



Corrélations, intrication et dynamique des systèmes quantiques à N Corps : une étude variationnelle

Jerôme Thibaut

► To cite this version:

Jerôme Thibaut. Corrélations, intrication et dynamique des systèmes quantiques à N Corps : une étude variationnelle. Electrons fortement corrélés [cond-mat.str-el]. Université de Lyon, 2019. Français. NNT : 2019LYSEN021 . tel-02345613

HAL Id: tel-02345613

<https://theses.hal.science/tel-02345613>

Submitted on 4 Nov 2019

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.



Numéro National de Thèse : 2019LYSEN021

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE LYON

opérée au sein de
l'École Normale Supérieure de Lyon

École Doctorale ED52
Physique et Astrophysique de Lyon (PHAST)

Discipline : Physique

Soutenue publiquement le 09/07/2019, par :

Jérôme THIBAUT

Corrélations, intrication et dynamique des systèmes quantiques à N corps : une étude variationnelle

Effectuée sous la direction de :

Tommaso ROSCILDE, MCF - HDR, ENS de Lyon
Fabio MEZZACAPO, chargé de recherche, ENS de Lyon

Directeur de thèse
Co-encadrant

Thèse soutenue devant le jury composé de :

Sylvain CAPPONI, Professeur des Universités, Université Paul Sabatier
Anuradha JAGANNATHAN, Professeure des Universités, Université Paris Sud
Grégoire MISGUICH, Chercheur-HDR, CEA Saclay
Edmond ORIGNAC, Directeur de recherche, ENS de Lyon
Nelly PUSTELNIK, Chargée de recherche, ENS de Lyon
Tommaso ROSCILDE, MCF - HDR, ENS de Lyon

Rapporteur
Examinatrice
Rapporteur
Examineur
Examinatrice
Directeur de thèse

Che la fortuna sia arbitra della metà delle azioni nostre, ma che ancora ella ne lasci governare l'altra metà, o poco meno, a noi.

— **N.Machiavel**

Le hasard gouverne un peu plus de la moitié de nos actions, et nous dirigeons le reste.

Résumé

Cette thèse porte sur l'étude de systèmes à N-corps à température nulle, où le système n'est alors soumis qu'aux effets quantiques. Je vais présenter ici une approche variationnelle développée avec Tommaso Roscilde, mon directeur de thèse, et Fabio Mezzacapo, mon co-encadrant de thèse, pour étudier ces systèmes.

Cette approche se base sur une paramétrisation de l'état quantique (dit Ansatz) à laquelle on applique une procédure d'optimisation variationnelle lui permettant de reproduire l'évolution d'un système soumis à l'équation de Schrödinger, tout en limitant le nombre de variables considérées.

En considérant une évolution en temps imaginaire, il est possible d'étudier l'état fondamental d'un système. Je me suis ainsi intéressé à un modèle de chaîne XX de spins $1/2$, dont les corrélations à longue portée demandent une attention particulière dans la construction de l'Ansatz variationnel, et j'ai ainsi adapté notre approche pour reproduire au mieux les corrélations et l'intrication du système. Je me suis ensuite intéressé au modèle J1-J2 dont la structure de signe non positive des coefficients de l'état quantique pose un défi important pour les approches Monte Carlo ; et dans laquelle la frustration magnétique induit une transition de phase quantique (d'un état aux corrélations à longue portée vers un état non magnétique avec formation d'un cristal de liens de valence).

Je me suis enfin intéressé à l'évolution temporelle d'un système à N-corps à partir d'un état non stationnaire. J'ai pu étudier la capacité de notre approche à reproduire la croissance linéaire de l'intrication dans le temps, ce qui est un obstacle fondamental pour les approches alternatives telles que le groupe de renormalisation de la matrice densité.

Mots-clés : système à N-corps, frustration magnétique, Ansatz variationnel, problème du signe, entropie d'intrication, corrélations, quench quantiques

Cette thèse a été effectuée au Laboratoire de Physique de l'ENS de Lyon (UMR CNRS 5672), 46 allée d'Italie, Lyon, France.

Correlations, entanglement and time evolution of quantum many body systems : a variational study

This thesis presents a study of quantum many-body systems at zero temperature, where the behavior of the system is purely driven by the quantum effects. I will introduce a variational approach developed with Tommaso Roscilde, my PhD supervisor, and Fabio Mezzacapo, my co-supervisor, in order to study these systems.

This approach is based on a parametrisation of the quantum state (named Ansatz) on which we apply a variational optimisation, allowing us to reproduce the system's evolution under Schrödinger's equation with a limited number of variables.

By considering an imaginary-time evolution, it is possible to reconstruct the system's ground state. I focused on $S=1/2$ XX spin chain, where the long-range quantum correlations complicate a variational study ; and I have specifically targeted our Ansatz in order to reproduce the correlations and the entanglement of the ground state. Moreover I considered the antiferromagnetic $S=1/2$ J1-J2 spin chain, where the non-trivial sign structure of the coefficients of the quantum state introduces an important challenge for the quantum Monte Carlo approach ; and where the magnetic frustration induces a quantum phase transition (from a state with long range correlations to a non-magnetic state in the form of a valence-bond crystal).

Finally I focused on the time evolution of a quantum many-body system starting from a non-stationary state. I studied the ability of our approach to reproduce the linear increase of the entanglement during time, which is a fundamental obstacle for other approaches such as the density-matrix renormalization group.

Key words : Many body system, Variational Ansatz, Entanglement entropy, Quantum quench, Magnetic frustration, Sign problem, Correlations

Remerciements

*Ιδου ερχομαι ταχυ, και ο μισθος μου μετ
εμου, αποδουναι εκαστω ως το εργον
εστιν αυτου*

— **Apocalypse de Saint-Jean, XXII, 12**

Oui, je viens bientôt, et avec la rétribution qui est mienne
pour rendre à chacun selon ses oeuvres.

Je tiens en premier lieu à remercier (je n'ai pas compté, mais ce mot va revenir un nombre assez colossal de fois dans ces quelques lignes, alors ne prenez pas ombrage des répétitions) celui qui m'a accompagné tout au long de ces trois années, mon directeur de thèse, Tommaso Roscilde. Merci pour avoir été présent et m'avoir guidé dans ma recherche. Grâce à toi j'ai beaucoup appris, tant sur les approches (et non algorithmes !) variationnels et leur utilisation dans l'étude des systèmes à N-corps que sur le fonctionnement de la recherche en général. Tu as su me laisser beaucoup de liberté quand je le souhaitais pour fouiller, décortiquer, creuser, tout en étant présent lorsque j'avais besoin de ton aide pour avancer. Tu as toujours pris le temps de répondre à mes questions, qu'elles soient naïves ou complexes sans me juger et toujours dans le but de m'aider. C'est une chose qui te semble probablement normale, et dans un sens ça l'est, après tout, bien que faisant suite à un master, une thèse reste un apprentissage. Cependant cette attitude d'écoute et de bienveillance de la part du directeur de thèse, plus que la chance ou même les compétences du thésard, est le plus souvent ce qui fait la différence entre une thèse qui se passe bien et une thèse qui se passe mal et ne serait ce que pour ça, je tiens profondément à te remercier. De plus, et c'est un peu lié, mais je te suis également particulièrement reconnaissant de m'avoir laissé passer le temps que je considérais nécessaire à mes enseignements, il était très important pour moi pendant ma thèse de passer du temps pour m'intéresser tant à l'enseignement qu'à la recherche, d'expérimenter les deux et grâce à toi, je peux aborder la question de ce que je souhaite faire par la suite bien plus sereinement. Au final, j'ai vraiment eu l'impression de travailler non pas pour toi mais avec toi et ça a rendu ces trois années particulièrement gratifiantes.

