est organisé en bandes (voir figure 3). Près du point critique $J = 1/2$ (voir 4.1) les niveaux sont redistribués et la structure en bandes change de façon fondamentale.

Un autre domaine physique où le spectre s'organise en bandes est la physique moléculaire. Ici cette structure en bandes apparaît, parce qu'il y a plusieurs échelles de temps qui jouent un rôle pour la dynamique du système. Le mouvement des noyaux (temps caractéristique $\tau_n \approx 10^{-14} \dots 10^{-15} s$) est plus lent que celui des électrons autour d'eux (temps caractéristique $\tau_e \approx 10^{-15} \dots 10^{-16} s$). En plus, le mouvement rotative des molécules (temps caractéristique $\tau_m \approx 10^{-10} \dots 10^{-12} s$) est beaucoup plus lent que le mouvement vibratoire des noyaux autour de leurs positions d'équilibre.

Les petites différences d'énergie dans les bandes correspondent à la dynamique lente, tandis que les différences d'énergie entre les bandes correspondent à la dynamique rapide (en concordance avec la relation d'incertitude de Heisenberg $\Delta E \Delta t \geq h/2$).

Pour résoudre un tel problème, on peut utiliser l'approximation de Born-Oppenheimer et séparer les degrés de liberté rapides et lents (figure 2). Pour une configuration fixe des degrés de liberté lents, on résout le problème quantique exactement. Par exemple, en physique moléculaire, on regarde les électrons qui se déplacent dans le potentiel donné par une configuration fixe des noyaux. En prenant l'énergie fondamentale de chaque configuration on obtient un potentiel qui dépend des degrés de liberté lents. Selon l'application, on peut maintenant regarder le mouvement classique du système dans ce potentiel. Ou bien on résout le problème quantique des degrés de liberté lents dans ce potentiel. En remplaçant l'énergie fondamentale par des énergies plus élevées, on peut analyser les bandes excitées.

Pour l'approximation Born-Oppenheimer, Frédéric Faure a trouvé qu'il y a un rapport entre le nombre d'états dans une bande et la topologie de l'espace d'états sémiclassique qui est l'espace produit de l'espace de phase classique pour les degrés de liberté lents et l'espace Hilbert des états quantiques des degrés de liberté rapides. En particulier, si on regarde des problèmes dépendant d'un paramètre, un changement dans la structure des bandes correspond à une transition topologique[6, 7]. L'avantage d'une telle description topologique est, qu'elle est très robuste envers des perturbations.

Dans le cas du modèle que j'étudie, l'affaire est plus compliqué : On a un problème de mécanique quantique dépendant d'un paramètre avec un spectre qui s'organise en bandes. Cette structure dépend du paramètre et change autour d'un point critique. Les questions sont :

1. Est-ce qu'il est possible de séparer une dynamique lente et une dynamique rapide ?
2. Est-ce qu'il est possible d'expliquer la réorganisation du spectre avec une description topologique du système ?

Malheureusement le temps de trois mois était insuffisant pour commencer à aboutir ces questions directement. Le travail de mon stage était donc d'analyser le modèle de différentes côtés et de comprendre le mieux possible les différentes propriétés du spectre. Le but était de trouver un sous-espace petit (c'est à dire de dimension polynomiale en N) qui décrit bien une partie du spectre à travers le point critique.

Dans la section 5 j'explore une interprétation du spectre en termes de particules : Chaque bande correspond à un nombre fixe de particules, et les niveaux dans la bande correspondent à la dynamique lente des particules. Loin du point critique pour les cas $J \rightarrow 0$ et $J \rightarrow 1$, cette interprétation est très naturelle. Par contre la nature des particules pour ces deux cas diffère. Le but de cette section est d'analyser ces particules et de voir ce qui se passe si on traverse le point critique.

Dans la section 6 je regarde certains sous-espaces de l'espace de Hilbert total. J'analyse comment se comporte le spectre de la restriction du Hamiltonien à ce sous-espace par rapport au spectre exacte si on change J .

Dans la section 7 j'étudie la quasi-dégénérescence de l'état fondamental pour $J > 1/2$. L'écart ΔE des deux niveaux les plus basses peut être interprété en termes d'un effet tunnel entre deux minima d'énergie dans un espace de phase classique.

Pour analyser les méthodes différents j'ai écrit un programme qui trace et compare les spectres.

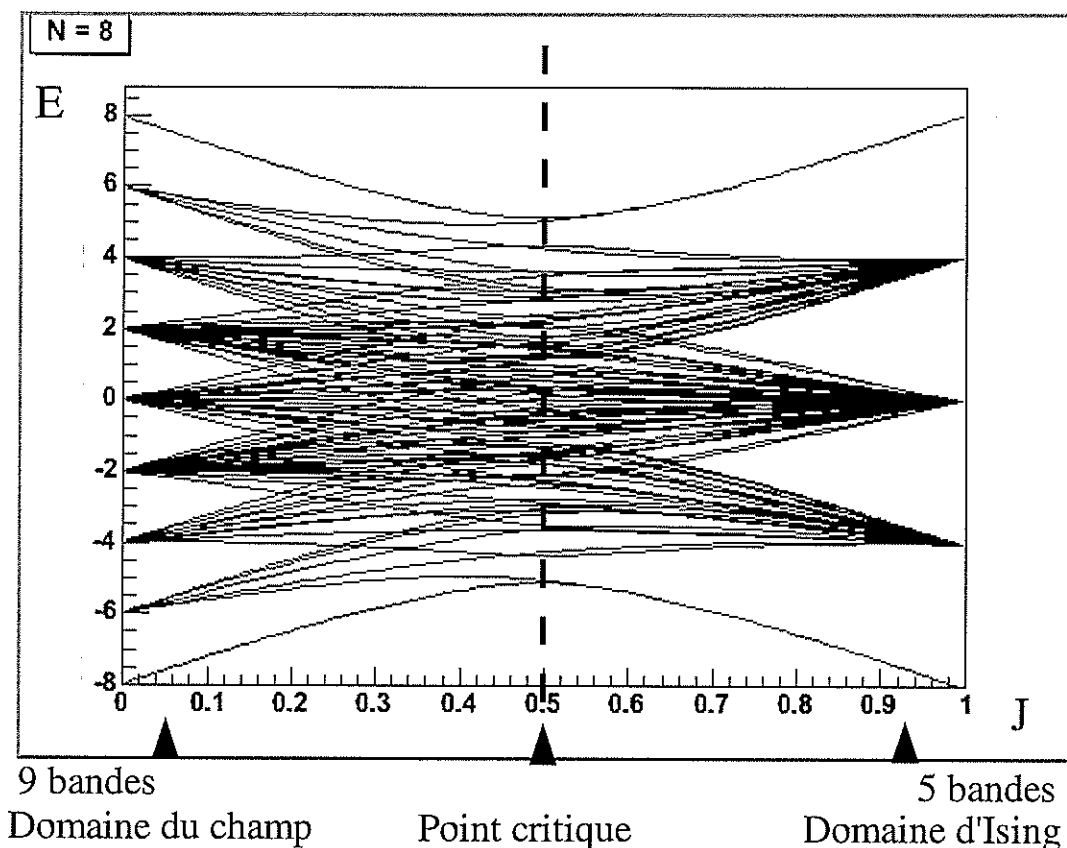


FIG. 3 – Le spectre en fonction du paramètre J pour $N = 8$ (cas périodique).

Deuxième partie

Les résultats du travail

4 Propriétés générales du spectre

Dans la figure 3 il y a le spectre en fonction du paramètre J pour $N = 8$ tracé par mon programme pour le cas périodique. Les figure 23 et 24 donnent des spectres supplémentaires pour des N différentes.

Pour $J = 0$ et $J = 1$, le spectre est facile à calculer : Pour $J = 0$ les valeurs propres sont $-N, -N + 2, \dots, N - 2, N$, donc $2k - N$ avec une dégénérescence de C_N^k : Les états propres sont les états avec tous les spins parallèles ou antiparallèles au champ. k est le nombre de spins antiparallèles et peut être interprété comme nombre d'excitations ou de «particules» (voir 5.1). La dégénérescence est donc égale au nombre de possibilités de positionner k particules sur N sites.

Pour $J = 1$, les valeurs propres sont $-N, -N + 4, \dots, N - 4, N$ si N est paire (et $-N, -N + 4, \dots, N - 6, N - 2$ si N est impaire), donc $4k - N$ avec une dégénérescence de $2C_{N/2}^k$ avec k paire : Les états propres sont les états avec tous les spins orientés dans la direction $+x$ ou $-x$. k est le nombre de parois de domaines, et la dégénérescence est donnée par le nombre de possibilités de positionner k parois de domaines sur N sites, fois deux pour les deux orientations possibles des

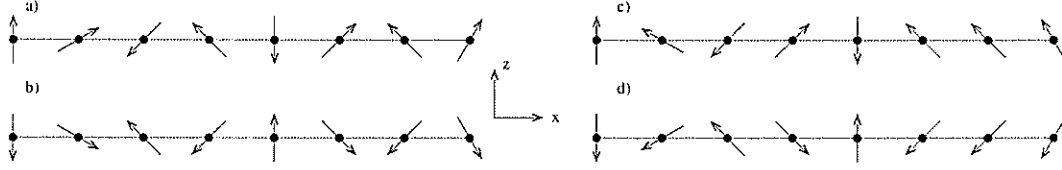


FIG. 4 – Ce schéma explique la symétrie du Hamiltonien : Soit a) un état propre du Hamiltonien avec énergie E . Dans l'état b) tous les états sont réfléchis au plan xy : ceci change le signe du terme \hat{H}_{champ} . Dans l'état c) un état sur deux est réfléchis au plan yz : ceci change le signe du terme \hat{H}_{Ising} . d) est encore un état propre du Hamiltonien avec énergie $-E$. Par contre, les états b) et c) ne sont pas nécessairement des états propres.

domaines.

Pour $J \ll 1/2$, il y a donc $N + 1$ bandes, et pour $J \gg 1/2$, il y a $[N/2] + 1$ bandes.

Pour N paire le spectre est symétrique par rapport à l'axe J . Ceci est dû à la symétrie suivante du Hamiltonien (voir figure 4) : Pour chaque état propre du Hamiltonien d'énergie E , on peut créer un état d'énergie $-E$, si on multiplie la composante z de chaque spin par -1 (ceci donne un signe -1 dans le terme \hat{H}_{champ}) et si on multiplie la composante x d'un spin sur deux par -1 (ceci donne un signe -1 dans le terme \hat{H}_{Ising}). Par contre, si on fait seulement une des deux opérations de symétrie (correspondant aux états b) et c) dans la figure 4), en général on n'obtient pas un état propre (voir annexe A.1).

Pour $J \rightarrow 1$, l'état fondamental est dégénéré. Le point où la dégénérescence se lève visiblement converge vers le point critique $J = 1/2$ pour $N \rightarrow \infty$ (voir section suivante)).

4.1 Le point critique

D'habitude on parle d'un point critique dans un système thermodynamique ou quantique dépendant d'un certain paramètre extérieur J , s'il y a des observables physiques qui ne sont pas analytiques par rapport à J dans le voisinage du point critique (qui ont donc une discontinuité ou une discontinuité dans une dérivée). Par exemple, dans les transitions de phase «classiques» entre un liquide et un gaz, lorsqu'on traverse la température critique, le volume et l'énergie interne augmentent de façon non-continue.

Un autre exemple sont les systèmes ferromagnétiques, où la susceptibilité n'est pas dérivable près de la température critique.

Normalement ces transitions de phases ne se passent que dans la limite $N \rightarrow \infty$ des très grands nombres de degrés de liberté : Si on a un problème physique avec un nombre fini de degrés de liberté qui dépend de façon continue d'un certain paramètre, on s'attend que la solution dépend aussi de façon continue de ce paramètre. C'est seulement dans la limite $N \rightarrow \infty$ que les expressions obtenues montrent des points critiques.

Dans le modèle d'Ising dans un champ transverse, une observable physique qui change de façon non-analytique est la fonction de corrélation des composantes x des spins entre deux sites i et j pour l'état fondamental $|0\rangle$, qui est défini comme $\langle 0 | \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_j^x | 0 \rangle$. On imagine facilement que cette fonction est importante dans la limite d'Ising lorsque $J \rightarrow 1$ et qu'elle est négligeable pour $J \rightarrow 0$. Un argument pourquoi elle a un point critique est donné dans [2, section 1.4.1], et le point critique est calculé dans [2, section 4.3].

Dans la suite, tous les résultats seront obtenus pour le cas où N est fini (en général $N \leq 10$ pour des raisons numériques), donc il n'y aura pas un vrai point critique. Par exemple, si N est

fini, il n'y a jamais une vraie dégénérescence du niveau fondamental pour $J \neq 1$. Quand même pour N assez grande ($N \geq 8$) on peut parler d'une quasi-dégénérescence pour $J > 1/2$. Donc on attend de voir quand même quelques conséquences de la présence du point critique dans la limite $N \rightarrow \infty$.

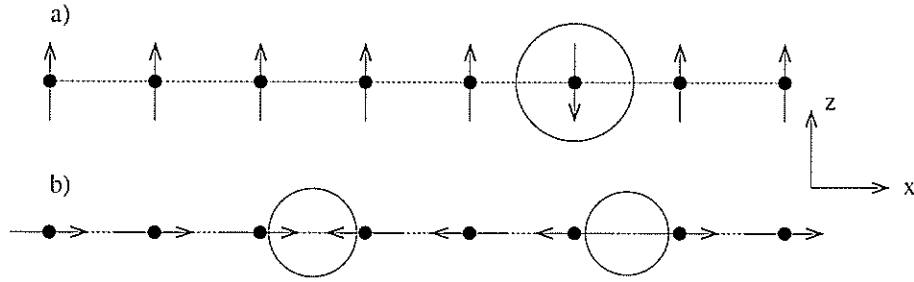


FIG. 5 – Deux possibilités différentes pour interpréter le système en termes de particules :
a) une particule de type «onde de spin»,
b) deux particules de type «parois de domaine» qui peuvent être interprétées comme une paire d'une «particule» (deux pointes) et d'une «antiparticule» (deux pieds).

5 L'interprétation en termes de quasi-particules

Dans la physique des solides, on essaie souvent de décrire un spectre en termes de quasi-particules qu'on appelle excitations élémentaires. Dans le modèle étudié ici, si on regarde les cas extrêmes $J = 0$ ou $J = 1$, une interprétation du spectre en termes de quasi-particules semble très naturelle : Dans le cas $J = 0$, l'état vide serait l'état avec tous les spins orientés dans la direction du champ magnétique, et les excitations (particules) sont des spins renversés (fig. 5a). Dans le cas $J = 1$, les particules sont les parois de domaines. Ici, il y a deux états fondamentaux, et seulement les états avec un nombre paire de particules sont possibles dans les cas périodique (fig. 5b).

Dans les deux cas, l'énergie est proportionnelle au nombre de particules, parce que les particules sont indépendantes. Par contre, si on change J et si on garde les mêmes particules, les particules ne constituent plus des états stationnaires, et le vide n'est plus l'état fondamental. En plus, il y a une interaction entre les particules.

On peut comparer cette interprétation avec les théories quantiques des champs, par exemple l'électrodynamique quantique : Dans cette théorie, on décrit le système en termes de particules chargées (par exemple l'électron e^- et le positron e^+) et photons γ . Or les particules et les photons ne sont pas indépendants.

Si on a un état de plusieurs particules, on peut poser la question, si les particules sont des fermions, parce qu'on ne peut pas avoir deux particules sur le même site, ou si elles sont des bosons avec une interaction répulsive à cœur dur. En effet, les deux descriptions sont possibles. Dans le cas des bosons, il faut réécrire le Hamiltonien dans une forme qui satisfait la condition suivante : Si on commence avec un état permis (c'est à dire il n'y a pas plus qu'une particule sur chaque site), l'évolution de cet état n'amènera pas à un état interdit.

5.1 Les états à une onde de spin

Pour $J = 0$, on peut décrire le spectre en termes de particules indépendantes : L'état vide $| \rangle$ est l'état avec tous les spins dans la direction $+z$ du champ, et chaque spin tourné dans la direction $-z$ sera interprété comme particule (fig. 5a).

Pour $J > 0$, ces particules ne sont plus indépendantes, et en plus le nombre de particules $\hat{N} = \sum_i (1/2 + \hat{S}_i^z)$ n'est plus une bonne nombre quantique. L'effet du terme \hat{H}_{Ising} est de détruire ou de créer une paire de particules voisines ou de bouger une particule d'un site. Mais si J reste petite, on attend que \hat{N} ne varie que très lentement. On peut donc regarder la restriction du

Hamiltonien à l'espace des états à une particule et regarder la dynamique qui ne prend en compte que les termes qui bougent la particule.

En effet, ceci est équivalent à la théorie de perturbations de première ordre pour le cas dégénéré, parce que l'espace propre de la première valeur d'énergie excitée pour $J = 0$ est identique à l'espace des états à une particule.

Je définis $|j\rangle$ comme l'état à une particule qui se trouve au site j . Avec cette notation, la restriction du Hamiltonien s'écrit comme

$$\begin{aligned}\hat{H}_{res} &= -J \sum_i |i\rangle (\langle i-1| + \langle i+1|) - (1-J)(N-2) \\ &= -J(\hat{T}_{+1} + \hat{T}_{-1}) - (1-J)(N-2),\end{aligned}\quad (4)$$

où l'opérateur \hat{T}_l est l'opérateur de translation par l sites (voir annexe B.1).

Dans la mécanique quantique d'une particule dans l'espace réel, on sait que le générateur des translations est l'opérateur d'impulsion. De même, il est possible de définir ici un opérateur d'impulsion \hat{p} qui satisfait $\hat{T}_l = \exp(\frac{i\hat{p}l}{\hbar})$ (voir annexe B.2). Avec cet opérateur d'impulsion, on peut réécrire 4 comme

$$\hat{H}_{res} = -J2 \cos(\frac{\hat{p}}{\hbar}) - (1-J)(N-2) \quad (5)$$

Les états propres de ce Hamiltonien sont les états propres de l'opérateur d'impulsion, c'est à dire les ondes planes

$$|k\rangle_p = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikj} |j\rangle$$

avec $k = \frac{2\pi\kappa}{N}$ et $\kappa = 1, 2, \dots, N$.

Dans la figure 6 on voit le spectre exact avec les résultats de cette section pour $N = 6$. Les solutions trouvées ici sont vraiment des tangents au spectre exact, et on voit leur domaine de validité : Pour $J < 1/4$, l'approximation est bien, mais pour $J > 1/2$ les valeurs trouvées croisent même une région où il n'y a pas de valeurs propres en vérité.

Le sous-espace de Hilbert analysé ici s'appelle aussi «espace du tore». Ceci vient du fait, que tous les fonctions d'ondes sont périodique dans l'espace réel, mais aussi dans l'espace réciproque, c'est à dire dans la représentation d'impulsion (voir aussi l'annexe B.2) : Si on permet à κ de adopter comme valeur tous les nombres naturels, les états $|k\rangle$ deviennent périodiques en κ avec période N .

En analogie avec la mécanique quantique d'une particule dans l'espace réel, si N est assez grande, on peut maintenant créer des paquets d'onde qui sont localisé dans l'espace réel et dans l'espace des impulsions. Pour trouver la vitesse de groupe d'un paquet d'ondes, on calcule

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\partial E}{\hbar \partial k} = 2J/\hbar \sin(k).$$

Si k est petite, on a $v_g \approx 2Jk/\hbar$. Cette relation est semblable à la relation de dispersion d'un phonon dans un cristal : Pour k petite, l'excitation se comporte comme une particule, mais pour k grande il y a des déviations parce que le réseau est discret.

Dans la limite où N tend vers l'infini et où le paquet d'onde devient de plus en plus localisé (relative à la taille totale du système, mais pas forcément relative à la distance entre deux spins), on peut aussi définir une dynamique hamiltonienne sur le tore. La fonction de Hamilton correspondante à (5) est donné par

$$H(x, p) = -J2 \cos(\frac{p}{\hbar}) - (1-J)(N-2)$$

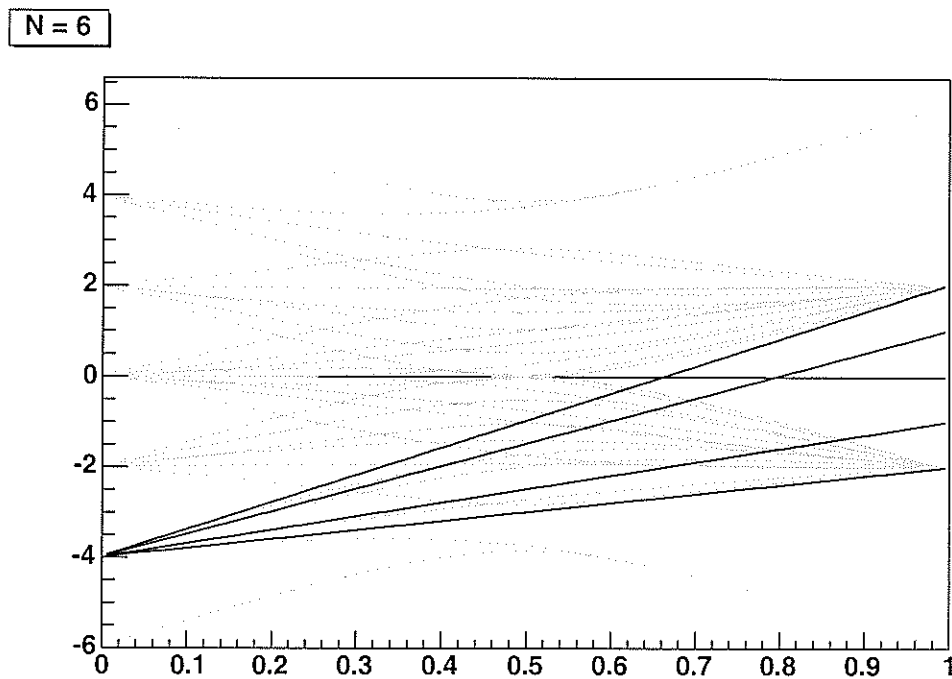


FIG. 6 – Le spectre en fonction de J pour $N = 6$ avec le spectre de la restriction du Hamiltonien à l'espace d'une seule onde de spin (le spectre exacte est tracé en gris)

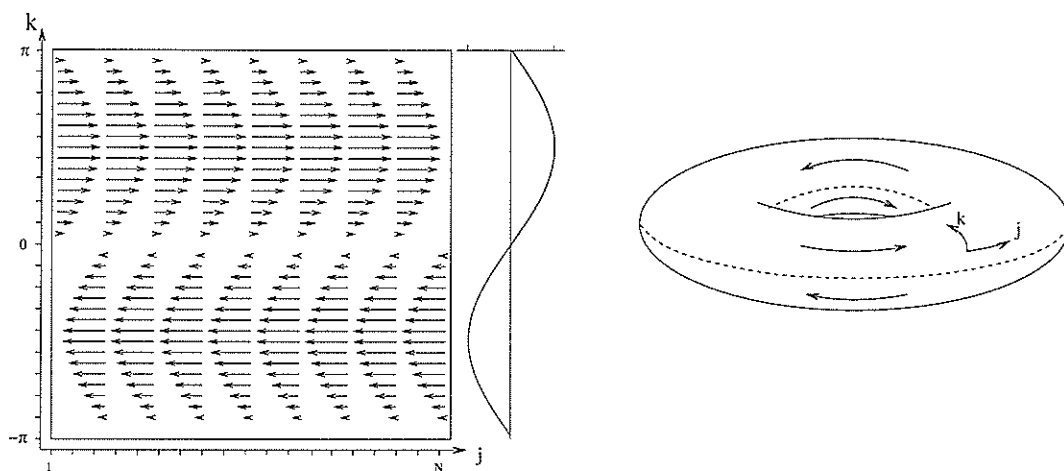


FIG. 7 – Le tore comme espace de phase classique avec le champ vectoriel qui donne la dynamique induite par le Hamiltonien. Les lignes en traits sur le tore donnent les endroits de vitesse 0, c'est à dire les points fixes.

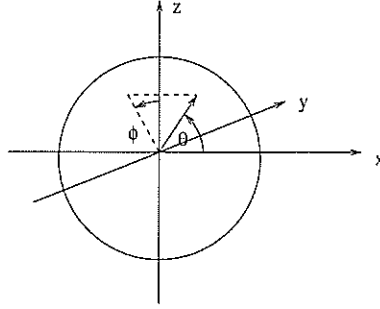


FIG. 8 – Les coordonnées sphériques utilisées.

Une visualisation de l'espace de phase classique se trouve dans la figure 7.

On peut se demander ce qui se passe, si on change la direction de quantification, c'est à dire, si on tourne l'axe qui définit ce qui est une particule.

Dans la suite j'utilise un système de coordonnées sphériques Θ et φ où Θ donne l'angle avec l'axe x , et la direction $+z$ du champ se trouve à $\Theta = \pi/2, \varphi = 0$ (figure 8). Si Θ_0 et φ_0 donnent une direction, je dénote avec $|j\rangle_{\Theta_0, \varphi_0}$ un état, où tous les spins sont orientés dans cette direction, sauf le spin j qui est orienté dans la direction $\Theta_1 := \pi - \Theta_0$ et $\varphi_1 := \pi + \varphi_0$.

Dans le sous-espace engendré par ces états, la restriction du Hamiltonien s'écrit

$$\begin{aligned} \hat{H}_{res} = & -J(N-4)\cos^2(\Theta_0) - (1-J)(N-2)\sin(\Theta_0)\cos(\varphi_0) \\ & -J\sin^2(\Theta_0)2\cos\left(\frac{\hat{p}}{\hbar}\right), \end{aligned} \quad (6)$$

qui est une généralisation du Hamiltonien (5).

Les termes dans la première ligne sont bien compréhensibles à cause de la direction des spins. Le terme dans la deuxième ligne est un terme cinétique. On voit, qu'on a toujours une dépendance proportionnelle au cosinus de l'impulsion, mais le préfacteur dépend du choix de la direction. Si la direction est, par exemple, parallèle à l'axe x (donc parallèle à l'interaction d'Ising), la dynamique disparaît. En effet, ce n'est pas difficile à voir que, dans ce cas-là, il n'y a pas de terme dans le Hamiltonien qui bouge les particules en conservant leur nombre. La restriction est donc constante.

Maintenant on pourrait se demander quelle est la direction «idéale» pour cette description. Un critère possible pourrait être par un calcul variationnel : Le calcul variationnel sert avant tout à trouver l'état fondamental d'un système. Une famille de test naturelle pour l'état fondamental dans le cadre des particules serait la famille d'états $|\Theta_0, \varphi_0\rangle$ avec tous les spins parallèles dans une direction Θ_0, φ_0 . Je parlerai en plus de détails de ce calcul dans la section 6.2. La solution est donnée par

$$\begin{aligned} \sin(\Theta_0(J)) &= \begin{cases} 1, & J \leq 1/3 \\ \frac{1-J}{2J}, & J \geq 1/3 \text{ (deux solutions équivalentes)} \end{cases} \\ \varphi_0(J) &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

En particulier, pour $J = 0$ on a la direction $+z$ du champ, et pour $J = 1$ on a la direction $\pm x$ de l'interaction d'Ising. Si on prend ces angles et si on les met dans le Hamiltonien (6), on obtient le spectre de la figure 9.

Même si le résultat est déjà mieux que dans la figure 6, on voit, qu'une description en termes de ondes de spin ne fait plus de sens pour J trop grand. Au moins, si on adapte Θ_0 et φ_0 à J , les

N = 6

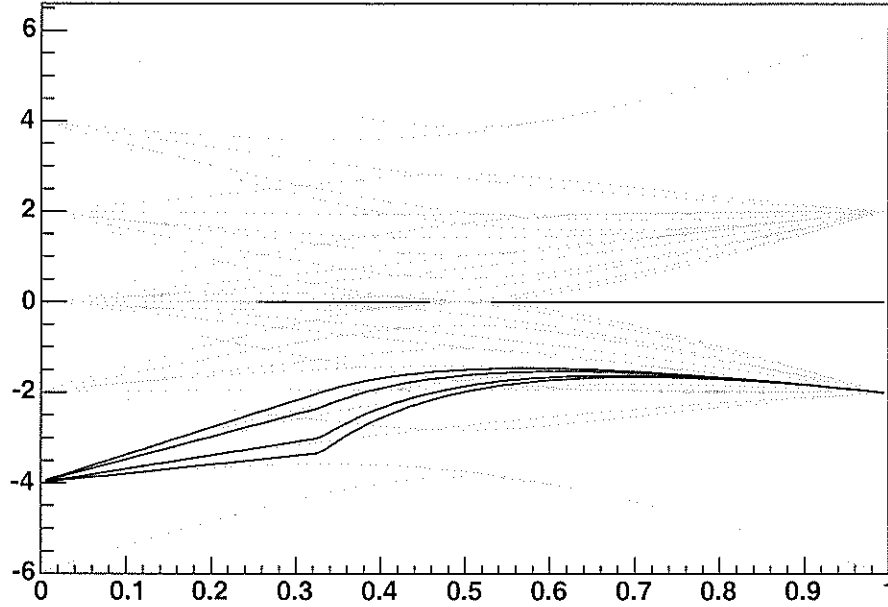


FIG. 9 – Le même que figure 6, mais avec une définition de la particule qui dépend de J .

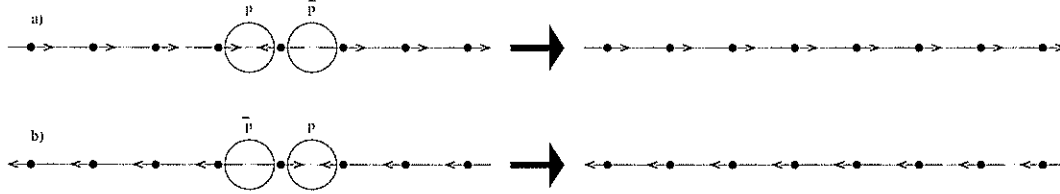


FIG. 10 – La collision d'une particule de type parois avec son antiparticule peut mener à deux états différents selon l'orientation initiale.

valeurs propres se trouvent toujours proche du spectre exacte, et elles restent dans la première bande pour toute J . Par contre l'approche ne décrit pas toute la première bande sur la côté d'Ising, mais les valeurs propres approchées restent au milieu de la bande exacte.

5.2 Les états à une paire de parois de domaines

Les particules définies dans la section précédente sont particulièrement adaptées à décrire la première bande pour J petite. On peut maintenant essayer de faire une analyse pareille pour J assez proche de 1. Ici les particules sont des parois de domaines (voir figure 5b).