I would want to acknowledge Fabio Mezzacapo, who was a huge help during my thesis. These words were written a few months before the end of my thesis that's why I wrote it in english even if now you are quite fluent in french. Your mastering in EPS methods and computation in general helped us to work faster and more efficiently than what I could expect. You came in the lab at a point where we were completely stucked and thanks to you we overcome the difficulties we had and I had the time to work on what allowed me to write the last chapter of my thesis. Thank you for your help, for the time you took to talk with me about physics and for your kindness.

Je souhaite remercier le PSMN pour m'avoir permis d'utiliser leurs ressources et surtout Michel qui m'a permis de comprendre comment utiliser les calculateurs et sans qui je serai toujours en train de faire tourner mes calculs sur mon ordinateur. L'entente entre nous n'a pas toujours été au beau fixe, j'avoue avoir été relativement refroidi par le regard de mépris que j'ai reçu lorsque j'ai avoué ne pas travailler sur Linux mais sous Windows et ne pas vraiment avoir tenté de nouvelle discussion après ça. Je regrette cependant énormément ce manque de communication qui a sûrement rendu plus difficile mon utilisation de ces ressources et je garde une certaine amertume du shutdown arbitraire de nombreuses queues de compilation et de nombre de mes programmes sans aucun avertissement ou information, ni avant, ni pendant, ni après ce fameux shutdown et ce quelques jours avant le rendu de mon manuscrit, le dépit que j'ai ressenti à cet instant n'avait aucune limite. Puisque je parle de programmation, je profite pour remercier Géraldine, Pauline et Thibault qui m'ont apporté leurs conseils et leur aide en programmation que ce soit python ou unix, m'ont fait découvrir ce qu'est un débogueur, chose qui m'a été d'une aide précieuse lors de ma thèse. Mon seul regret à ce propos est de ne pas avoir suivi leur conseil assez tôt, notamment dans le nom des programmes et des fichiers de résultats, j'ai payé cher cette erreur lors de la phase de rédaction.

Je remercie également l'ensemble du jury, d'une part d'être venu assister à ma soutenance et d'autre part pour les discussions que nous avons pu avoir pendant la phase de questions et après la soutenance. J'avouerais avoir beaucoup appréhendé cette séance de questions, mais cela s'est avéré être une discussion constructive et intéressante qui a apporté un certain nombre de pistes qui seront intéressantes à aborder par la suite. Je tiens plus particulièrement à remercier les rapporteurs de ce manuscrit qui m'ont apporté des corrections tant sur la forme que sur le fond, et qui nous ont permis de clarifier ou de développer certains points qui restaient encore confus ou incomplets lors de la première version.

Plus généralement, j'aimerais remercier l'ensemble des membres du laboratoire pour l'ambiance agréable qui y règne. Nombreux sont ceux qui disent que le labo est l'un de ceux les plus agréables dans lequel ils ont travaillé, j'avouerais que j'ai assez peu de points de comparaison, mais ce qui est sûr, c'est que j'y ai passé trois superbes années. Je remercie particulièrement le secrétariat, Camille, Fatiha, Laure, Laurence

et Nadine, qui écluent un boulot absolument dément et m'ont été d'une aide précieuse à de nombreux moments de ma thèse. Je n'ai pas très envie de me lancer dans une énumération longue de noms, d'autant que j'oublierai probablement beaucoup de gens qui mériteraient d'être remerciés, alors d'une façon assez générale, je tiens à remercier en premier lieu tous les gens avec qui j'ai pu discuter lors des pauses déjeuner (40 c'est 40, les vrais sauront), les pauses café, les pauses 'je suis en train de péter un câble parce que mon code ne compile pas et je suis sûr que c'est encore une saloperie d'indice qui n'est pas au bon endroit et j'ai besoin d'aller discuter avec quelqu'un sinon je vais devoir choper une hache et agresser sauvagement mon ordinateur', pour toutes ces discussions, parfois sérieuses, parfois moins, parfois professionnelles, parfois moins, qui ont participé à rendre mon passage au labo si agréable.

Il y a cependant quelques personnes que je souhaite remercier nominativement et vu que ces quelques pages m'appartiennent totalement, et que toi lecteur, il est fort probable que ce soit les seules que tu souhaites réellement lire, je ne vais pas hésiter à délayer. Sache cependant qu'au moment où je commences à écrire ces lignes, je n'ai pas encore commencé la rédaction de ma thèse et qu'il est probable que j'ajoute des add-on au fur à mesure que ma santé mentale diminuera pour augmenter le nombre de pages du présent manuscrit, pour le simple plaisir de pouvoir relire ce texte plus tard et m'amuser en me remémorant avec nostalgie ces moments de douce folie. J'effectue cependant une dernière relecture avant le dépôt final, et même si tu peux en douter, j'ai quand même censuré quelques passages par soucis de bienséance.

Bref, comme il est de coutume, mais aussi parce que j'y tiens, je souhaite remercier mes anciens cobureaux. Arnaud pour ton manque d'empathie et ta fascination pour l'histoire récente de l'Allemagne desquelles ont découlé de nombreuses discussions d'une morale particulièrement discutable mais toujours aussi enrichissantes et agréables, mais aussi pour les tatanes qu'on a pu échanger, ta maîtrise de l'étranglement sanguin est juste magique. Clément je n'ai malheureusement que peu échangé avec toi, je garde cependant un très bon souvenir de ces rapides échanges ponctués par des petites phrases taquines d'une efficacité redoutable. Irénée, j'ai adoré t'avoir comme collègue, discuter avec toi était très agréable et enrichissant, tu es particulièrement doué dans ton domaine et nos discussions m'ont beaucoup aidé à défricher le terrain lors du début de ma thèse. Valentin, ton excentricité sans égale donnait une touche de folie et de mystique à chacune de mes journées de travail. Yannick, ta bonne humeur, ta motivation et ton courage sont remarquables, j'ai adoré les discussions qu'on a pu avoir tant sur la société que sur la physique ou les mathématiques, tu as été d'une aide précieuse pour le TD de géométrie riemanienne que je me suis retrouvé à assumer presque par hasard, sans toi la quantité de travail à abattre aurait été encore plus déraisonnable, et j'ajouterai une mention spéciale à cette soirée anthologique avec Charles-Édouard qui a commencé par la simple question "pourquoi le ciel est bleu ?" et a méchamment dérapé ainsi que pour cette quantité de gaufres liégeoises et les

discussions politiques qui vont avec. Thibaud, j'ai apprécié les discussions que l'on a pu avoir au boulot ou en dehors, ton calme et ton appétence pour les petites plaisanteries glissées discrètement étaient particulièrement agréables, et au passage, je te ferai savoir si j'ai du mal à obtenir ma dispo, pas de soucis (trois mois plus tard, je ne comprends plus cette private joke, mais je la laisse au cas où si ça te dit quelque chose). Lavi, you are a really nice people, thanks for the indian and italian dishes you let me taste, thanks for the few discussions we had and always trying to understand my poor english even if it is sometimes a really hard task and for all the evening you left the office after me so that I didn't feel too lonely during the writing part of my thesis. Dario, we have talked only a few, maybe the english didn't help us to talk a lot together but unfortunately my Italien is really really bad as you will read soon, but you were nice. Et Raphaël, tout d'abord passager clandestin puis cobureau officiel, merci pour avoir été une bibliothèque python de folie et désolé d'en avoir abusé, d'avoir écouté tant de mes délires abscons dont l'utilité était disons discutable que ce soit sur ma recherche, où je dois avouer que je t'ai par moment totalement utilisé comme caisse de résonance, ou sur d'autres sujets, tu as toujours cherché à comprendre mes élucubrations et m'as aidé à comprendre pas mal de choses, merci pour ta confiance et pour les discussions qu'on a eu ensemble. Et pour finir je tiens à remercier Xian Zhiwu et Tsushigumo qui ont su apporter de la vie à notre bureau et ont participé à le décorer. Même si la première souffre terriblement de la chaleur et agonise dans un coin et que l'autre a fini par disparaître sans laisser de trace derrière elle.