La caractéristique du problème périodique est, qu'il n'y a que des états avec un nombre pair de particules. La première bande excitée correspond donc à deux particules. Mais en effet, ces deux particules ne sont pas indiscernables : Il y un parois, où l'orientation change de $+x$ à $-x$, et il y a un parois, où l'orientation change de $-x$ à $+x$. On peut interpréter cela comme une paire d'une particule et d'une antiparticule (voir figure 5b).

Si la particule et son antiparticule arrivent au même endroit, elles se détruisent, et on arrive

N = 6

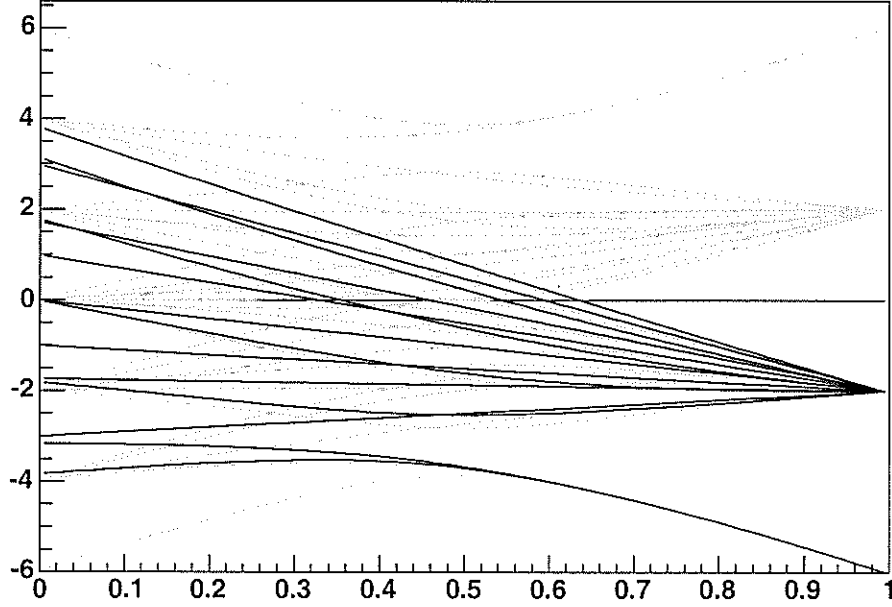


FIG. 11 – Les valeurs propres dans le sous-espace des états à une paire de parois de domaines pour $N = 6$.

à un état fondamental. Mais il faut faire attention, dans quel état on arrive (figure 10).

Les éléments de matrice du Hamiltonien dans ce sous-espace se calculent assez facilement. Le résultat pour $N = 6$ se trouve dans la figure 11.

On voit que la description en termes de n n'est plus valable si J est trop petite. Pour $J > 1/2$, au moins la structure grossière en bandes est reconstruite.

Pour continuer on pourrait ici aussi essayer de varier la direction qui définit la particule et essayer de trouver la direction optimale. Ceci n'a pas été fait.

5.3 Les spins comme fermions

Je prend l'image des particules du cas $J = 0$, c'est à dire l'état vide $| \rangle$ est l'état avec tous les spins dans la direction $+z$ du champ (figure 5a). Les opérateurs $\hat{S}_i^+ := \hat{S}_i^x + i\hat{S}_i^y$ et $\hat{S}_i^- := \hat{S}_i^x - i\hat{S}_i^y$ sont des opérateurs qui créent ou détruisent des particules. Le problème avec ces opérateurs est, qu'ils ne satisfont ni les règles de commutation des opérateurs de bosons ni les règles de anticommutation des opérateurs de fermions. On a :

$$\begin{aligned} [\hat{S}_i^+, \hat{S}_j^+] &= 0 \quad \text{pour tous } i, j \\ [\hat{S}_i^-, \hat{S}_j^-] &= 0 \quad \text{pour tous } i, j \\ [\hat{S}_i^+, \hat{S}_j^-] &= 0 \quad \text{pour tous } i \neq j \\ \{\hat{S}_i^+, \hat{S}_i^-\} &= 1 \quad \text{pour tous } i \end{aligned}$$

Le problème avec cette algèbre d'opérateurs mixte est qu'elle ne se transforme pas d'une manière simple lorsqu'on change la base.

Une solution possible consiste en remplaçant les opérateurs \hat{S}_i^+ et \hat{S}_i^- par les opérateurs

$$\begin{aligned}\hat{c}_i^\dagger &= \hat{S}_i^+ e^{i\pi\hat{N}_i} \\ \hat{c}_i &= e^{i\pi\hat{N}_i} \hat{S}_i^- \\ \text{où } \hat{N}_i &= \sum_{j<i} \hat{S}_j^+ \hat{S}_j^-\end{aligned}\tag{8}$$

Le «facteur de signe» peut s'écrire aussi dans la forme

$$e^{i\pi\hat{N}_i} = e^{-i\pi\hat{N}_i} = (-1)^{\hat{N}_i} = \prod_{j<i} (1 - 2\hat{S}_j^+ \hat{S}_j^-)$$

(ceci se vérifie facilement à l'aide de la base des états $|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle_z$ mentionnée dans la section 2).

La transformation (8) s'appelle transformation de Jordan et Wigner. L'origine de ce nom est l'article «Über das Paulische Äquivalenzverbot» de Pascuale Jordan et Eugène Wigner de l'année 1928 qui est cité dans beaucoup d'articles sur les chaînes de spins 1/2[8]. C'est intéressant à noter que le mot «spin» n'apparaît aucune fois dans cet article. L'article donne plutôt pour la première fois la Seconde Quantification pour les fermions.

En effet, la transformation (8) n'est rien d'autre qu'une forme de la Seconde Quantification. Donc ce n'est pas difficile à voir qu'elle mène aux relations d'anticommutation qu'on cherche.

La transformation inverse de (8) est donnée par

$$\begin{aligned}\hat{S}_i^+ &= \hat{c}_i^\dagger e^{i\pi\hat{N}_i} \\ \hat{S}_i^- &= e^{i\pi\hat{N}_i} \hat{c}_i\end{aligned}\tag{9}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}_i^z &= 1/2 - \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \\ \text{avec } \hat{N}_i &= \sum_{j<i} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j\end{aligned}\tag{10}$$

C'est l'équation pour \hat{S}_i^z qui donne l'interprétation des quasi-particules.

En principe cette transformation est toujours possible lorsqu'on regarde un système de spins 1/2. Il faut seulement définir un ordre des spins. Quand même cette transformation est particulièrement appropriée pour des problèmes en une dimension avec une interaction seulement entre les prochains voisins, parce que, dans ce cas, il y a un ordre naturel des spins : On trouve $\hat{S}_i^\pm \hat{S}_{i+1}^\pm = \hat{c}_i^{(\dagger)} \hat{c}_{i+1}^{(\dagger)}$ pour $1 \leq i < N$. Avec une interaction entre spins plus éloigné on aurait des «facteurs de signe» en plus. La périodicité pose des problèmes semblables, parce qu'il n'y a pas de point de départ naturel dans le cercle : On trouve $\hat{S}_N^\pm \hat{S}_1^\pm = \hat{c}_N^{(\dagger)} \hat{c}_1^{(\dagger)} (e^{-i\pi\hat{N}})$, où \hat{N} est l'opérateur qui donne le nombre total de particules. Le même problème arriverait si on passerait dans plusieurs dimensions.

Si on remplace les opérateurs, on peut écrire le Hamiltonien du système périodique sous la forme :

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -J \sum_{i=1}^N (\hat{c}_i^\dagger - \hat{c}_i)(\hat{c}_{i+1}^\dagger + \hat{c}_{i+1}) + 2(1-J) \sum_{i=1}^N \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i - N(1-J) \\ &\quad + J[(\hat{c}_N^\dagger - \hat{c}_N)(\hat{c}_1^\dagger + \hat{c}_1)](e^{i\pi\hat{N}} + 1)\end{aligned}$$

Le Hamiltonien du problème non-périodique est donné par :

$$\hat{H} = -J \sum_{i=1}^{N-1} (\hat{c}_i^\dagger - \hat{c}_i)(\hat{c}_{i+1}^\dagger + \hat{c}_{i+1}) + 2(1-J) \sum_{i=1}^N \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i - N(1-J)$$

Dans le cas non-périodique, on a donc un Hamiltonien quadratique dans les opérateurs de création et d'annihilation de fermions. Un tel Hamiltonien a l'avantage suivante : Il existe une transformation dite canonique pour l'écrire dans la forme $\hat{H} = E_0 + \sum_i \epsilon_i \hat{d}_i^\dagger \hat{d}_i$ avec des nombres réels E_0, ϵ_i et des opérateurs \hat{d}_i^\dagger et \hat{d}_i qui satisfont les relations d'anticommutation canoniques des opérateurs de fermions ([9, annexe A]). On peut donc décrire le spectre en termes de quasi-particules. Ceci est fait dans l'article [5] dans une forme légèrement différente.

Par contre, le problème périodique est plus difficile à résoudre. Si on ignore le dernier terme, qui n'est pas quadratique, le Hamiltonien qui reste est encore quadratique. En plus il est périodique, donc invariant par translation. On peut le réécrire sous la forme

$$\hat{H} = - \sum_k \epsilon_k(J) \hat{d}_k^\dagger \hat{d}_k + E_0 \quad (11)$$

avec

$$\begin{aligned} \epsilon_k(J) &= -2J \sin(k) \sin(2\Theta_k) + 2(J \cos(k) + (1 - J)) \cos(2\Theta_k) \\ E_0 &= - \sum_k J \sin(k) \sin(2\Theta_k) + 2(J \cos(k) + (1 - J)) \sin^2(\Theta_k) \\ \tan(2\Theta_k) &= - \frac{J \sin(k)}{J \cos(k) + 1 - J} \end{aligned} \quad (12)$$

La sommation sur k se fait sur tous les nombres d'onde possible, c'est à dire $k = \frac{2\pi\kappa}{N}$ avec $\kappa = 1, 2, \dots, N$.

Malheureusement cette approximation est trop grossière. En effet, le terme négligé est de l'ordre de grandeur de $2J$. Il est donc négligeable si on le compare avec l'énergie maximale du système $\pm N$, surtout dans la limite $N \rightarrow \infty$. Dans les articles qui font cette approximation [9, 10], on s'intéresse plutôt à des propriétés statistiques du système telles que l'énergie libre ou la chaleur spécifique. Pour cela, il suffit d'avoir une approximation pour la densité d'états. Mais si $J \rightarrow 1$, $2J$ dévient de l'ordre de grandeur de la différence d'énergie entre les bandes, donc ce n'est plus possible de bien décrire la structure en bandes avec cette approximation.

Dans la figure 12 j'ai tracé le spectre qui se déduit de 11. On voit que le spectre a des propriétés tout différentes du spectre exacte. La structure en bandes n'est pas du tout juste, et la dégénérescence de l'état fondamental pour $J \rightarrow 1$ n'est pas reproduit. En plus le spectre est symétrique par rapport au point critique (comme on peut aussi vérifier facilement avec les formules 12).

Mais en effet c'est possible de réparer l'approximation :

Avec des formules comme $(\hat{c}_i^\dagger - \hat{c}_i) \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i = -\hat{c}_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i (\hat{c}_i^\dagger - \hat{c}_i)$, on peut montrer que le facteur $e^{i\pi\hat{N}} = \prod_{j < i} (1 - 2\hat{S}_i^+ \hat{S}_i^-)$ commute avec le Hamiltonien. On peut donc classer les états

selon la valeur de $e^{i\pi\hat{N}}$. Mais si $e^{i\pi\hat{N}} = -1$, le Hamiltonien est identique à l'approximation. Donc une partie des états propres trouvés est vraiment exacte. Par contre, si on pose $e^{i\pi\hat{N}} = +1$, on trouve un autre Hamiltonien, qui est aussi quadratique. Donc on peut aussi le résoudre dans l'image des quasi-particules.

On peut montrer qu'il faut choisir les états selon la parité du nombre de particules. Le résultat est donc : Le spectre peut être décrit par des quasi-particules indépendantes, mais la nature et l'énergie des quasi-particules dépendent de la parité du nombre de quasi-particules.

On peut se demander d'où apparaît le terme gênant qui apparemment brise la symétrie de translation du problème. Une explication sera donnée dans la section suivante.

N = 6

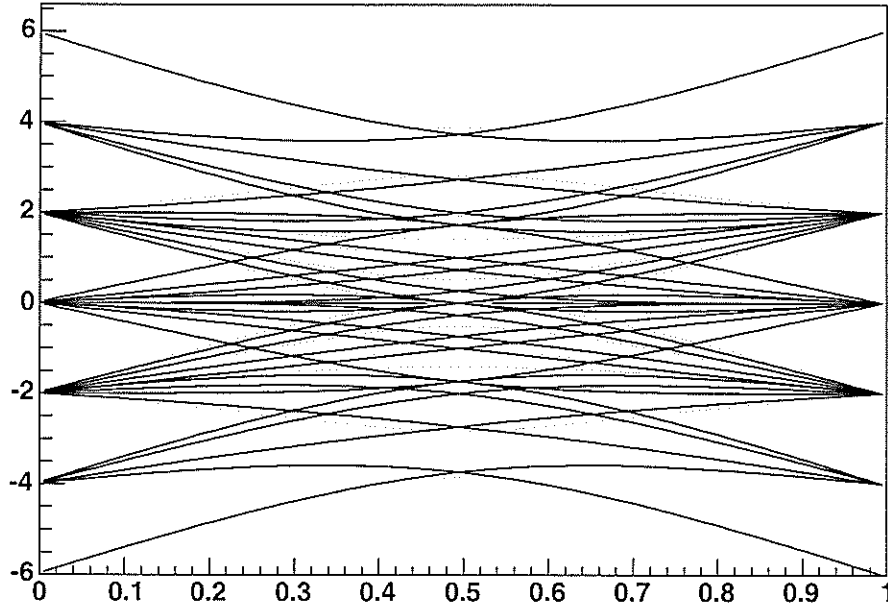


FIG. 12 – Le spectre obtenu par la méthode approchés des fermions indépendants de Lieb

5.4 La deuxième bande : fermions ou bosons ?

Dans la section précédente, j'ai montré que c'est possible de décrire le système comme un système de fermions. Maintenant je veux analyser la deuxième bande excitée pour J petite et comparer les interprétations en termes de fermions ou de bosons.

Pour commencer, je suppose que j'ai un état à une particule qui est assez bien localisé dans l'espace réel que dans l'espace des impulsions (donc un paquet d'onde comme ceux dont j'ai déjà parlé dans 5.1). En utilisant les opérateurs de translation dans l'espace réel $\hat{T}_{x=\Delta x}$ et dans l'espace réciproque $\hat{T}_{p=\Delta p}$, je peux construire une famille paramétrée par deux nombres réels x_0 et p_0 d'états $|x_0, p_0\rangle$ localisés près d'un point (x_0, p_0) dans l'espace de phase (qui est un tore, voir section 5.1). J'appellerai les états de cette famille «états cohérents du tore». Une telle famille peut - sous certaines conditions - servir pour définir la limite classique d'un problème quantique. Pour toute observable \hat{O} j'appelle $O(x_0, p_0) := \langle x_0, p_0 | \hat{O} | x_0, p_0 \rangle$ le symbole de l'opérateur. C'est possible de choisir la famille telle que les états restent localisés, si $N \rightarrow \infty$. Si on suppose que la variation de tous les observables physiques est négligeable sur l'échelle de l'extension des états, le symbole donne une bonne approximation «classique» de l'opérateur. En particulier, on peut utiliser le symbole du Hamiltonien pour définir une dynamique classique hamiltonienne sur les états cohérents.