Je souhaiterais ensuite remercier mes compagnons d'infortune dans les diverses tâches administratives qu'on m'a attribué de façon semi-consentantes durant ma thèse et que j'ai transmises de façon je l'avouerais également semi-consentante. Merci, Géraldine, de t'être chargée de la quasi-totalité des réunions au Conseil de Laboratoire, ce qui m'a épargné pas mal de réunions auxquelles je n'avais vraiment pas envie d'aller, et plus encore merci pour toutes les discussions que nous avons eu, bien que nos avis divergent bien souvent et toute l'aide que tu as pu m'apporter dans beaucoup trop de domaines pour que je puisse tous les citer. Victor et Raphaël, merci de m'avoir épaulé dans la commande, la distribution du café et dans l'entretien de la machine, c'était agréable de vous avoir avec moi dans cette galère, même si étant mesquin de nature je tiens à insister une nouvelle fois dans ces lignes sur la fuite éhontée du second de vous deux lors de la négociation pour l'achat de la nouvelle machine du M7 me laissant seul à affronter la commerciale. Et merci à Simon d'avoir repris le flambeau, et désolé de t'avoir passablement forcé la main, je crains fort que ce soit un peu une tradition au labo. Et pour finir, merci Marine de t'être occupée de faire renaître la tradition des séminaires des doctorants, j'ai longtemps été partagé entre mon envie de poursuivre cette coutume et ma répugnance à l'égard des responsabilités (et mon manque de temps libre accessoirement), et ton mail est arrivé pile au bon moment pour résoudre mon dilemme. Je te suis également reconnaissant de m'avoir laissé carte blanche pour un talk sur un sujet sortant pas mal de mon sujet de recherche et passablement clivant,

j'ai adoré préparer et présenter ce talk, j'espère que cela aura été aussi intéressant pour vous que pour moi.

Pour continuer sur un sujet s'éloignant de ma recherche, je tiens à remercier Natalia et Sébastien de m'avoir permis de donner un cours magistral à l'ENS de Lyon. J'avouerai que lorsque j'ai envoyé un mail pour demander ce cours, j'avais vraiment peu d'espoir de l'avoir, mais au final vous avez été suffisamment déraisonnables pour me le confier et j'ai adoré m'en occuper et le gérer de A à Z et j'espère avoir pu apporter autant aux étudiants, qu'ils m'ont eux même apporté. Bien que je garde une certaine rancune vis-à-vis de certains TDmen qui ne m'ont clairement pas facilité la tâche, je suis reconnaissant envers la plupart pour votre travail et l'aide que vous avez apporté aux étudiants. Je remercie également Sébastien, pas le même mais ils se reconnaîtront, pour l'aide qu'il m'a apporté à la construction du cours et les notes qu'il m'a prêtées et m'ont permis de gagner pas mal de temps dans la préparation de mes cours, me permettant de développer bien plus cet enseignement que je n'aurais pu le faire en partant de zéro. Je suis également reconnaissant, bien qu'ils ne liront probablement pas ces lignes, aux différents orateurs des conférences sur l'enseignement auxquelles je suis allé, ainsi qu'aux nombreuses personnes avec qui j'ai discuté d'enseignement, vos différentes expériences m'ont appris beaucoup de choses que j'ai tenté d'incorporer dans mes enseignements et je ne vous promets pas que mes étudiants éprouvent la même gratitude que moi à votre égard, mais ça m'a permis de beaucoup m'améliorer en tant qu'enseignant. J'en profite également pour remercier l'équipe de Aachen (et faire un peu de pub) pour le travail titanesque qu'ils ont dû fournir pour développer une application particulièrement intéressante : Phyphox, j'ai essayé de m'en servir au mieux pendant mes cours, mais je sous utilise encore le potentiel de cette application pour l'enseignement de la physique. Je remercie également Cendrine pour m'avoir impliqué dans la mise en place du soutien en maths en L3 et m'avoir conservé sa confiance pour que je poursuive le cours d'outils mathématiques une année supplémentaire. Et bien sûr, je souhaite remercier Jérôme Calvet qui a porté ce département avec une efficacité redoutable pendant toutes les années où j'y ai été en tant qu'étudiant ou en tant qu'enseignant, tu as su mettre d'une aide précieuse dans les deux cas.

Je tiens à remercier mes différents partenaires d'entraînement, que ce soit l'escrime que j'ai malheureusement finie par délaisser au profit du karaté, le mma ou le karaté, je pense tout particulièrement à Mathieu qui m'a permis de me surpasser et de repousser mes limites au delà de ce que je pensais être capable, je doute de pouvoir retrouver un entraîneur aussi doué sur tous les domaines se rattachant au sport et aussi sympathique que toi. Je n'oublie pas non plus les membres du laboratoire qui ont tapé avec moi lors des vacances, lorsque les entraînements officiels se faisaient rares. À ces occasions, j'ai pu m'essayer à la boxe anglaise, au kung fu et j'ai également pu découvrir le karaté et décider de m'y mettre. Merci pour ces heures, ces courbatures et ces bleus qui ont contribué à me calmer et à me défouler, me permettant de garder un certain équilibre

mental même vers la fin de ma thèse, sauf bien sûr le direct pleine puissance juste sous le plexus contre lequel je garde une certaine rancœur, il se reconnaîtra.

Pour continuer sur les activités plus ou moins en dehors du laboratoire, je souhaite remercier les membres du labo junior, et notamment leurs présidents successifs, pour avoir fait confiance à un théoricien pour manier des marteaux et jouer avec de l'eau. Les quelques présentations que j'ai pu faire devant divers publics étaient vraiment super, voir les yeux des petits briller, le visage des moins petits totalement blasé ainsi que discuter d'énergie libre avec les parents était vraiment agréable. Et merci à ceux avec qui j'ai travaillé au BUP qui va sortir sur les grosses vagues, je pense que c'est à ce jour la seule manip de méca flu que j'ai fait de ma vie, c'était amusant. J'ai également pu participer avec vous à la fête de la science trois années de suite et ce fut toujours aussi agréable, bien que rien n'arriva à la cheville de la réplique sur la réparation de voiture quantique. Merci également à Caroline pour tout le boulot que tu as fourni et l'aide que tu nous as apporté (principalement en main d'œuvre que tu nous as envoyé), ce qui a rendu la logistique beaucoup plus facile, et plus généralement je te suis reconnaissant pour tout ce que tu as fait lors de ma thèse, pour l'attention que tu as porté et porte encore à de nombreux thésards, sans toi quelques thèses se serait bien plus mal passées, qu'il en soit conscient ou pas, ce labo te doit beaucoup.

Plus spécifiquement, je tiens encore (ouais, vous n'êtes pas encore à la fin de ces remerciements, mais si vous n'avez pas encore été cité, continuez, vous finirez peut être par trouver votre nom) à remercier certains et certaines avec qui j'ai passé du temps hors du laboratoire et que je n'ai pas encore cité. Je remercie les quelques concurrents sur Duolingo, l'affrontement fut particulièrement intense, même si la mode est maintenant passée. *Voglio scrivere italiano ma scrivo male italiano*, j'admets donc totalement ma défaite face à toi Alex, et je tiens à te dire que j'ai énormément apprécié les moments qu'on a passé à discuter autour d'un café ou d'une bière. *Ich will, nur um in vier Sprachen in diesem Text zu schreiben, Ariane in Deutsch bedanken. Wir hatten sehr ungewöhnliche Diskussionen, aber das macht mich so viele Spass. Ich glaube, dass so viele Themen zu verrückt sind, um darüber hier zu sprechen. Aber ich will betonen, dass ich keine Ahnung habe, warum ich wie ein Gürteltier aussehe. Dennoch muss ich anzuerkennen, dass ein Gürteltier viel schöner als ein Fingertier ist.* Puisqu'on parle d'allemand, je ne peux m'empêcher de passer à Charles-Édouard pour t'adresser un grand merci pour ces quelques années et ces pauses café d'anthologie à parler de diverses théories du complot plus ou moins pétées, bien que ce genre de sujets m'ait toujours intéressé, tu m'y as poussé encore plus. Certains pourraient y voir un mal, mais en vérité c'est grâce à cet intérêt personnel que je me suis de plus en penché sur la zététique et que je me suis mis à m'intéresser à comprendre comment on établissait un raisonnement scientifique et quelles étaient les différences réelles entre une pseudo-science et une science. Tu as encouragé en moi cette curiosité qui maintenant forme un pan important de mon approche de l'enseignement et de la