Souvent on remplace les deux paramètres x_0 et p_0 réels par un seul paramètre complexe $z = x_0 + ip_0$. Parfois, ceci permet d'avoir une structure de variété complexe sur la famille des états cohérents, mais ici je le ferais seulement pour abrégé les notations.

Les idées que j'ai brièvement indiquées ici font partie de la théorie «sémi-classique» [13].

Maintenant que j'ai défini les états cohérents à une particule $|x_0, p_0\rangle$, je veux passer au cas de deux particules. Pour cela je note $|j_1, j_2\rangle$ avec $j_1 \neq j_2$ l'état avec deux particules (c'est à dire

deux spins renversés) sur les sites j_1 et j_2 . Je pose

$$\langle j_1, j_2 | z_1, z_2 \rangle = \langle j_1 | z_1 \rangle \langle j_2 | z_2 \rangle + \sigma \langle j_1 | z_2 \rangle \langle j_2 | z_1 \rangle \quad (13)$$

où $\sigma = \pm 1$. Clairement, si je prend $\sigma = +1$, j'ai un état symétrique, donc un état de bosons, et si je prend $\sigma = -1$, j'obtiens un état antisymétrique, donc un état de fermions.

Si on calcule maintenant le symbole du Hamiltonien dans l'espace à deux particules, on obtient :

$$\begin{aligned} H(z_1, z_2) = & 2 \cos\left(\frac{p_1}{\hbar}\right) + 2 \cos\left(\frac{p_2}{\hbar}\right) \\ & + \sigma \left(\epsilon_1 \langle z_1 | z_2 \rangle \langle z_2 | z_1 + 1 \rangle + \bar{\epsilon}_1 \langle z_1 | z_2 \rangle \langle z_2 | z_1 - 1 \rangle \right. \\ & \left. + \epsilon_2 \langle z_2 | z_1 \rangle \langle z_1 | z_2 + 1 \rangle + \bar{\epsilon}_2 \langle z_2 | z_1 \rangle \langle z_1 | z_2 - 1 \rangle \right) \\ & - (1 + \sigma) \sum_{j=1}^N \langle z_1 | j \rangle \langle z_2 | j \rangle \left[\langle j | z_1 + 1 \rangle \langle j | z_2 \rangle + \langle j | z_1 - 1 \rangle \langle j | z_2 \rangle \right. \\ & \left. + \langle j | z_1 \rangle \langle j | z_2 + 1 \rangle + \langle j | z_1 \rangle \langle j | z_2 - 1 \rangle \right] \\ & - (1 + \sigma) \left[\sum_{j=1}^N \langle z_1, z_2 | j, j + 1 \rangle \left(\langle j | z_1 \rangle \langle j | z_2 \rangle + \langle j + 1 | z_1 \rangle \langle j + 1 | z_2 \rangle \right) \right] \\ & + (1 - \sigma) \left[\langle z_1 | z_2 \rangle \left(\langle z_2 | 1 \rangle \langle N | z_1 \rangle + \langle z_2 | N \rangle \langle 1 | z_1 \rangle \right) + c.h. \right. \\ & \left. - \left(\langle z_2 | 1 \rangle \langle N | z_2 \rangle + \langle z_1 | 1 \rangle \langle N | z_1 \rangle + c.h. \right) \right] \end{aligned} \quad (14)$$

où ϵ_1 et ϵ_2 sont des facteurs de phase définis par $\langle j | z_i + 1 \rangle = \epsilon_i \langle j - 1 | z_i \rangle$.

On peut classer les termes dans (14) en quatre groupes :

D'abord il y a les termes cinétiques des deux particules.

Ensuite il y a une interaction proportionnelle à σ . Cette interaction est très localisée : Elle est proportionnelle au produit scalaire entre les deux états dans lesquels se trouvent les deux particules, donc la portée de l'interaction est la largeur des particules. En plus, elle ne dépend pas des positions des particules, mais seulement de leur distance.

C'est intéressant à noter que le signe de l'interaction dépend du choix de σ . On peut comprendre cela de façon suivante : Pour un gaz de fermions, on sait que les particules se repoussent du au principe de Pauli même s'il n'y a pas d'interaction à cause d'une énergie potentielle entre les particules. De l'autre côté, les bosons tendent à s'attirer, même s'il n'y a pas de force attractive. L'interaction trouvée compense cet effet d'une façon : Pour les fermions de nature répulsive, elle est attractive, et pour les bosons elle est répulsive.

Puis il y a deux autres groupes de termes, dont seulement un reste après le choix de σ .

Regardons d'abord le cas des bosons $\sigma = +1$: Il s'agit donc des termes avec préfacteur $(1 + \sigma)$. Dans ces termes on trouve des expressions qui ressemblent à la côté droite de l'équation (13), mais avec $j_1 = j_2$. Symboliquement, on pourrait les écrire $\langle j, j | z_1, z_2 \rangle$, mais bien sûr un état $|j, j\rangle$ n'existe pas. On peut donc interpréter ces termes comme termes de correction : A priori, les bosons peuvent se trouver sur le même endroit. C'est ce terme qui prend garde que la dynamique ne laisse pas un état permis évoluer vers un état interdit avec les deux bosons sur le même endroit.

En effet, ces termes apparaissent pendant le calcul quand on veut simplifier des sommes sur deux indices $j_1 \neq j_2$. Pour pouvoir appliquer la relation de fermeture, il faut ajouter les termes avec $j_1 = j_2$ et après soustraire les mêmes termes.

On voit bien que ces termes n'apparaissent pas dans le cas des fermions, parce que si on utilise la formule (13), on trouve $\langle j, j | z_1, z_2 \rangle = 0$ pour $\sigma = -1$. Par contre, il y a des autres termes :

D'abord, vu que le Hamiltonien du départ était symétrique par translation, ça paraît étrange que ces termes $\propto (1 - \sigma)$ constituent en effet un potentiel ne dépendant pas seulement de la distance des deux particules mais aussi de la position des deux particules : Ce terme joue seulement un rôle, si les deux particules sont très proches des sites 1 et N .

L'explication est la suivante : Au-dessus j'ai défini les états $|j_1, j_2\rangle$ pour $j_1 \neq j_2$. Si je regarde seulement ces états avec $j_1 < j_2$, j'ai une base. Comme je travaille avec des fermions, c'est plus naturel de changer la définition des états $|j_2, j_1\rangle$ pour $j_1 < j_2$ en posant $|j_2, j_1\rangle_f = -|j_1, j_2\rangle_f$ (le petit f désignera ce changement).

Maintenant je regarde ce qui se passe si l'une des deux particules traverse le bord. En effet il y a le terme cinétique du Hamiltonien fait bouger l'une des deux particules vers la droite ou vers la gauche. Donc il y a un terme qui fait passer l'état $|j_1, j_2\rangle_f$ à l'état $|j_1, j_2 + 1\rangle_f$ (sous certaines conditions sur les coefficients j_1 et j_2). Si on parle des fermions et si on prend l'état $|j_1, N\rangle_f$ avec $2 \leq j_1 < N$, ce terme fait passer l'état $|j_1, N\rangle_f$ à l'état $|j_1, 1\rangle_f = -|1, j_1\rangle_f$. Par contre, si on retourne au modèle de départ, ce qui devrait se passer est que l'état $|j_1, N\rangle$ passe à l'état $+|1, j_1\rangle = |1, j_1\rangle_f$. Il faut donc des termes de correction.

Le même raisonnement explique le terme qui brise la symétrie dans la sections précédente.

Bien sûr on peut se débarrasser de ses termes, si on regarde le problème non-périodique.

Tout ensemble on voit que chacune des deux images a ses avantages et ses désavantages : Dans le cas des fermions, il y a une brisure de la symétrie de translation, mais celle-ci est négligeable si les particules sont loin du bord. Dans le cas des bosons il s'ajoute une interaction répulsive supplémentaire (le coeur dur).

L'interprétation comme bosons a une avantage supplémentaire : Lorsqu'on regarde des chaînes de spins avec une largeur de spin S supérieur à $1/2$, une interprétation en termes de fermions n'est plus possible. Quand même l'interprétation en termes de bosons reste valable : On admet qu'il y a au maximum $2S - 1$ particules sur le même endroit. La transformation associée a cette interprétation s'appelle transformation de Holstein-Primakov[12].

5.5 Résumé

On a vu que, pour tout J , différentes façons de décrire le système en termes de particules sont possibles. Bien sûr, une telle description est autant mieux si les particules sont de nature simple et si l'interaction entre les particules est simple.

Ici il faut balancer ces deux critères : En effet c'est possible de décrire les systèmes en termes de fermions indépendants, mais dans ce cas la nature des fermions dépend de la parité du nombre de particules. Alternativement on peut prendre les particules naturelles des cas limites $J = 0$ ou $J = 1$, mais on voit que dans ce cas le nombre de particules n'est plus une bonne nombre quantique lors qu'on traverse le point critique. Finalement nous avons vu qu'on peut décrire les ondes de spins soit comme des fermions ou soit comme des bosons et que chaque choix a ses avantages et désavantages.

6 Décomposition de l'espace Hilbert en sphères

6.1 L'état fondamental classique

Pour trouver une bonne approximation de l'état fondamental du système, on peut prendre comme inspiration l'état fondamental classique. Comme système classique on prend N spins classiques paramétrés par les $2N$ variables d'angle Θ_i et φ_i (coordonnées sphériques) avec la fonction de Hamilton :

$$H(\{\Theta_i, \varphi_i\}) = -J \sum_i \cos(\Theta_i) \cos(\Theta_{i+1}) - (1 - J) \sum_i \cos(\varphi_i) \sin(\Theta_i) \quad (15)$$

J'ai choisi les coordonnées sphériques dans la même façon que dans la section 5.1 (figure 8).

On peut déduire cette fonction de Hamilton de la façon suivante : A chaque état d'un seul spin $|s\rangle = a|\rightarrow\rangle + b|\leftarrow\rangle$, on peut associer un point sur la sphère, paramétré par des coordonnées sphériques Θ et φ . On trouve

$$\begin{aligned} a &= \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) \\ b &= e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) \end{aligned}$$

(voir [14, chapitre 4] pour plus de détails) Maintenant on peut regarder les états produits de N spins $|\{\Theta_i, \varphi_i\}\rangle = |\Theta_1, \varphi_1\rangle \otimes |\Theta_2, \varphi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\Theta_N, \varphi_N\rangle$. Si on prend la valeur moyenne du Hamiltonien (1), on obtient exactement l'expression de la fonction H dans l'équation 15.

Ici, on trouve aussi un lien avec les idées énoncés dans la section 5.4 : En effet, un état $|\Theta, \varphi\rangle$ peut s'interpréter comme un état cohérent sur la sphère de rayon $1/2$, donc les états $|\{\Theta_i, \varphi_i\}\rangle$ s'interprètent comme états cohérents d'un système de N spins, paramétrés par $2N$ variables. Avec cette définition, la fonction de Hamilton (15) est le symbole du opérateur de Hamilton sous cette famille d'états cohérents.

Pour minimiser la fonction H , on voit facilement que tous les spins doivent nécessairement être parallèles. Il suffit donc de minimiser la fonction

$$H(\Theta, \varphi) = -JN \cos(\Theta) \cos(\Theta) - (1 - J)N \cos(\varphi) \sin(\Theta) \quad (16)$$

qui dépend seulement de deux variables Θ et φ qui donnent la direction de tous les spins.

J'ai visualisé cette fonction pour différentes valeurs de J dans la figure 13. L'analyse de la fonction H donne les résultats suivants :

Pour $J \leq 1/3$ (grand champ magnétique), il n'y a qu'un seul minimum à $\Theta = \frac{\pi}{2}$ et $\varphi = 0$: Le spin est donc parallèle au champ.

Pour $J \geq 1/3$ (petit champ magnétique), il y a deux minima avec $\sin(\Theta) = \frac{1-J}{2J}$ et $\varphi = 0$. L'interaction d'Ising tourne les spins soit en direction $+x$, soit en direction $-x$ avec un angle qui dépend du champ. On a donc une brisure spontanée de symétrie.

L'énergie minimale classique du système en fonction de J est :

$$E_{min}(J) = \begin{cases} -(1 - J), & J \leq 1/3 \\ \frac{1}{4J} - \frac{1}{2} + \frac{5}{4}J, & J \geq 1/3 \end{cases}$$

Cette fonction et sa première dérivée sont continues. Je l'ai tracé dans la figure 14 avec le spectre exact. On voit que l'approximation est très proche de l'énergie fondamentale exacte pour $J < 1/5$ et pour $J > 1/2$. Entre $J = 0, 2$ et le point critique il y a une déviation visible.

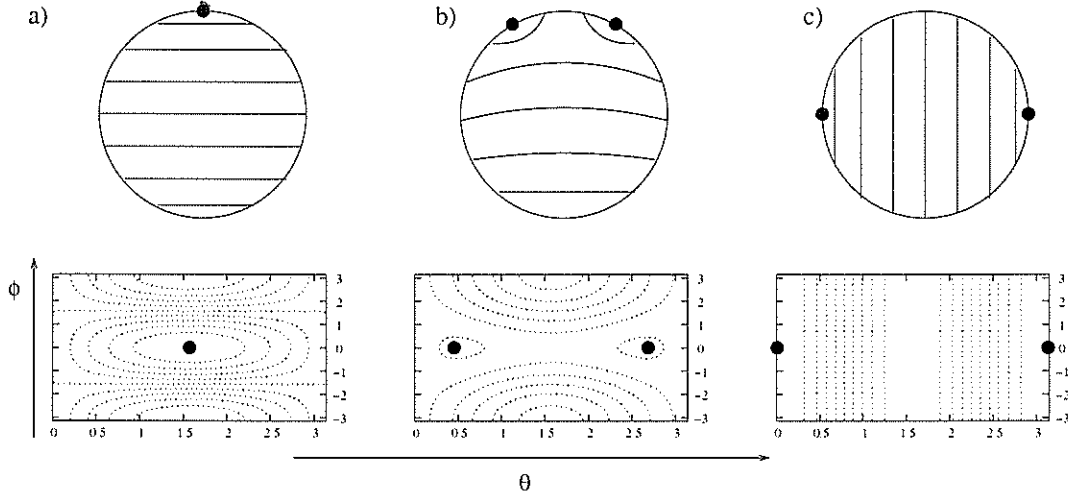


FIG. 13 – Les courbes de niveau de la fonction $H(\Theta, \varphi)$ pour différentes valeurs de J . Les points dénotent les minima.

- a) pour $J = 0$ il y a un seul minimum dans la direction $+z$.
- b) pour $J > 1/3$ (ici $J = 0.5$) il apparaissent deux minima, qui tendent vers $+x$ et $-x$.
- c) pour $J = 1$ il y a deux minima opposés.