recherche. Clément, nouvellement arrivé au laboratoire, tu as brillé par ton humour magistral (et je ne dis pas ça parce qu'on a le même humour), discuter de la thèse avec toi m'a fait énormément de bien, ça m'a permis de prendre du recul par rapport à beaucoup de choses et d'assainir au moins un peu ma fin de thèse. Hélène, je te serai éternellement reconnaissant de m'avoir ouvert ta salle de manip pendant les jours de canicule, je ne sais pas comment j'aurais pu supporter cette période sans ça, tu m'as permis de ne pas dépasser les 33 degrés dans mon appartement. Merci également pour toutes les discussions qu'on a eu ensemble et m'avoir donné une excuse pour me remettre à l'écriture, cela me manquait terriblement. Lucas, merci pour ta bonne humeur, ton entrain en toute circonstance, ta disponibilité, tu es toujours présent lorsqu'il s'agit de sortir ou de faire un truc, sauf bien sûr aller randonner pendant deux jours alors qu'on ne te prévient que la veille, mais vu que j'ai opté pour la même réponse que toi, je ne peux pas vraiment te critiquer à ce sujet. Pauline, tu as une façon de penser et de voir le monde qui est, je trouve, très différente de ce dont je peux avoir l'habitude, c'est parfois déroutant, mais toujours enrichissant, tu es quelqu'un de courageux et de résistant à un point que cela en est impressionnant. Richard, un énorme merci pour ce template de folie, sur lequel tu as passé beaucoup de temps mais qui est je dois l'avouer juste impeccable, j'espère qu'il deviendra un canon du labo, ce serait un hommage à la hauteur du travail que tu as fourni pour y aboutir, et pour ces années qui étaient totalement folles, je ne sais pas quelle part est due à ta bonne humeur légendaire et quelle part est due à la folie qui t'a gagné au fur et à mesure de ta longue rédaction, mais je me suis beaucoup amusé à tes côtés. Samuel, merci pour cette relecture attentive et pointilleuse de mon cv et lettre de motivation ainsi que les discussions à propos des différentes candidatures de ce début d'année, ça m'a été particulièrement utile et m'a aidé à avoir une approche plus juste du vrai monde. Merci à Samuel pour ta bonne humeur et ton flegme à tout épreuve qui sont pour le moins rafraîchissants et passablement surréalistes, j'avouerais que n'ayant pas été retenu pour le stage de secours en milieu hostile, avec ton séjour dans l'arctique tu auras fait le truc le plus badass au labo, plus que CEL qui a failli se faire bouffer par des piranhas. Merci à Samuel, oui, il y en a trois, mais ils se reconnaîtront, pour son accueil chaleureux en Turquie qui a agréablement brisé la monotonie de ces trois ans de thèse, pour ton attention et ces discussions tant sur la politique, l'enseignement et l'avenir. Thibaut, grâce à toi j'ai découvert la suze, à savoir si je dois t'en remercier ou pas je laisse au lecteur se faire un avis sur la question, mais toujours est il que je te suis reconnaissant de t'être inquiété pour moi à un moment où ma thèse devenait un peu lourde et merci pour les soirées auxquelles j'ai participé. Timothée, ton flegme et ton humour sont particulièrement agréables, merci pour ton soutien pendant cette randonnée absolument folle, c'était la première fois que je marchais vraiment en montagne et sans toi, ainsi que Géraldine et Lucas, la redescente aurait été bien plus rude. Vincent, me faire découvrir le karaté était vraiment une idée judicieuse, merci également pour les discussions qu'on a eu sur l'enseignement, tu m'as fait découvrir les polys à trous et je trouve que c'est vraiment une méthode de travail agréable et

efficace que je m'emploie à utiliser au mieux, tu m'as également beaucoup aidé à m'y retrouver dans ce zbeul qu'est l'éducation nationale en m'initiant aux arcanes de l'administration, ces discussions m'ont aidé à mieux m'y retrouver et merci également pour toutes ces soirées et discussions. Je suis également reconnaissant au groupe dont on ne doit pas prononcer le nom pour sa bonne humeur et son aide depuis sa création et j'espère qu'il perdura encore longtemps, nous permettant de disserter toujours plus pour enfin pouvoir trancher quant à savoir si Jean Lassalle ressemble plus à un requin ou un dauphin. Je tiens également à remercier les trois individus relativement cinglés qui ont accepté de me suivre un peu l'arraché dans un voyage en Europe de l'est pour fêter la remise de mon manuscrit, j'avais vraiment besoin de vacances et je n'aurais pu rêver mieux que cette semaine totalement folle.

Et pour finir, j'espère que tout cet énoncé ne t'ennuies pas trop ô lecteur, la longue liste des remerciements, je tiens à remercier ceux qui ont été là pendant tout le temps qui a précédé ma thèse et qui m'ont aidé à me construire et à me lancer dans cette folle entreprise. Merci à Goce (te revoir à Grenoble était vraiment cool) et Marc qui m'ont accompagné dans mon voyage incertain de la filière générale vers la spécialisation, notamment au travers de séances de jdr mythiques. Merci à Charly, Élie, Orso et Sébastien pour leur amitié lors de mes rudes années de prépa, bien que certains moments restent un peu tendancieux et que la prépa ne soit pas le moment le plus doux de l'existence, vous m'avez aidé à en garder un assez bon souvenir. Merci à Adrien, Robin, Rose, Stéphanie et bien d'autres que j'oublie pour m'avoir rappelé qu'il existait une vie en dehors de la prépa. Merci à Greg, Jonathan, Pierre, Thomas pour cette année de L3 simplement insensée et pour l'année d'agreg où on a souffert ensemble. Merci à Albert, Antoine, Ariane, Nicolas, Théo, Thomas de m'avoir accueilli si chaleureusement en physique malgré mon passé de matheux et pour cette année de M1 si agréable. Merci à Rodolphe que j'ai rencontré par un hasard complet et qui m'a accompagné dans une période de ma vie pleine de rebondissements et d'étrangetés. Merci à Guillaume, sans qui la dernière année de master aurait confiné à la torture, ainsi que pour ces discussions désabusées mais apaisantes sur notre avenir, pour partager les mêmes aspirations que moi et affronter les mêmes difficultés face au fonctionnement de l'éducation française. Et bien sûr, un énorme merci à ma famille qui est à ma côté depuis aussi longtemps que je m'en souviens, qui me soutiennent du mieux qu'ils peuvent, qui se sont inquiétés pour moi dans les moments difficiles, m'ont conseillé et aidé quand j'en avais besoin et sans qui je ne serais probablement pas arrivé à bout de ces années bien trop nombreuses d'étude.

Il y a bien sûr énormément de gens que j'ai probablement oublié, par manque de temps pour y réfléchir ou de place pour l'écrire, et j'en suis sincèrement désolé. Il y a bien sûr beaucoup de choses plus personnelles qui ne peuvent pas être décemment mentionnées sur un document si publique, mais sachez que je vous en suis malgré tout particulièrement reconnaissant. Et il y a également des personnes qui ont été oubliés

volontairement, mais insister plus là dessus serait bien trop mesquin, et bien que l'on m'ait poussé à le faire, je n'ai pas très envie de faire des non remerciements.