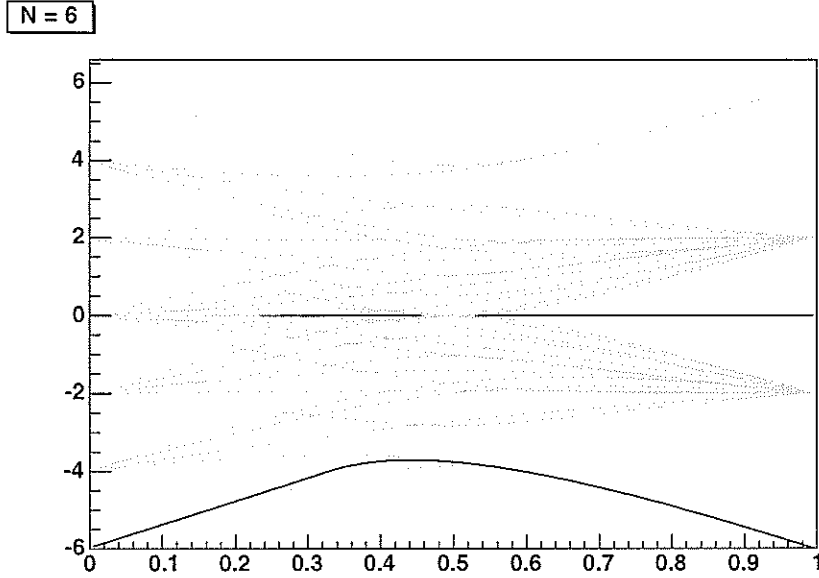


FIG. 14 – Le spectre est l'état fondamental classique du système pour $N = 6$.

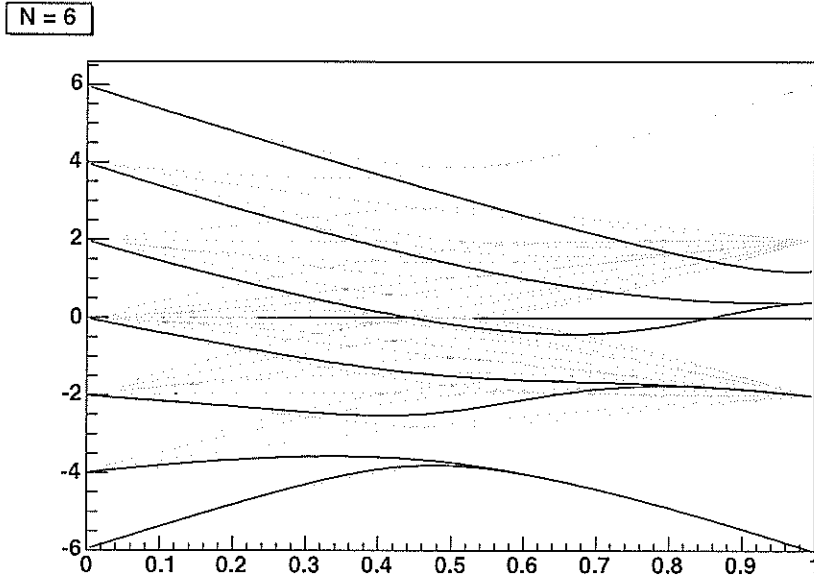


FIG. 15 – Le spectre du Hamiltonien si on se restreint à la sphère de rayon $N/2$.

C'est intéressant à noter que cette fonction présente une irrégularité à $J = 1/3$ bien que la transition de phase se trouve à $J = 1/2$.

Le calcul que j'ai présenté dans ce paragraphe s'interprète aussi comme calcul variationnel : Pour cela il faut prendre comme famille d'états de test la famille $\{|\Theta, \varphi\rangle\}$ des états de spins parallèles.

6.2 La sphère des spins parallèles

Comme on sait, que tous les spins sont parallèles dans l'état classique de plus basse énergie, c'est aussi intéressant de voir ce qui se passe dans la mécanique quantique dans le sous-espace engendré par les états $|\Theta, \varphi\rangle$ de spins parallèles.

Dans cet espace, tous les états sont des états propres de l'opérateur \hat{S}_{tot}^2 avec la valeur propre maximale de $N/2^2$. En effet, cet espace est identique à cet espace propre de \hat{S}_{tot}^2 . Une base de cet espace est donc donnée par les $N + 1$ états :

$$|\frac{\pi}{2}, 0\rangle = |\leftarrow \leftarrow \dots \leftarrow\rangle, \hat{S}_{\text{tot}}^+ |\frac{\pi}{2}, 0\rangle, (\hat{S}_{\text{tot}}^+)^2 |\frac{\pi}{2}, 0\rangle, \dots, (\hat{S}_{\text{tot}}^+)^N |\frac{\pi}{2}, 0\rangle \propto |\rightarrow \rightarrow \dots \rightarrow\rangle$$

Cet espace correspond à la quantification d'un seul spin de taille $N/2$, donc à une sphère.

Comme la structure des vecteurs propres est relativement simple, c'est possible de calculer les éléments de matrices analytiquement, voir annexe C.1.

Les résultats se trouvent dans la figure 15 : On voit que le sous-espace décrit bien la côté gauche du spectre. Si on a seulement le Hamiltonien du champ ($J = 0$), il y a dans le sous-espace un vecteur de chaque espace propre. Par contre, à $J = 1$ seulement les deux états fondamentaux et une partie de la première bande coupent le sous-espace. En effet, on voit facilement qu'il y a dans le sous-espace un état propre de chacune de ces deux bandes, mais on aurait pu espérer

²Bien sûr, les valeurs propres de \hat{S}_{tot}^2 sont de la forme $l(l + 1)$ avec l entière ou demi-entière et positive. Quand même, j'écrirai toujours l à la place de $l(l + 1)$ pour faciliter les expressions.

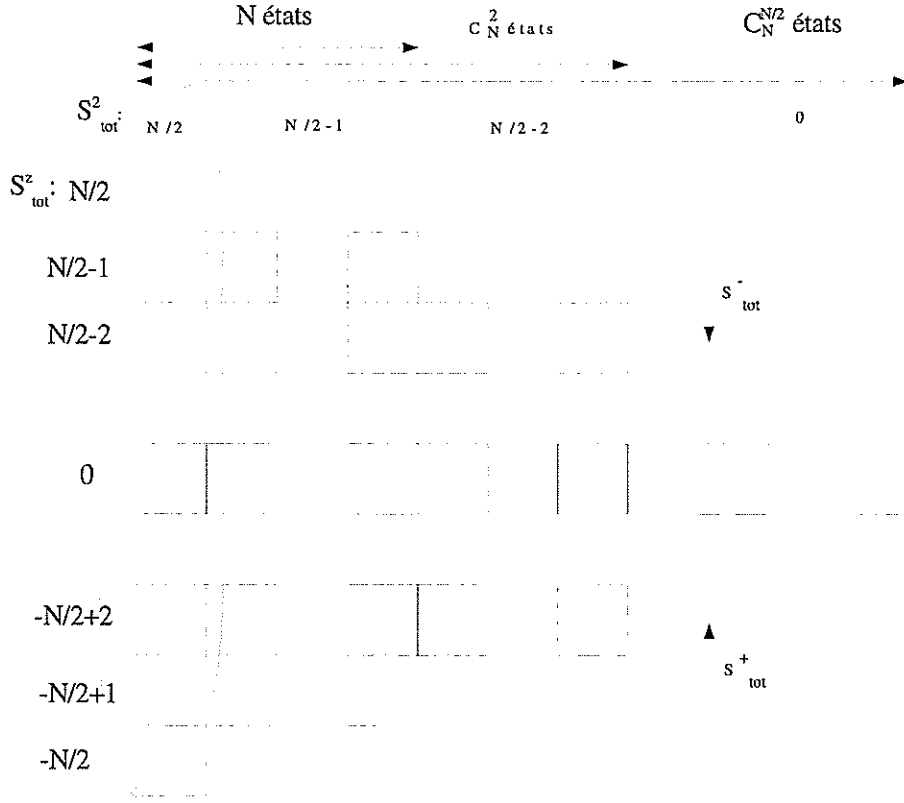


FIG. 16 – La décomposition de l'espace de Hilbert en espaces propres de \hat{H}_{champ} et \hat{S}_{tot}^2

qu'on trouve aussi une bonne approximation pour les autres bandes. En plus, toutes les valeurs propres du sous-espace se trouvent plutôt dans la partie basse du spectre. Intuitivement, ceci est facile à comprendre : Dans le sous-espace il y a surtout les vecteurs avec tous les spins parallèles, mais l'état le plus excité serait un état où tous les spins sont antiparallèles.

Ici encore on peut appliquer la théorie semiclassical : On peut utiliser les états $|\Theta, \varphi\rangle$ comme famille d'états cohérents sur la sphère paramétrée par deux paramètres et construire une fonction de Hamilton qui donne une dynamique sur la sphère. En effet, on obtient exactement la fonction de Hamilton (16), et on peut interpréter la figure 13 comme visualisation de l'espace de phase classique.

6.3 Les sphères de largeur $N/2 - 1$

Une extension possible de la sphère de rayon $N/2$ consiste en ajoutant des espaces propres de l'opérateur \hat{S}_{tot}^2 . En effet, on a une décomposition de l'espace de Hilbert totale en espaces propres communs de \hat{S}_{tot}^2 et de $\hat{H}_{champ} = 2\hat{S}_{tot}^x$ (voir fig. 16).

Pour trouver une base orthogonale d'un sous-espace propre de \hat{S}_{tot}^2 , il suffit de définir une base orthogonale pour les vecteurs avec \hat{S}_{tot}^x minimal. On obtient le reste de la base avec l'opérateur \hat{S}_{tot}^+ . On peut interpréter cela comme une décomposition du sous-espace en sphères.

Dans le cas le plus simple on ajoute à la sphère de rayon $N/2$ les $N - 1$ sphères de rayon $N/2 - 1$. Une base simple pour ce sous-espace se déduit des ondes de spin $|k\rangle_p$ introduite dans 5.1. On peut voir cela de façon suivante : Les états $|k\rangle_p$ forment une base de l'espace avec $\hat{S}_{tot}^x = N/2 - 1$. L'état $|0\rangle_p$ avec $k = 0$ se trouve dans la sphère avec $\hat{S}_{tot}^2 = N/2$, donc le reste

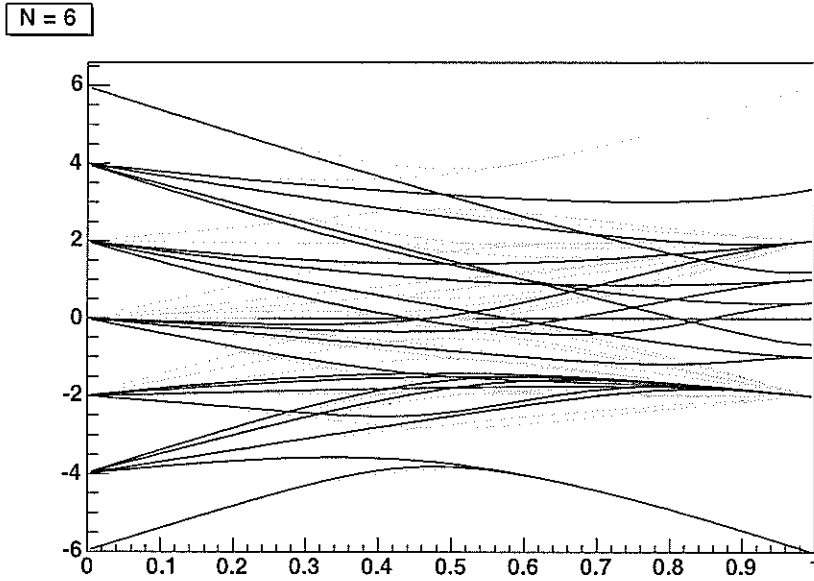


FIG. 17 – Le spectre de la restriction du Hamiltonien aux sphères de taille $N/2$ et $N/2 - 1$ pour $N = 6$.

gène les autres sphères (à l'aide de l'opérateur \hat{S}_{tot}^+).

Comme ce n'était pas possible de calculer les éléments de matrice de la restriction du Hamiltonien analytiquement, j'ai ajouté à mon programme des routines qui les calculent à partir du Hamiltonien total.

Le spectre résultant se trouve dans la figure 17. On voit qu'on a des propriétés qui sont très pareilles au spectre pour la sphère de rayon $N/2$: Le spectre est décrit bien dans la côté du champ, mais dans la côté d'Ising seulement la partie basse du spectre est reproduit assez bien. Dans la côté du champ les valeurs propres se trouvent plutôt dans la partie basse des bandes sauf pour la première et la $N - 1^{\text{ème}}$ bande excitée. Les valeurs propres qui se trouvent dans la première bande excitée de la côté d'Ising se trouvent toutes au milieu de cette bande.

C'est intéressant à noter que le spectre de la sphère $N/2$ est presque contenu dans ce spectre élargie, c'est à dire les lignes de la figure 15 se trouvent aussi dans la figure 17 sauf pour un tout petit écart. Ceci veut dire que l'approximation ne devient pas visiblement meilleure si on ajoute les sphères de rayon $N/2 - 1$, mais il s'ajoutent seulement des lignes supplémentaires.

6.4 Les sphères de largeur $N/2 - 2$

Si on ajoute en plus les sphères de largeur $N/2 - 2$, on a tous les états de la deuxième bande du spectre de \hat{H}_{champ} . L'idée était de voir, si cela aiderait à décrire la première bande de la côté Ising.

Malheureusement ce n'était pas possible pour moi de trouver une forme simple pour la base. Pour obtenir la base je me suis donc servi d'une méthode recursive avec les coefficients de Clebsch-Gordan (voir annexe C.2). Le programme calcule donc d'abord les vecteurs de la base et après la restriction du Hamiltonien avec ces vecteurs.

Le résultat pour $N = 8$ se trouve dans la figure 18. On voit à peu près les mêmes propriétés que dans les deux sections précédentes : La restriction est mieux adaptée pour $J < 1/2$. Dans

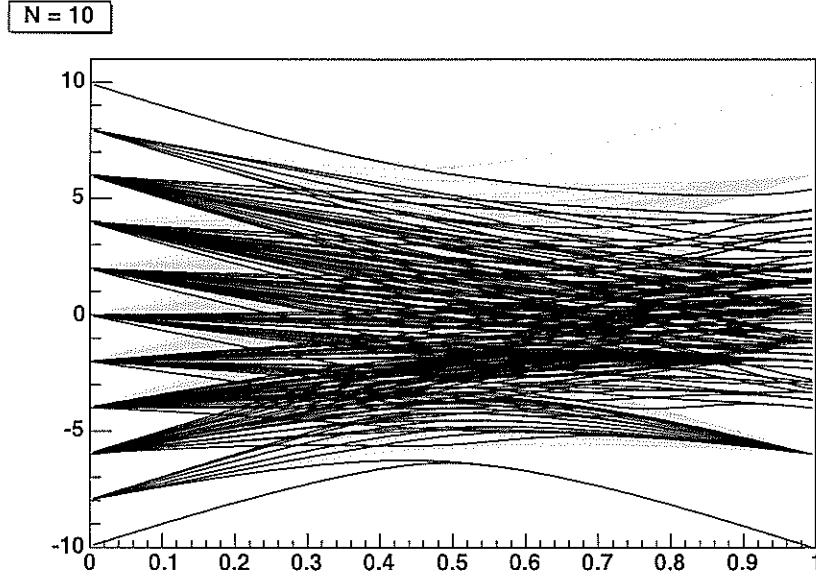


FIG. 18 – Le spectre de la restriction du Hamiltonien aux sphères jusqu'à la taille $N/2 - 2$ pour $N = 8$

les bandes entre la troisième et la $N - 2^{\text{ème}}$ bande excitée, seulement la partie basse est décrite. Sur la côté Ising, seulement les deux premières bandes excitées sont bien décrites. Maintenant une partie plus grande de la première bande est inclus dans le spectre, mais le spectre ne s'étend pas encore sur toute la bande.