Ces remerciements sont sans doute très longs, et je trouverai assez déroutant que vous soyez venu à bout de toutes ces lignes, mais d'une part, j'adore écrire, je me suis beaucoup amusé à écrire tout ça et j'espère que cela vous aura plus également, même si le style est peut être un peu trop pédant, et d'autre part, je trouve qu'ils sont encore bien trop courts pour exprimer la gratitude que je ressens envers les personnes qui y sont mentionnées et celles que j'ai malheureusement oubliées. La thèse (et particulièrement la rédaction) est un moment difficile, pas insurmontable et je reste très heureux de ces années que j'ai vécu, j'ai beaucoup appris, j'ai beaucoup changé et d'une façon qui me plait et je ne regrette rien, cependant il faut bien se rendre compte, et je tiens énormément à l'écrire quelque part parce que j'ai mis du temps à le comprendre. Si vous lisez ces lignes et que je ne suis pas dans le labo pour râler à ce propos, j'apprécierai que vous aidiez les autres gens qui me suivront à le comprendre, une thèse c'est épuisant. Le plus clair du temps, rien ne fonctionne, on patine, pour se rendre compte au final que ce sur quoi on a coïncé pendant des semaines était en fait évident. Pour un chercheur ce que je dis est normal et il ne voit sûrement pas l'intérêt de le mentionner, mais pour quelqu'un qui sort d'un master et qui n'a comme expérience que deux stages où on lui a plus ou moins prémâché le travail, ça l'est beaucoup moins. Il est difficile de faire la part des choses entre ses compétences personnelles et la difficulté de ce que l'on tente de réaliser, il est au contraire facile de se croire mauvais du fait de sa difficulté à avancer, surtout quand son projet de thèse tout entier se retrouve bloqué pendant des mois voire des années. Une thèse c'est en grande partie un combat contre soi-même pour continuer à avancer, pour ne pas se dévaloriser et ne pas arrêter de croire en soi, car lorsque l'on commence à se croire mauvais, on entre dans un cercle vicieux duquel il est difficile de sortir. De mon point de vue, c'est ça le plus grand danger d'une thèse, affronter ces périodes de vide lors de la thèse et ne pas se laisser bouffer par elle et c'est pour moi l'un des plus important boulot d'un directeur ou directrice de thèse que de nous en préserver. Le reste n'est affaire que de chance, de rencontres, de discussions, de réflexions, de physique, de pauses café et d'enseignement, bref, le reste n'est que pur plaisir. Et le moment où j'ai réalisé ça, ma thèse est devenue beaucoup plus intéressante et agréable. Bref, j'espère que ce petit témoignage pourra en aider certains et certaines, merci pour votre attention et je vous laisse avec le fruit d'une grosse partie de mon travail en espérant qu'il vous intéresse.

Table des matières

Résumé	v
Remerciements	vii
Introduction à l'intrication en matière condensée	1
1 Résoudre le problème à N corps	7
1.1 Intrication dans les états quantiques à N -corps	8
1.1.1 Résolution exacte	8
1.1.2 Quantification de l'intrication par l'entropie.	10
1.1.3 Comportement de l'entropie sur l'espace de Hilbert.	13
1.2 Structure du signe des états quantiques et conséquences algorithmiques	16
1.2.1 Structure du signe des états fondamentaux	17
1.2.2 QMC et problème du signe	20
1.2.3 Lien entre intrication et structure de signe	22
1.3 Méthodes variationnelles	23
1.3.1 Explication de la méthode	24
1.3.2 États MPS et algorithmes associés	25
1.3.3 Projected BCS	31
2 États à plaquettes intriquées	33
2.1 <i>Ansatz</i> variationnel et algorithme d'optimisation	34
2.1.1 Paramétrisation de l'état variationnel	34
2.1.2 Calcul des quantités physiques	38
2.1.3 Principe variationnel et évolution en temps réel et imaginaire.	41
2.2 Application à l'état fondamental de la chaîne XX	47
2.2.1 Résolution exacte	47
2.2.2 Fonctionnement de l'algorithme d'optimisation variationnelle	50
2.2.3 Comparaison avec le résultat exact	54
2.2.4 Contenance en information	57
2.3 Entropie d'intrication d'un état LR-EPS aléatoire	60

3	Système quantique frustré : cas de la chaîne $J_1 - J_2$	63
3.1	Chaîne $J_1 - J_2$	64
3.1.1	Cas classique $S = \infty$	64
3.1.2	Diagramme de phases quantique $S = \frac{1}{2}$	65
3.2	Approche EPS	67
3.2.1	Structure des coefficients de l'Ansatz 2LR-EPS	67
3.2.2	Reproduction de la structure du signe par l'Ansatz 2LR-EPS	68
3.2.3	Généralisation de l'Ansatz LR-EPS	69
3.3	Résultats	70
3.3.1	Validation de l'Ansatz : Comparaison avec le résultat exact	70
3.3.2	Reproduction des propriétés physiques sur des réseaux de plus grande taille	73
4	Évolution temporelle suite à un <i>quench</i>	79
4.1	Évolution d'un système suite à un <i>quench</i>	80
4.1.1	Modèle XX en champ alterné et <i>quench</i> à partir d'un état de Néel	80
4.1.2	Relaxation vers l'équilibre : Ensemble de Gibbs standard/généralisé	81
4.2	Approche EPS	85
4.2.1	Choix des variables	85
4.2.2	Conservation de l'énergie	87
4.2.3	Reproduction de la fonction d'onde fermionique	87
4.3	Évolution temporelle des états EPS	90
4.3.1	Corrélations fermioniques	90
4.3.2	Aimantation uniforme et alternée	92
4.3.3	Fonctions de corrélation	94
4.3.4	Entropie d'intrication	97
4.4	Variation du champ magnétique	98
	Conclusion et quelques perspectives	103
A	Calcul de l'erreur	117
B	Calcul de la fonction de corrélation de la chaîne XX	119
C	Calcul de l'entropie d'intrication de la chaîne XX	121
D	Évolution de l'aimantation alternée suite à un <i>quench</i>	125
E	Évolution des fonctions de corrélation suite à un <i>quench</i>	127
F	Évolution de l'entropie d'intrication suite à un <i>quench</i>	131

Introduction

*L'art naît de contraintes, vit de lutttes, meurt de
liberté*

— A. Gide

Au début du XX^e, la théorie de mécanique quantique commence à se dessiner par une suite d'avancées comme la dualité onde/corpuscule de la lumière et la notion de quantum de lumière élaborées par Einstein en 1905 [34] ou encore le modèle de l'atome d'hydrogène par Bohr en 1913 [80]. Mais c'est surtout dans les années 1920 que cette construction s'accélère et donne lieu à ce que l'on appela plus tard, la révolution quantique, notamment par l'introduction de la théorie matricielle par Heisenberg en 1925 [53] et l'interprétation probabiliste de Born en 1926 [16]. C'est cette interprétation qui fut critiquée par Einstein par la fameuse citation "*Jedenfalls bin ich überzeugt, dass der Alte nicht würfelt.*" (Je suis convaincu qu'il ne joue pas aux dés.) et qui fut suivie par les débats entre Bohr et Einstein qui ont grandement participé à l'interprétation de la théorie de la mécanique quantique telle que nous la concevons aujourd'hui. Plus particulièrement, nous allons nous intéresser à l'un de ces débats qui fut à l'origine du paradoxe EPR, élaboré par Einstein, Podolski et Rosen en 1935 [35], et nous permettra de mettre en avant la complexité d'une notion qui est au cœur de ce manuscrit et du sujet dans lequel il s'inscrit : l'intrication.

Nous allons plus précisément nous intéresser à l'interprétation de Bohm et Aharanov de ce paradoxe [15]. Considérons deux photons dans des états de polarisation intriqués, la fonction d'onde de ce système à un temps t est décrite par la formule

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1, V\rangle |2, V\rangle + |1, H\rangle |2, H\rangle \right). \quad (1)$$

Les deux photons sont envoyés dans des directions opposées. À un temps t_0 , on mesure la polarisation du photon 1, supposons que l'on obtienne la polarisation verticale, alors, le système est dans l'état

$$|\psi(t_0)\rangle = |1, V\rangle|2, V\rangle. \quad (2)$$

On connaît alors exactement la polarisation du photon 2 qui est verticale. L'interprétation classique impose l'impossibilité d'altérer instantanément un système en en mesurant un autre. Il n'est donc pas possible que la mesure sur le photon 1 ait modifié l'état du photon 2. On devrait alors refuser l'image de l'état donné par l'équation 1, conclure que le photon 2 était déjà polarisé verticalement avant et indépendamment de la mesure du photon 1 et que les corrélations entre les mesures sur les deux photons sont de nature probabiliste, associées à une information (exprimée par des variables dites "cachées") qui a été partagée par les deux photons au moment de la préparation de leur état conjoint.

Cependant, en 1965, Bell a montré que si la théorie des variables cachées était vérifiée, les corrélations entre les photons devraient vérifier des inégalités fondamentales (inégalités de Bell [10]). Et en 1981-82, ces inégalités ont été invalidées par les expériences d'Aspect [5]. Le système de deux photons corrélés est donc exactement dans l'état superposé $\frac{1}{\sqrt{2}}(|1, V\rangle|2, V\rangle + |1, H\rangle|2, H\rangle)$, qui possède le trait caractéristique de l'intrication : la nature de superposition conjointe entre états compatibles de deux ou plus degrés de liberté.

La nature de l'intrication est d'une part difficile à appréhender intuitivement ; d'autre part, cette propriété physique devient de plus en plus importante dans le domaine de la physique à N corps. En effet, pendant longtemps, une façon efficace de décrire les nouveaux états de la matière émergeant des propriétés quantiques a été, paradoxalement, d'utiliser une description en termes de champs classiques. Un exemple notable est le condensat de Bose-Einstein (BEC), prédit en 1925 par Einstein et Bose [33] et mis en évidence expérimentalement par Cornell, Wieman et Ketterle en 1995 [3]. Dans ce cas, le condensat est décrit par une fonction d'onde macroscopique $\psi_0(\mathbf{r})$ telle que les corrélations $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}') \rangle$ de l'opérateur de champ bosonique $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ convergent pour une distance $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ vers une densité $n_0 = \psi_0^*(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}')$, mettant en évidence l'émergence d'une cohérence quantique macroscopique. La dynamique de la fonction d'onde macroscopique $\psi_0(\mathbf{r})$ (que l'on peut interpréter comme valeur moyenne du champ bosonique ou "champ moyen", $\langle \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle = \psi_0(\mathbf{r})$) est alors régie par l'équation de Gross-Pitaievski [48][81].

Une approche similaire est particulièrement efficace pour l'étude de nombreux systèmes quantiques à N corps, comme par exemple les matériaux supraconducteurs, où le paramètre d'ordre est la moyenne de l'opérateur de création de paire de fermion décrit par l'équation de Ginzburg-Landau [58] ; ou encore les systèmes magnétiques de spins où le paramètre d'ordre est la valeur du spin en chaque site.

Prendre la description champ moyen à la lettre signifie considérer que le champ quantique (bosonique, fermionique ou de spin) possède un état bien défini à chaque point d'espace, paramétré par le champ moyen. Cette description néglige alors l'existence de toute forme d'intrication entre différents degrés de liberté spatiaux.

Pour aller plus loin dans la description de ces systèmes, on peut considérer des fluctuations quantiques harmoniques du champ autour de la valeur moyenne : on suppose que les particules sortant du "condensat" (de Bose-Einstein dans le cas BEC, ou condensat de paires dans le cas du supraconducteur) peuvent être décrites comme un gaz de quasi-particules libres. Il s'agit de la théorie de Bogoliubov (élaborée en 1947) dans le cas du BEC [14], de la théorie Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS - développée en 1957) [8] ou encore de la théorie des ondes de spin dans le cas des systèmes magnétiques [12]. Cette description en terme de quasi particules permet également de s'intéresser à d'autres systèmes à N corps comme les liquides de Fermi décrits par la théorie de Landau (élaborée en 1956)[24]. Contrairement à la description en terme de champs classiques seuls, l'ajout des quasi-particules introduit de l'intrication dans la description de ces systèmes mais par construction elle ne remet pas radicalement en cause l'image physique donnée par l'approche champ moyen. Cependant, depuis plusieurs décennies, de nouveaux comportements de la matière ont été mis en évidence, où les fluctuations sont trop importantes pour les considérer comme une correction de la théorie de champ moyen, au point qu'il n'est même plus possible de dégager un paramètre d'ordre décrivant ces systèmes.

De nombreux systèmes quantiques 1d obéissent à un nouveau paradigme, celui des liquides de Luttinger, dont les corrélations spatiales décroissent en loi de puissance avec la distance entre les sites [46]. D'autres exemples notables de ces systèmes au comportement exotique sont les systèmes magnétiques frustrés qui peuvent admettre un état fondamental en forme de liquide de spin caractérisé par l'absence d'ordre magnétique et la présence d'intrication à longue portée ; ou encore les systèmes de fermions itinérants fortement corrélés, dont l'exemple le plus marquant est la supraconductivité à haute température critique, où des matériaux présentent des propriétés supraconductrices à des températures assez élevées et où le comportement physique du système, tel le mécanisme d'appariement ou encore la phase "pseudo-gap", reste mal compris.

L'étude de ces systèmes est particulièrement difficile : en plus de l'impossibilité de les décrire en terme de fluctuations quantiques autour d'un champ moyen, il est impossible de les résoudre exactement sauf pour des systèmes de petite taille, à cause de l'augmentation exponentielle de l'espace de Hilbert en fonction du nombre de degrés de liberté. Une façon de contourner cette difficulté est d'utiliser des outils numériques comme la méthode Monte Carlo quantique ; cependant dans le cas des systèmes de fermions fortement corrélés ou des systèmes magnétiquement frustrés, l'utilisation de cette méthode est impossible du fait du problème du signe. Les méthodes

variationnelles sont ainsi parmi les seules méthodes efficaces pouvant s'attaquer à l'étude de ces systèmes. L'intrication, dont la reproduction présente un véritable défi pour l'étude variationnelle, devient ainsi centrale pour évaluer la difficulté de l'étude de ces systèmes.

En parallèle de cette étude théorique, une autre façon efficace de s'attaquer à l'étude de des systèmes quantiques fortement corrélés est expérimentale par la réalisation des fameux "simulateurs quantiques" proposés par Feynman dans les années 80. [42]. On peut en effet ramener l'étude de ces modèles à celle de systèmes expérimentaux "simples" dont les degrés de liberté quantiques interagissent au travers d'un Hamiltonien qui peut être finement contrôlé, de façon à reproduire la physique d'autres systèmes. Par exemple, des atomes froids dans des réseaux optiques peuvent simuler des électrons dans un cristal [13].

C'est dans ce domaine d'étude à la croisée entre la matière condensée, la physique atomique et l'optique quantique que s'inscrivent les travaux présentés dans ce manuscrit, introduisant une approche variationnelle, que nous avons développée afin d'étudier des systèmes où les corrélations et l'intrication présentent un réel obstacle à l'étude théorique.

Nous verrons dans un premier chapitre, l'état de l'art de ce domaine. Nous présenterons, plus en détail, les limitations de la résolution exacte et définirons plus précisément le rôle de l'intrication dans ces systèmes au travers d'une grandeur permettant de la quantifier : l'entropie d'intrication. Nous discuterons des difficultés associées à l'étude des systèmes physiques auxquels nous nous sommes intéressés : le problème du signe et le problème de la reproduction de l'entropie sans augmentation exponentielle du nombre de variables. Le premier problème représente un obstacle fondamental pour la méthode Monte Carlo quantique, tandis que le deuxième problème se pose à l'étude variationnelle basée sur les Ansätze remarquables tels les états produit de matrice.