Si on compare le spectre avec ces des deux dernières sections, on trouve que les spectres ne se couvrent pas. Par exemple l'approximation pour l'énergie fondamental est devenue visiblement meilleure en ajoutant les sphères.

6.5 Deux spins effectifs

Tous les sous-espaces utilisés jusqu'à maintenant ont une chose en commun : Ils ne décrivent que la partie basse du spectre sur la côté Ising. Or on connaît bien l'état le plus excité si $J = 1$: Si N est paire, c'est l'état où tous les spins sont orientés en direction $\pm x$ et chaque spin est antiparallèle à ses voisins.

Pour prendre en compte cet état, j'ai divisé le réseau en deux sous-réseaux comprenant les sites avec les indices paires respectivement impaires. Ensuite j'ai supposé que tous les spins sur chaque sous-réseau sont parallèles. J'ai donc remplacé les N spins par deux spins effectifs de taille $N/4$ (pour la facilité je regarde seulement le cas où N est paire).

C'est même possible de donner l'expression analytique des éléments de matrice nécessaires, voir annexe C.3.

Les résultats se trouvent dans la figure 19. On voit que le spectre est maintenant symétrique par rapport à l'axe J , donc on décrit la partie haute de la côté Ising du spectre aussi bien que la partie basse. En plus, dans la côté du champ, le spectre n'est plus restreint à la partie basse des bandes. Mais sur la côté Ising le spectre ne décrit bien que la bande la plus basse et la bande la plus haute. Il y a aussi des états dans la première et $N - 1^{\text{ème}}$ bande excitée (au milieu, comme pour le seul spin effectif). Le spectre ne donne pas du tout les bandes au milieu du spectre.

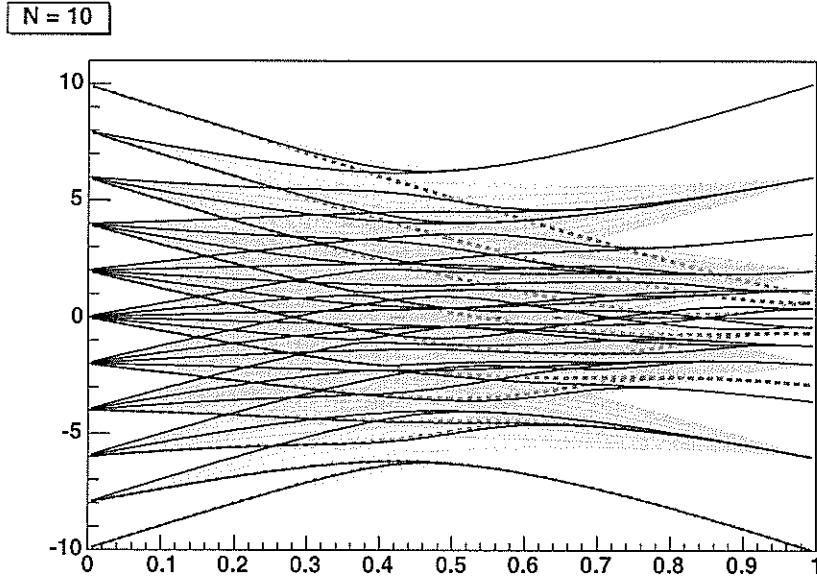


FIG. 19 – Le spectre du modèle des deux spins effectifs pour $N = 10$. Les lignes en traits gris sont le spectre du seul spin effectif.

Dans la figure il y a aussi le spectre du seul spin effectif. On note que pour $J < 1/2$ ce spectre consiste à peu près en la partie basse du spectre des deux spins effectifs.

6.6 Perspectives

En principe on pourrait continuer à agrandir le sous-espace regardé. On pourrait ajouter des sphères de rayons plus petits, ou bien on pourrait regarder deux spins effectif avec une taille qui n'est pas nécessairement $N/4$ mais qui peut changer à $N/4 - 1$.

Le problème est que les sous-espaces deviennent de plus en plus grand. Comme la dimension croît seulement comme un polynôme tandis que la dimension du problème total croît de façon exponentielle, on a pour $N \rightarrow \infty$ toujours un sous-espace beaucoup plus petit que tout l'espace de Hilbert. Quand même on a le problème qu'on a besoin d'un N assez grande pour voir le caractère d'approximation. Par exemple, si on regard le sous-espace de toutes les sphères jusqu'au rayon $N/2 - k$, on voit facilement que ce sous-espace est en fait tout l'espace de Hilbert jusqu'à $N = 2k - 1$, donc il faut aller à N supérieur à cela. Par contre si N est trop grand ($N > 10$), le calcul numérique devient trop lent.

Donc ce n'est pas tout à fait garanti qu'on peut généraliser toutes les propriétés des différentes spectres trouvées ici pour $N > 10$.

Dans le tableau suivant j'ai mis les dimensions de différents sous-espaces :

N	4	6	8	10	formule
exacte	16	64	256	1024	2^N
les sphères jusqu'au rayon					
$N/2$	5	7	9	11	$N + 1$
$N/2 - 1$	14	42	58	92	$N^2 - N + 2$
$N/2 - 2$	16	59	158	337	$\frac{N^3}{2} - 2N^2 + \frac{7}{2}N + 2$
$N/2 - 3$		64	242	712	$\frac{N^4}{6} + \dots$
deux sphères jusqu'au rayon					
$N/4$	9	16	25	36	$(N/2 + 1)^2$
$N/4$	16	64	196	484	$(N^2 - N + 2)^2$

(les valeurs grasses sont celles où le sous-espace est en fait tout l'espace)

On peut aussi demander si ce serait utile de continuer ici. Tous les résultats de cette section montrent, que l'approche est plutôt appropriée pour la côté du champ. Seulement l'état fondamental est bien décrit sur toute la rangée de J , mais c'est déjà difficile si on veut décrire toute la première bande et ne pas seulement le milieu.

Dans la section 5 on a vu, qu'on peut améliorer un peu l'approche en tournant la définition des particules. Or les sphères sont invariantes par rotation, donc ici cette démarche n'est pas possible. Il faut trouver une autre idée pour adapter les sous-espaces.

7 l'effet tunnel

Si $J \rightarrow 1$, l'état fondamental devient deux fois dégénéré. Pour $J < 1$, il y a une quasi-dégénérescence qu'on peut comparer avec celle d'une particule dans un double-puits.

En général, dans un double-puits, les énergies basses du spectre apparaissent en paires de valeurs presque dégénérées. L'écart actuelle ΔE entre deux niveaux d'une paire d'énergie E est lié avec le temps τ qu'il faut pour un paquet d'onde d'énergie autour de E pour traverser la barrière entre les deux puits d'après la formule de Heisenberg $\Delta E \tau \approx \hbar/2$ (voir annexe D.1 pour une justification).

Dans la théorie de l'effet de tunnel, on peut calculer le temps de passage τ à l'aide d'une action \mathcal{A} nécessaire pour franchir la barrière. Le rapport est exponentiel :

$$\ln(\Delta E) = -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A} \quad (17)$$

Dans le modèle de spins, la situation est semblable : Il y a deux états quasi-dégénérés. Pour passer d'un état à l'autre, il faut tourner N spins. Chaque état intermédiaire est un état d'énergie élevée, donc on peut aussi parler d'un passage par effet tunnel. Ceci motive de regarder la fonction $\mathcal{A}(J) = \ln(\Delta E)$ (ici j'ai omis la constante de Planck).

Si on passe maintenant à un sous-espace (qui, dans la limite $J \rightarrow 1$, contient les deux états fondamentaux) et regarde la restriction du Hamiltonien, on peut se demander ce qui se passe avec le ΔE . Intuitivement, si le système est plus restreint et s'il trouve moins de chemins traversant la barrière, τ augmente. Donc on attend que ΔE se diminue.

Dans le cas du sous-espace du seul spin effectif, on peut se visualiser l'effet tunnel à l'aide de l'espace de phase classique associé et la fonction de Hamilton correspondante, voir section 6.2 et figure 13. En principe le même est aussi possible pour l'espace total avec la fonction de Hamilton donnée dans 6.1.

Je compare les résultats obtenu numériquement pour le modèle exacte avec ceux obtenus avec deux sous-espaces, le seul spin effectif (voir 6.2) et les deux spins effectifs (voir 6.5).

Tous les trois cas donnent une dépendance de ΔE de J pareille :

$$\Delta E \approx c(1 - J)^{-N} \text{ pour } J \rightarrow 1 \quad (18)$$

avec une constante $c(N)$ qui dépend de N . Ceci veut dire que le temps de passage est proportionnel à $(1 - J)^N$. Intuitivement on peut comprendre cet exposant de la façon suivante : Pour passer de l'état 1, où tous les spins sont orienté vers $-x$, à l'état 2, où tous les spins sont orienté vers $+x$, il faut tourner N spins. Or c'est le terme \hat{H}_{champ} dans le Hamiltonien qui tourne les spins. Donc il faut appliquer ce terme avec son préfacteur $(1 - J)$ N fois.

Malheureusement, ce n'est pas possible d'utiliser cet argument simple et intuitive pour calculer le préfacteur $c(N)$. Les résultats numériques (pour $N \leq 12$ ³, voir figure 20) donnent le comportement suivant :

$$\begin{aligned} \log(c_t) &\propto \log(N) && \text{pour l'espace total} \\ \log(c_J) &\propto \mathcal{O}(N) && \text{pour le seul spin effectif} \\ \log(c_{JJ}) &\propto \mathcal{O}(N) && \text{pour les deux spins effectifs} \end{aligned}$$

³Malheureusement, ce n'est pas possible d'analyser numériquement le problème pour $N > 12$: D'abord le temps de calcul pour $N = 12$ dure plus qu'une heure pour chaque valeur de J . En plus, pour N grand, les deux énergies les plus basses sont quasiment dégénérées, donc il faudrait augmenter la précision du programme. Mais ceci ralentirait en plus le calcul.

ln(c(N)) pour des sous-espaces différents

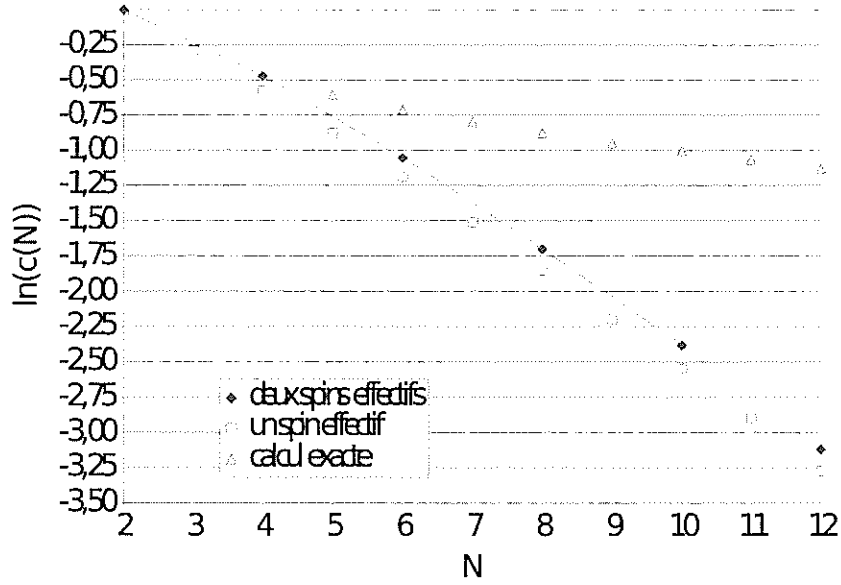


FIG. 20 – La constante $c(N)$ en échelle logarithmique.

En plus, on a $c_J < c_{JJ}$, mais le rapport, qui semble être constante à valeur $c_{JJ}/c_J \approx 1,17$ pour $N \rightarrow \infty$, n'est pas très grande. On voit donc qu'il y a une différence principale entre le comportement dans l'espace total de dimension 2^N et les sous-espaces avec une dimension de $N+1$ ou $N^2 - N + 1$, donc des sous-espaces avec une dimension qui dépend de façon polynomiale de N .

Tout ensemble on peut écrire donc le comportement de l'action $\mathcal{A} = -\ln(\Delta E) = N \ln(1 - J) - \ln(c)$ sous la forme

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}/N &= \ln(1 - J) + 1/N \mathcal{O}(\ln(N)) \rightarrow \ln(\lambda) \text{ pour le modèle exacte,} \\
 \mathcal{A}/N &= \ln(1 - J) + 1/N \mathcal{O}(N) \rightarrow \ln(\lambda) + \mathcal{O}(1) \text{ pour le seul spin effectif,} \\
 \mathcal{A}/N &= \ln(1 - J) + 1/N \mathcal{O}(N) \rightarrow \ln(\lambda) + \mathcal{O}(1) \text{ pour les deux spins effectifs}
 \end{aligned}$$

dans la limite $N \rightarrow \infty^4$.

⁴en toute rigueur ceci n'est qu'une supposition, vu que l'analyse numérique ne marche que pour $N < 12$

8 Remerciements

Je remercie Frédéric Faure, mon maître de stage, pour un stage très libre avec la possibilité de choisir moi-même le chemin à suivre.

Je remercie aussi Françoise Berthoud pour tous les programmes installés sur mon ordinateur.

Je veux aussi remercier les thésards, le diplomand et les autres stagiaires du labo pour le café (et le thé).

Finalement, je suis très reconnaissant envers l'ensemble du labo pour l'ambiance de travail très amicale et les gâteaux réguliers.