Dans un second chapitre, nous détaillerons l'approche variationnelle basée sur l'Ansatz des états à plaquettes intriquées que nous avons développé durant ma thèse. Nous l'utiliserons ensuite pour étudier un système physique exactement soluble dont les propriétés sont difficiles à reproduire du fait de ses corrélations décroissantes en loi de puissance et de l'intrication présente à longue portée : la chaîne XX.

Ensuite, nous le confronterons à un système plus complexe présentant une frustration magnétique : la chaîne $J_1 - J_2$. L'état fondamental de ce système présente une structure de signe bien particulière du fait des interactions magnétiques qui ne peuvent être toutes minimisées simultanément en énergie. Nous discuterons ainsi la capacité de notre approche à reproduire avec précision les résultats exacts, et à caractériser le diagramme de phases sur des systèmes de plus grande taille inaccessibles à la résolution exacte.

Pour finir, nous étudierons dans le dernier chapitre l'évolution temporelle d'un état quantique soumis à un Hamiltonien dont il n'est pas état propre. Cela nous permettra de discuter plus précisément l'habileté de notre Ansatz à reproduire l'intrication développée par l'évolution hors équilibre au sein d'un système quantique, afin d'être utilisé pour étudier l'évolution temporelle d'un état quantique.

Résoudre le problème à N corps

*Those who cannot remember the past are
condemned to repeat it*

— **G.Santayana**

Ceux qui oublient le passé se condamnent à le répéter.

Lors de ma thèse nous avons développé une approche variationnelle pour étudier l'état fondamental de systèmes de spins quantiques frustrés et l'état évolué hors équilibre de réseaux de spins interagissant. Nous allons commencer par présenter les principaux enjeux de l'étude de ces systèmes, en expliquant l'importance de l'entropie d'intrication pour décrire l'information contenue dans un état quantique. Nous verrons ensuite une propriété importante des états quantiques, la structure de signe de la fonction d'onde et discuterons en quoi la structure du signe représente un obstacle fondamental pour la méthode Monte Carlo quantique, qui est la seule méthode non biaisée et systématiquement échelonnable en toute dimension en physique quantique à N corps. Une réponse systématique à cette difficulté est alors offerte par l'approche variationnelle, nous présenterons ainsi différents Ansätze variationnels qui ont été récemment utilisés pour aborder la physique de l'état fondamental et l'évolution temporelle d'un système quantique à N corps.

1.1	Intrication dans les états quantiques à N -corps	8
1.1.1	Résolution exacte	8
1.1.2	Quantification de l'intrication par l'entropie.	10
1.1.3	Comportement de l'entropie sur l'espace de Hilbert.	13
1.2	Structure du signe des états quantiques et conséquences algorithmiques	16
1.2.1	Structure du signe des états fondamentaux	17
1.2.2	QMC et problème du signe	20
1.2.3	Lien entre intrication et structure de signe	22
1.3	Méthodes variationnelles	23
1.3.1	Explication de la méthode	24
1.3.2	États MPS et algorithmes associés	25
1.3.3	Projected BCS	31

1.1 Intrication dans les états quantiques à N-corps

Nous débuterons cette partie par expliquer la nécessité de recourir à l'outils numérique pour étudier des systèmes à N corps, et nous relierons cette difficulté à une propriété centrale des états quantiques : l'intrication. Nous verrons ensuite comment la quantifier au travers de l'entropie d'intrication. Et nous finirons par discuter le comportement de cette quantité pour différents états quantiques de l'espace de Hilbert.

1.1.1 Résolution exacte

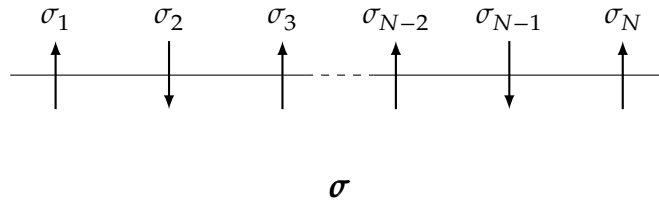


FIG. 1.1 Chaîne de N spins $\frac{1}{2}$ à conditions au bord périodiques

Commençons par poser les définitions que nous allons utiliser dans la suite du manuscrit.

Dans toute la thèse, nous nous restreindrons à des systèmes à une dimension composés de N spins $S = \frac{1}{2}$ et avec des conditions périodiques au bord. On pose $|\sigma\rangle = \bigotimes_i |\sigma_i\rangle$ où $|\sigma_i\rangle$ sont les états propres de l'opérateur S_i^z avec i un site de la chaîne. Les états quantiques $|\sigma\rangle$ sont donc liés aux différentes configurations σ de spins d'Ising le long de l'axe z et forment une base de l'espace de Hilbert des états quantiques du système, que nous appellerons la base de calcul dans la suite du manuscrit. Tout état quantique $|\psi\rangle$ de l'espace de Hilbert se décompose dans cette base sous la forme

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma} W_{\sigma} |\sigma\rangle . \quad (1.1)$$

Dans le cas d'un modèle physique, il faut rajouter les interactions qui sont décrites par un Hamiltonien \mathcal{H} . Par la suite nous nous poserons deux questions à propos de ces systèmes physiques :

- * Quel est l'état fondamental ? ie l'état minimisant l'énergie E en fonction de $|\psi\rangle$

$$E = \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} . \quad (1.2)$$

- * Comment évolue le système à partir d'un état quantique $|\psi_0\rangle$ en suivant l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \partial_t |\psi\rangle = \mathcal{H} |\psi\rangle ? \quad (1.3)$$

Méthode de Lanczos Pour étudier un modèle de spins en interaction, la méthode la plus immédiate et sûre est de diagonaliser exactement le Hamiltonien \mathcal{H} . On a alors accès à toutes les propriétés de l'état fondamental et des états excités. Pour l'étude de l'évolution à partir d'un état quantique $|\psi_0\rangle$, il ne reste qu'à décomposer cet état initial sur les états propres du Hamiltonien et reconstruire l'état évolué en modulant les phases des coefficients de la décomposition par les solutions de l'équation de Schrödinger pour chacun des états propres de cette décomposition.

Cependant, si l'on revient à la décomposition 1.1 de $|\psi\rangle$, l'état quantique est un vecteur d'un espace de Hilbert de dimension 2^N . Pour donner un ordre de grandeur, pour une chaîne de 250 sites, il faut autant de variables pour décrire un état quantique de ce système qu'il n'y a d'atomes dans l'univers visible. Ainsi, la diagonalisation exacte n'est utilisable que pour des systèmes de petite taille car très rapidement la complexité algorithmique est telle qu'il n'est plus possible de stocker l'état quantique en mémoire, ni d'effectuer les calculs en des temps raisonnables.

Néanmoins, dans la recherche du fondamental et de l'état évolué dans le temps, on n'est intéressé qu'à un état particulier, que l'on peut reconstruire en se restreignant à un sous-espace de l'espace d'Hilbert qui le contient. Cette idée est à la base de la méthode de Lanczos [57][83][86]. À partir d'un vecteur donné $|\phi_0\rangle$, la méthode de Lanczos permet de construire une famille de vecteurs orthogonaux base de l'espace de Krylov $\{|\phi_0\rangle, \mathcal{H}|\phi_0\rangle, \dots, \mathcal{H}^m|\phi_0\rangle\}$, l'espace ainsi considéré étant de dimension le nombre d'itérations de la méthode. Il est alors possible de réécrire le Hamiltonien dans cette base sous la forme d'une matrice tridiagonale facile à diagonaliser.