A Complément à la section 4

A.1 La symétrie du Hamiltonien

Soit N paire et $|a\rangle$ un état propre du Hamiltonien $\hat{H} = -J\hat{H}_{Ising} - (1-J)\hat{H}_{champ}$ d'énergie $E = \langle a|\hat{H}|a\rangle$. Je pose $E_{Ising} = \langle a|\hat{H}_{Ising}|a\rangle$ et $E_{champ} = \langle a|\hat{H}_{champ}|a\rangle$, donc on a $E = -JE_{Ising} - (1-J)E_{champ}$. Si on écrit $J\hat{H}_{Ising}|a\rangle = E_{Ising}|a\rangle + |R\rangle$, on a

$$\begin{aligned} (1-J)\hat{H}_{champ}|a\rangle &= -(\hat{H} + J\hat{H}_{Ising})|a\rangle \\ &= -(E + JE_{Ising})|a\rangle - |R\rangle \\ &= (1-J)E_{champ}|a\rangle - |R\rangle \end{aligned}$$

Soit $\hat{T}_{champ} = \prod_i \hat{\sigma}_i^x$ l'opérateur qui effectue la réflexion de tous les spins par le plan xy et $\hat{T}_{Ising} = \prod_{i \text{ paire}} \hat{\sigma}_i^z$ l'opérateur qui effectue la réflexion d'un spin sur deux par le plan yz . On voit

que $[\hat{T}_{Ising}, \hat{H}_{champ}] = [\hat{T}_{champ}, \hat{H}_{Ising}] = 0$, et avec les règles d'anticommuation des matrices de Pauli et le fait que N est paire, on peut suivre aussi $[\hat{T}_{Ising}, \hat{T}_{champ}] = 0$. En décomposant l'état $|a\rangle$ dans les bases $\{|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle_z\}$ et $\{|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle_x\}$, on peut démontrer les formules suivantes :

$$\begin{aligned} (1-J)\hat{H}_{champ}\hat{T}_{champ}|a\rangle &= -(1-J)E_{champ}\hat{T}_{champ}|a\rangle + \hat{T}_{champ}|R\rangle \\ (1-J)\hat{H}_{champ}\hat{T}_{Ising}|a\rangle &= (1-J)E_{champ}\hat{T}_{Ising}|a\rangle - \hat{H}_{champ}|R\rangle \\ J\hat{H}_{Ising}\hat{T}_{champ}|a\rangle &= JE_{Ising}\hat{T}_{champ}|a\rangle + \hat{T}_{champ}|R\rangle \\ J\hat{H}_{Ising}\hat{T}_{Ising}|a\rangle &= -JE_{Ising}\hat{T}_{Ising}|a\rangle - \hat{T}_{Ising}|R\rangle \end{aligned}$$

En plus, on calcule :

$$\begin{aligned} \hat{H} \hat{T}_{champ}|a\rangle &= (-JE_{Ising} + (1-J)E_{champ})\hat{T}_{champ}|a\rangle + 2\hat{T}_{champ}|R\rangle \\ \hat{H} \hat{T}_{Ising}|a\rangle &= (+JE_{Ising} - (1-J)E_{champ})\hat{T}_{Ising}|a\rangle - 2\hat{T}_{Ising}|R\rangle \\ \hat{H} \hat{T}_{Ising}\hat{T}_{champ}|a\rangle &= (+JE_{Ising} + (1-J)E_{champ})\hat{T}_{Ising}\hat{T}_{champ}|a\rangle = -E\hat{T}_{Ising}\hat{T}_{champ}|a\rangle \end{aligned} \quad (19)$$

Ceci montre, que les états $b)$ et $c)$ de la figure 4 ne sont pas de états propres, mais l'état $d)$ est un état propre.

B Complément à la section 5

B.1 La restriction du Hamiltonien au sous-espace d'une seule onde de spin

La restriction de \hat{H}_{champ} est constante et égale à $N - 2$, parce que c'est cet espace propre qui est analysé dans cette section.

Si on applique la somme $\hat{H}_{Ising} = \sum_i \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x$ à un état $|j\rangle$, tous les termes donnent zéro sauf les termes avec $i = j$ ou $i = j - 1$: Ce sont les seuls deux termes qui conservent le nombre de particules. Leur effet est exactement la translation $j \rightarrow j + 1$ ou bien $j \rightarrow j - 1$.

B.2 L'impulsion \hat{p} dans la chaîne des spins

Pour trouver un analogue à l'opérateur d'impulsion dans la mécanique d'une particule dans l'espace réel, je commence avec les états propres de l'opérateur de translation \hat{T}_l : Ce sont les N états

$$|k\rangle_p = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikj} |j\rangle$$

avec $k = \frac{2\pi\kappa}{N}$ et $\kappa = 1, 2, \dots, N$. Ils forment une base de l'espace à une particule, et ils satisfont $\hat{T}_l |k\rangle = e^{ikl} |k\rangle$. Donc pour obtenir la relation $\hat{T}_l = \exp(\frac{i\hat{p}l}{\hbar})$, il faut poser

$$\hat{p} |k\rangle_p = \hbar k |k\rangle_p \quad (20)$$

Comme les $|k\rangle_p$ forment une base, l'opérateur est bien défini par cette équation. Cet opérateur satisfait tous les analogies nécessaires avec l'opérateur d'impulsion standard. Par exemple, on passe de la représentation dans l'espace réel (c'est à dire la représentation dans la base $|j\rangle$) à la représentation dans l'espace réciproque (c'est à dire la représentation dans la base $|k\rangle_p$) par transformation de Fourier.

Une autre façon de voir l'opérateur d'impulsion \hat{p} vient de la théorie de la mécanique quantique sur le tore : On regarde l'espace des états périodiques sur un intervalle dont les fonctions transformées par transformation de Fourier sont aussi périodiques. On les appelle «fonctions du tore», parce que l'espace de phase classique correspondant serait un tore, périodique en direction x et en direction p . On peut se rendre compte, que ces fonctions consistent en effet en une superposition de N distributions de Dirac (avec N dépendant de la taille du tore). L'espace du tore est donc de dimension finie. L'opérateur d'impulsion standard agissant sur cet espace est exactement l'opérateur construit au-dessus.

Dans la section 5.1 je montre, à l'inverse, qu'une fonction d'onde d'une particule qui peut se trouver sur N sites est aussi périodique dans l'impulsion, ce qui justifie l'image du tore. Pour plus de détails sur la mécanique quantique sur le tore voir [11].

C Complément à la section 6

C.1 La sphère de rayon $N/2$: la base et les éléments de matrice

Comme énoncé dans 6.2, l'ensemble de $N + 1$ vecteurs

$$\begin{aligned} |N/2, 0\rangle &:= c_0 & |\theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = 0\rangle &= |\leftarrow \leftarrow \dots \leftarrow\rangle, \\ |N/2, 1\rangle &:= c_1 \quad \hat{S}_{tot}^+ & |\frac{\pi}{2}, 0\rangle, \\ |N/2, 2\rangle &:= c_2 \quad (\hat{S}_{tot}^+)^2 & |\frac{\pi}{2}, 0\rangle, \\ &\vdots \\ |N/2, N\rangle &:= c_3 \quad (\hat{S}_{tot}^+)^N & |\frac{\pi}{2}, 0\rangle = |\rightarrow \rightarrow \dots \rightarrow\rangle, \end{aligned}$$

(où les c_k sont choisies positives telles que les vecteurs soient normés), forme une base.

Pour calculer les éléments de matrice de la restriction du Hamiltonien, il faut regarder cette base plus en détail. On a $\hat{S}_{tot}^+ = \sum_i \hat{S}_i^+$, donc $\hat{S}_{tot}^+ |\frac{\pi}{2}, 0\rangle = \sum_i |i\rangle$, où l'état $|i\rangle$ est défini comme dans 5.1. De même, $(\hat{S}_{tot}^+)^k |\frac{\pi}{2}, 0\rangle$ est la somme symétrique de tous les C_N^k éléments de la base standard avec k spins vers la droite et $N - k$ spins vers la gauche. Cette somme est normalisée avec le facteur $1/\sqrt{C_N^k}$.

Pour calculer l'élément de matrice de \hat{H}_{Ising} restreint au sous-espace, d'abord on remarque que \hat{H}_{Ising} est diagonal dans cet espace : \hat{H}_{Ising} ne change pas la valeur de \hat{S}_{tot}^x , et dans le sous-espace les valeurs propres de \hat{S}_{tot}^x sont non-dégénérées.

Comme j'ai remarqué, chaque vecteur de base $|N/2, k\rangle$ s'écrit comme somme symétrique de C_N^k termes. Pour chaque i , il y a

$$\begin{aligned} C_{N-2}^k &\text{ termes où } \sigma_i^x \text{ donne } -1 \text{ et } \sigma_{i+1}^x \text{ donne } -1, \\ C_{N-2}^{k-1} &\text{ termes où } \sigma_i^x \text{ donne } -1 \text{ et } \sigma_{i+1}^x \text{ donne } +1, \\ C_{N-2}^{k-1} &\text{ termes où } \sigma_i^x \text{ donne } +1 \text{ et } \sigma_{i+1}^x \text{ donne } -1, \\ C_{N-2}^{k-2} &\text{ termes où } \sigma_i^x \text{ donne } +1 \text{ et } \sigma_{i+1}^x \text{ donne } +1. \end{aligned}$$

La valeur moyenne $\langle N/2, k | \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x | N/2, k \rangle$ est donc proportionnel à

$$C_{N-2}^k + C_{N-2}^{k-2} - 2C_{N-2}^{k-1}$$

ce qu'on peut écrire comme

$$C_N^k \frac{1}{N(N-1)} [N^2 - (4k+1)N + 4k^2]$$

Après la normalisation et sommation sur i , on a donc comme élément de matrice :

$$\frac{1}{N-1} [N^2 - (4k+1)N + 4k^2]$$

Pour trouver la restriction de \hat{H}_{champ} , on note que $\hat{H}_{champ} = 2\hat{S}_{tot}^z = 1/i(\hat{S}_{tot}^+ - \hat{S}_{tot}^-)$. Avec les formules générales[15, section 3.5]

$$\begin{aligned} \hat{S}_{tot}^+ |J, k\rangle &= \sqrt{(2J-k)(k+1)} |k+1\rangle \quad \text{si } 0 \leq k < 2J, \\ \hat{S}_{tot}^- |J, k\rangle &= \sqrt{(2J-k+1)(k)} |k-1\rangle \quad \text{si } 0 < k \leq 2J, \end{aligned} \tag{21}$$

où $|J, k\rangle$ est un état de spin J et avec $\hat{S}_{tot}^x = k - J$, on connaît tous les éléments de matrices nécessaires.

C.2 Les sphères de largeur $N/2 - 2$: la base

Pour trouver une base d'un espace propre de \hat{S}^2 , il suffit de donner une base du sous-espace avec \hat{S}_{tot}^x minimale. Après on retrouve toute la base en appliquant l'opérateur \hat{S}_{tot}^+ (pour la normalisation il faut prendre l'équation (21)). J'ai déjà donné des vecteurs de base pour les sous-espaces avec spin total $N/2$ et $N/2 - 1$. Ici je vais donc expliquer comment obtenir une base du sous-espace des états de spin $N/2 - 2$ avec $\hat{S}_{tot}^x = -N/2 + 2$ minimale.

Cette base se construit de façon récursive. Si je prend un système de $N - 1$ spins et si j'ajoute un spin $1/2$ par produit tensoriel, l'état le plus général s'écrit $a|A\rangle \otimes |\leftarrow\rangle + b|B\rangle \otimes |\rightarrow\rangle$. Pour aboutir à un état de spin $N/2 - 2$, il y a deux possibilités pour les états $|A\rangle$ et $|B\rangle$:

1. Je peut prendre des états de spin $(N - 1)/2 - 2 = N/2 - 5/2$ du premier système. Dans ce cas, le spin total du système croît de $1/2$. Pour arriver à un état avec \hat{S}_{tot}^x minimale, il faut que $|A\rangle$ soit déjà un état avec \hat{S}_{tot}^x minimale et que le dernier spin soit orienté vers $-x$, donc $b = 0$ et $a = 1$. On peut noter cela symboliquement comme $|N/2 - 2, -N/2 + 2\rangle = |N/2 - 5/2, -N/2 + 5/2\rangle \otimes |\leftarrow\rangle$.
2. Ou bien je peut prendre un état de spin $(N - 1)/2 - 1 = N/2 - 3/2$. Dans ce cas, le spin se diminue de $1/2$. Pour arriver à un état avec la bonne valeur de \hat{S}_{tot}^x , il faut que $|A\rangle$ a une valeur de \hat{S}_{tot}^x de $-N/2 + 5/2$ et que $|B\rangle$ a une valeur de \hat{S}_{tot}^x de $-N/2 + 3/2$. Cela s'écrit symboliquement comme $|N/2 - 2, -N/2 + 2\rangle = a|N/2 - 3/2, -N/2 + 5/2\rangle \otimes |\leftarrow\rangle + b|N/2 - 3/2, -N/2 + 3/2\rangle \otimes |\rightarrow\rangle$. Les valeurs de a et b sont les coefficients de Clebsch-Gordan. Dans ce cas simple (qui est décrit par exemple dans [15, section 3.7]), on trouve $a = \sqrt{\frac{N-1}{N-2}}$ et $b = -\sqrt{\frac{1}{N-2}}$.

Les deux possibilités donnent des vecteurs différents et orthogonaux.

Tout cela est visualisé dans la figure 21. Dans cette figure, les nombres donnent le nombre de sphères dans un sous-espace, c'est à dire le nombre de vecteurs avec \hat{S}_{tot}^x minimale dans ce sous-espace (seulement les sous-espaces avec $\hat{S}^2 \geq N/2 - 2$ sont affichés). Avec ce schéma, on déduit la procédure suivante pour la construction de la base cherchée :

Pour tout n avec $3 \leq n \leq N$, on prend la base de l'espace de n spins avec $\hat{S}_{tot}^2 = n/2 - 1$ et \hat{S}_{tot}^x minimale (ce sont les ondes de spin), et avec les coefficients de Clebsch-Gordan (possibilité 2), on crée des vecteurs de $n + 1$ spins avec $\hat{S}_{tot}^2 = (n + 1)/2 - 2$ et \hat{S}_{tot}^x minimale. Après, on ajoute par produit tensoriel les $N - (n + 1)$ spins qui restent avec une orientation $-x$ (possibilité 1 dans l'énumération au-dessus).

Pour tout n on obtient des vecteurs différents et même orthogonaux. La base qu'on cherche est donnée par l'ensemble de tous ces vecteurs.

C.3 Les deux sphères effectifs de rayon $N/2$: les éléments de matrice

Dans ce qui suit, je suppose que N est paire (comme dans la section 6.3).

Comme base pour le sous-espace des deux spins effectifs je prend le produit tensoriel de deux bases pour les deux spins. Les bases pour les deux spins sont choisies comme pour le seul spin effectif (voir C.1). Je pose $\hat{S}_{pair}^x = \sum_{i \text{ paire}} \hat{S}_i^x$ et $\hat{S}_{impair}^x = \sum_{i \text{ impair}} \hat{S}_i^x$. Les vecteurs de base sont donc les états $|k_1, k_2\rangle := |N/4, k_1\rangle \otimes |N/4, k_2\rangle$ avec $\hat{S}_{impair}^x = k_1 - N/4$ et $\hat{S}_{pair}^x = k_2 - N/4$, $k_1, k_2 \in \{0, \dots, N\}$.

Comme dans C.1 on constate que l'opérateur \hat{H}_{Ising} est diagonal dans cette base, parce qu'il ne change ni \hat{S}_{pair}^x ni \hat{S}_{impair}^x . Les états $|N/4, k_1\rangle$ et $|N/4, k_2\rangle$ s'écrivent comme sommes de $C_{N/2}^{k_1}$ ou $C_{N/2}^{k_2}$ termes orthogonaux qui correspondent à toutes les possibilités d'avoir k_1 ou k_2 spins orientés vers la droite et le reste orienté vers la gauche. La constante de normalisation totale

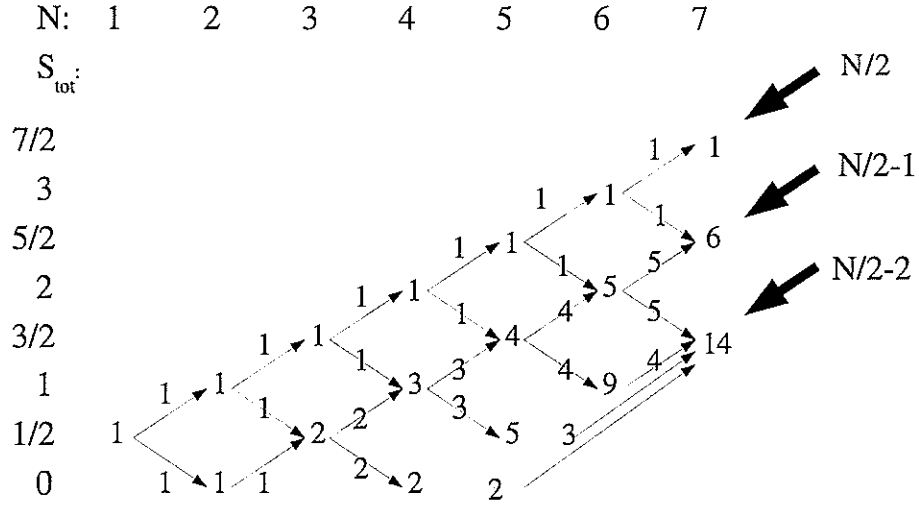


FIG. 21 – La construction récursive de la base pour l'espace avec $\hat{S}_{tot}^2 = N/2 - 2$ et \hat{S}_{tot}^x minimale

est donc $\sqrt{C_{N/2}^{k_1-1} C_{N/2}^{k_2-1}}$. Pour i donné, je regarde la valeur moyenne $\langle k_1, k_2 | \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x | k_1, k_2 \rangle$. Sans perte de généralité je suppose que i est impaire. Dans la première somme, il y a donc $C_{N/2}^{k_1-1}$ termes avec $\sigma_i^x = -1$ et $C_{N/2-1}^{k_1-1}$ termes avec $\sigma_i^x = +1$. De même, dans la deuxième somme, il y a $C_{N/2}^{k_2-1}$ termes avec $\sigma_{i+1}^x = -1$ et $C_{N/2-1}^{k_2-1}$ termes avec $\sigma_{i+1}^x = +1$. La valeur moyenne est donc proportionnelle à

$$C_{N/2}^{k_1-1} C_{N/2}^{k_2-1} + C_{N/2-1}^{k_1-1} C_{N/2-1}^{k_2-1} - C_{N/2}^{k_1-1} C_{N/2-1}^{k_2-1} - C_{N/2-1}^{k_1-1} C_{N/2-1}^{k_2-1}$$

ce qu'on peut écrire comme

$$C_{N/2}^{k_1} C_{N/2}^{k_2} \frac{(N/2 - 2k_1)(N/2 - 2k_2)}{(N/2)^2}$$

Après la normalisation et sommation sur i , on a donc comme élément de matrice :

$$\frac{(N/2 - 2k_1)(N/2 - 2k_2)}{N/4}$$

Pour trouver les éléments de \hat{H}_{champ} , on prend la formule $\hat{H}_{champ} = 2\hat{S}_{tot}^z = 1/i(\hat{S}_{tot}^+ - \hat{S}_{tot}^-) = 1/i(\hat{S}_{impair}^+ + \hat{S}_{pair}^+ - \hat{S}_{impair}^- - \hat{S}_{pair}^-)$ avec les formules de normalisation (21), comme dans C.1.

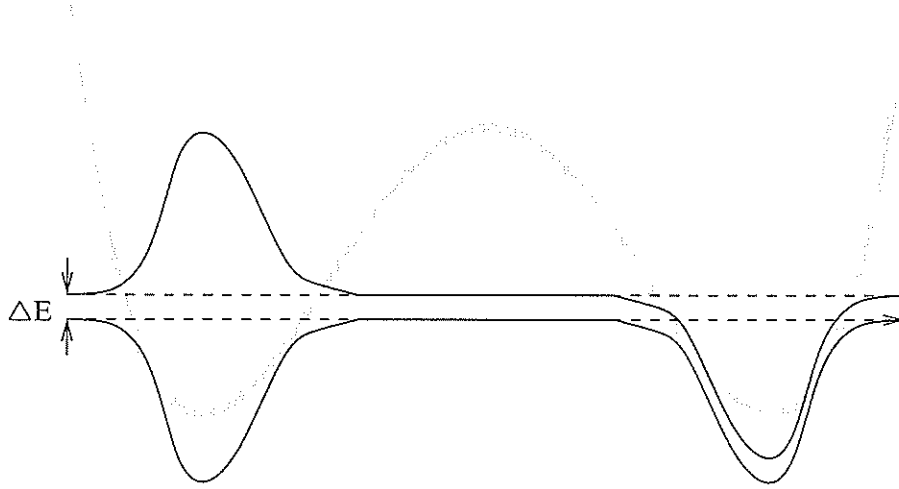


FIG. 22 – Ce figure schématise les deux états de plus basse énergie quasi-dégénérés d'un double-puits

D Complément à la section 7

D.1 le temps de tunnel dans un double-puits

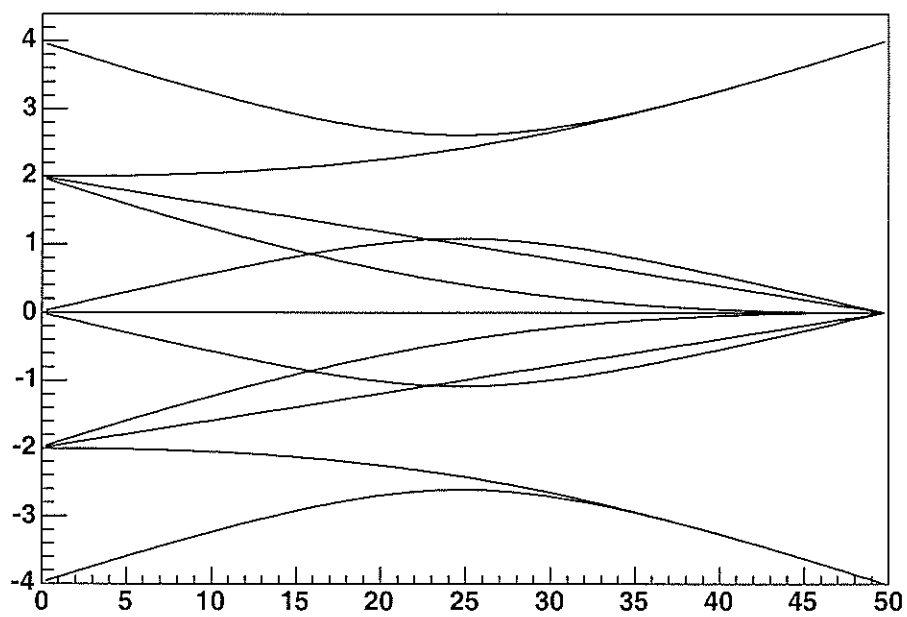
Dans un potentiel de double-puits, les états propres d'un seul puits et d'énergie basse $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ sont souvent une bonne approximation pour les états propres de basse énergie de tout le système. A cause de la symétrie par réflexion du problème, une meilleure approximation consiste en regardant les combinaisons linéaires symétriques et antisymétriques $|\Psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle)$ et $|\Psi_{as}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_1\rangle - |\Psi_2\rangle)$. En général, l'état symétrique est de plus basse énergie.

En premier ordre, je suppose que ces deux états sont des états propres du Hamiltonien, et je dénote avec E_s et E_{as} les énergies des deux états et je pose $\Delta E = E_{as} - E_s$. En partant à l'instant $t = 0$ de l'état localisé dans le premier puits $|\Psi_1\rangle$, l'évolution de l'état est

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{\frac{i}{\hbar} E_s t} |\Psi_s\rangle + e^{\frac{i}{\hbar} E_{as} t} |\Psi_{as}\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{i}{\hbar} E_s t} \left(|\Psi_s\rangle + e^{\frac{i}{\hbar} \Delta E t} |\Psi_{as}\rangle \right) \end{aligned}$$

Donc pour transformer l'état $|\Psi_1\rangle$ dans l'état $|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_s\rangle - |\Psi_{as}\rangle)$, il faut attendre jusqu'à ce que $e^{\frac{i}{\hbar} \Delta E t} = -1$, donc le temps de passage satisfait $\Delta E t = \hbar\pi = h/2$.

Eigenvalues



Eigenvalues

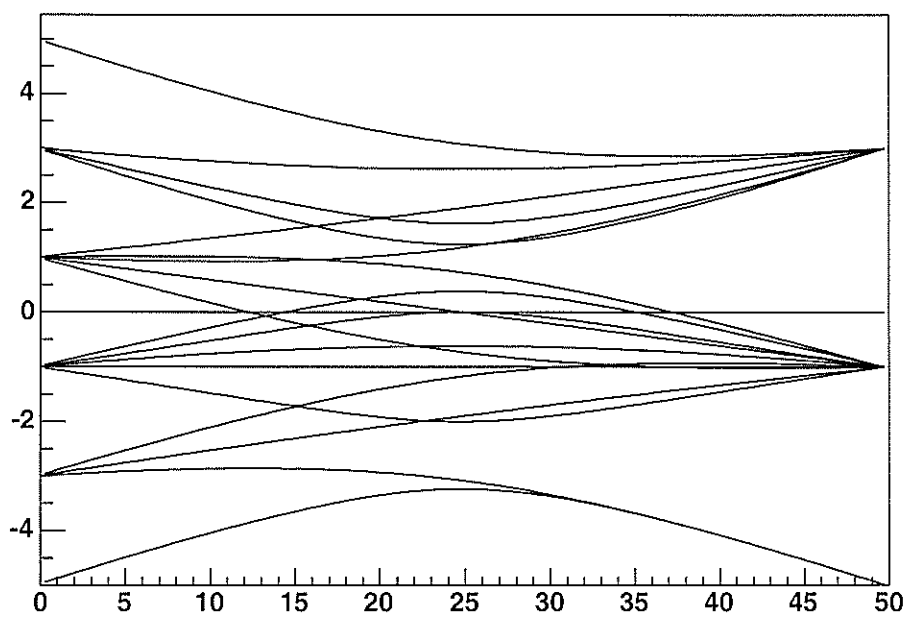
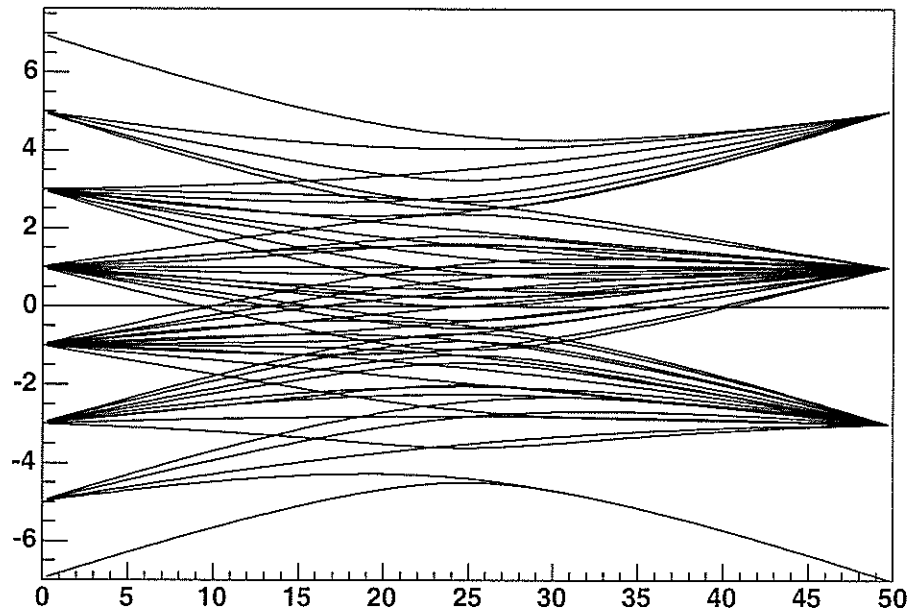


FIG. 23 – Le spectre en fonction de J pour $N = 4$ et $N = 5$

Eigenvalues



$N = 10$

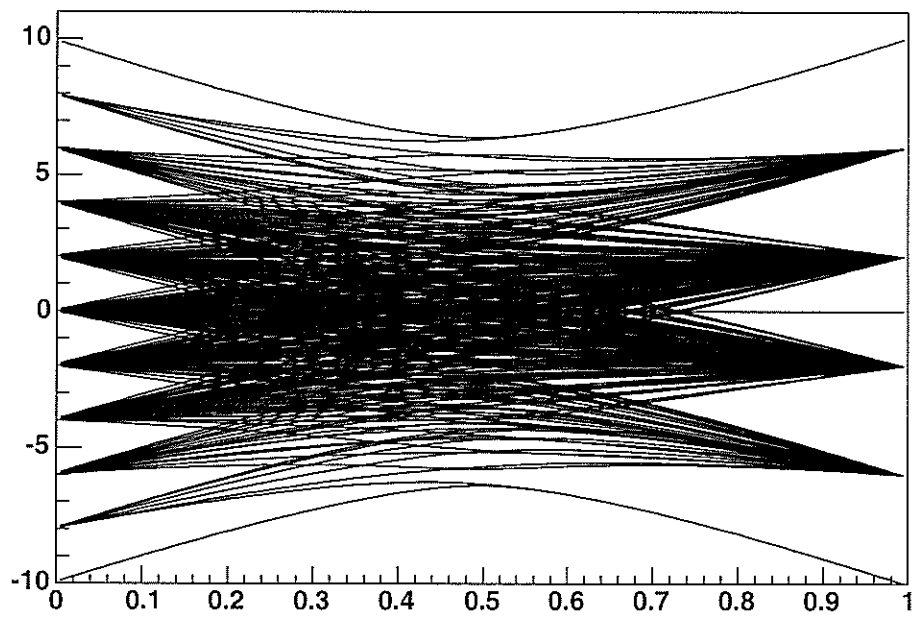


FIG. 24 - Le spectre en fonction de J pour $N = 7$ et $N = 10$

Références

- [1] pour des informations plus détaillées sur le labo voir le site web
<http://lpm2c.grenoble.cnrs.fr/> et le «Activity Report 1998-2001»
(<http://www-lpm2c.grenoble.cnrs.fr/AR/>)
- [2] S. SACHDEV, «Quantum Phase Transitions», Cambridge 1999
- [3] J. VILLAIN, *Physica B* **79** (1975), 1
- [4] H.-J. MIKESKA ET S. MIYASHITA, *Z. Phys. B* **101** (1996), 275
- [5] H.-J. MIKESKA, S. MIYASHITA ET G. RISTOW, *J. Phys. : Condensed Matter* **3** (1991), 2985
- [6] F. FAURE ET B. ZHILINSKII, *Lett. Math. Phys.* **55** (2001), 219
- [7] F. FAURE ET B. ZHILINSKII, *Phys. Lett. A* **302** (2002), 242
- [8] P. JORDAN ET E. WIGNER, *Z. Physik* **47** (1928), 631
- [9] E. LIEB, T. SCHULTZ ET D. MATTIS, *Ann. Phys. (N.Y.)* **16** (1961), 407
- [10] P. PFEUTY, *Ann. Phys. (N.Y.)* **57** (1970), 79
- [11] la thèse de Frédéric Faure, disponible sur
<http://www-lpm2c.grenoble.cnrs.fr/People/Faure/articles/index.html>
- [12] T. HOLSTEIN ET H. PRIMAKOV *Phys. Rev.* **58** (1940), 1098
- [13] Pour une introduction sur la théorie semiclassique consulter
<http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~ycolver/>.
- [14] les notes du cours de mécanique quantique du Master I de Frédéric Faure de l'année 2003/2004, disponible sur <http://miphy.fr.st/> ou sur
<http://www-lpm2c.grenoble.cnrs.fr/faure/enseignement/index.html>
- [15] J. J. SAKURAI, «Modern Quantum Mechanics», 1985