Cette méthode est particulièrement efficace lorsque l'on souhaite étudier l'état fondamental d'un Hamiltonien [86] et permet d'accéder à des systèmes de plus grande taille qu'un algorithme de diagonalisation directe, de l'ordre de la quarantaine de sites si on exploite toutes les symétries du système [83]. Nous avons utilisé cette méthode pour calculer de façon exacte les corrélations dans la chaîne $J_1 - J_2$ dans le chapitre 3 et les comparer à celles trouvées avec l'algorithme variationnel que nous avons développé.

La diagonalisation exacte nous permet donc d'obtenir des résultats reproduisant avec fidélité toutes les propriétés physiques de tout état quantique, même en supposant que tous les coefficients W_σ soient totalement indépendants les uns des autres. Cette méthode permet ainsi de reconstruire des états quantiques contenant une quantité d'information arbitraire, qui peut être portée par 2^N coefficients complexes indépendants. Cependant, on peut se poser la question de savoir si une telle précision est vraiment nécessaire. En effet nous allons nous intéresser à des états quantiques physiques, dont les coefficients ne sont a priori pas indépendants les uns des autres, et

non pas à l'espace de Hilbert tout entier. Nous allons discuter dans la sous-section suivante de l'idée de quantité d'information contenue dans un état quantique.

1.1.2 Quantification de l'intrication par l'entropie

Cette notion de quantité d'information nécessaire pour coder un état quantique est importante pour comprendre la difficulté de l'utilisation de l'outil numérique à étudier les états quantiques d'un système physique. Dans cette sous-section, nous allons présenter une façon de quantifier l'information contenue dans un état quantique au travers de l'étude de ses propriétés d'intrication.

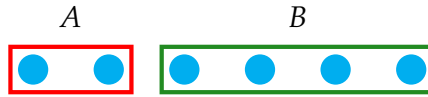


FIG. 1.2 Schéma du sous-système A et de son sous-système complémentaire B

Matrice densité réduite Pour ce faire, nous allons nous intéresser à un objet important pour décrire l'intrication entre les sous-systèmes de l'état quantique : la matrice densité réduite du sous-système. Si l'on considère un état quantique $|\psi\rangle$, alors on peut poser la matrice densité du système entier $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$. Il est important de remarquer que ce qui nous intéresse lorsque l'on parle d'intrication d'un état quantique est l'intrication d'une bipartition dans l'espace réel de l'état quantique. En effet, les états que nous allons considérer sont purs, car les modèles physiques que nous allons étudier considèrent que les systèmes quantiques sont isolés de tout environnement. Expérimentalement, cela se traduit par des temps d'évolution assez courts pour considérer le système isolé de son environnement.

Ainsi la quantité qui nous intéresse pour décrire la complexité d'un état quantique est l'intrication entre les différentes parties du système. Prenons un sous-système A de taille ℓ : pour simplifier notre propos, nous allons supposer que A est un segment de longueur ℓ d'une chaîne de taille totale N (figure 1.2), le raisonnement pouvant se généraliser à un sous-système quelconque. On peut alors poser la matrice densité réduite comme étant

$$\rho_\ell = \text{Tr}_B \rho \quad (1.4)$$

où on a noté B le sous-système complémentaire de A et Tr_B la trace partielle sur l'espace engendré par les états $\bigotimes_{i \in B} |\sigma_i\rangle$.

Entropie d'intrication Un aspect remarquable des états quantiques est le fait qu'un sous-système A puisse admettre une description en termes d'un état mixte (un ensemble statistique d'états) alors que le système total est dans un état pur. Pour quantifier

la "mixité" de l'état réduit, on peut étudier son entropie. L'entropie admet différentes formes, les plus utilisées en général sont l'entropie de von Neumann

$$S_{vN}(\rho_\ell) = -\text{Tr}_\ell(\rho_\ell \log \rho_\ell) \quad (1.5)$$

et l'entropie de Renyi d'ordre n

$$R_n(\rho_\ell) = \frac{1}{1-n} \log (\text{Tr}_\ell \rho_\ell^n) .$$

Dans ce manuscrit, nous utiliserons plus spécifiquement l'entropie de Renyi d'ordre 2 donné par le logarithme de la pureté $\text{Tr} \rho_\ell^2$ de la matrice densité réduite,

$$R_2(\rho_\ell) = -\log (\text{Tr}_\ell \rho_\ell^2) . \quad (1.6)$$

L'entropie de von Neumann S_{vN} correspond à la limite $n \rightarrow 1$ de l'entropie de Renyi R_n .

Lien avec l'intrication Pour finir cette sous-partie sur l'intrication, nous allons voir dans quelle mesure l'entropie d'intrication quantifie l'intrication.

Une première idée est de considérer un état pur sur un sous-système de taille ℓ ie sous la forme séparable $|\psi\rangle = |\psi_\ell\rangle \otimes |\psi_{N-\ell}\rangle$, alors $S = 0$. Si au contraire, on considère un état intriqué, alors $S > 0$. L'entropie d'intrication est aussi un bon révélateur de l'intrication.

Pour aller plus loin, considérons un état de type $|\psi\rangle = \sqrt{p} |\psi_\ell\rangle \otimes |\psi_{N-\ell}\rangle + \sqrt{1-p} |\bar{\psi}_\ell\rangle \otimes |\bar{\psi}_{N-\ell}\rangle$ où $|\psi_\ell\rangle$ et $|\psi_{N-\ell}\rangle$ sont orthogonaux respectivement à $|\bar{\psi}_\ell\rangle$ et $|\bar{\psi}_{N-\ell}\rangle$ et où p est une probabilité. La matrice densité réduite de cet état est alors

$$\rho_\ell = p |\psi_\ell\rangle\langle\psi_\ell| + (1-p) |\bar{\psi}_\ell\rangle\langle\bar{\psi}_\ell| .$$

L'entropie d'intrication est donc

$$S_{vN}(\ell) = -(p \log p + (1-p) \log(1-p)) \quad \text{et} \quad S_2(\ell) = -\log(1-2p+2p^2) .$$

On trouve ainsi que les deux entropies sont maximales en $p = \frac{1}{2}$, ce qui correspond bien à la superposition à poids égaux. De plus les deux entropies croissent strictement avec p pour $p < \frac{1}{2}$ et décroissent strictement après, ce qui reste vrai pour l'entropie de Renyi d'indice n quelconque. Ces quantités établissent donc la même hiérarchie entre les états quantiques en terme d'intrication.

D'un point de vue opérationnel, l'entropie d'intrication de von Neumann pour des paires de qubits a une signification fondamentale, puisqu'elle exprime le nombre M de paires maximalement intriquées (états de Bell) qu'on peut obtenir par des transformations locales assistées par la communication classique (local operations and classical communication - LOOC) à partir de N copies d'un état $|\psi\rangle$: $M = S_{VN}(|\psi\rangle)N$ dans la limite $N \rightarrow \infty$ [11].

Une dernière façon d'aborder la question de l'intrication est de considérer la décomposition de Schmidt d'un état quantique $|\psi\rangle$ respectivement à un sous-système A ,

$$|\psi\rangle = \sum_{a=1}^r \sqrt{\lambda_a} |a\rangle_A \otimes |a\rangle_B \quad (1.7)$$

où $r \leq \min(\ell, N - \ell)$ et les états $|a\rangle_A$ et $|a\rangle_B$ forment des familles de vecteurs orthogonaux [87] et ils représentent la base diagonalisant la matrice densité réduite ρ_ℓ sur le sous-système A ($|a_A\rangle$) et $\rho_{N-\ell}$ sur le sous-système B ($|a_B\rangle$) ; $\sqrt{\lambda_a}$ représentant à la fois les valeurs propres (non-nulles) de ρ_ℓ et $\rho_{N-\ell}$.

L'entropie d'intrication se réécrit alors dans cette décomposition

$$S_{VN}(\ell) = - \sum_{a=1}^r \lambda_a \log \lambda_a \text{ et } S_2(\ell) = - \log \left(\sum_{a=1}^r \lambda_a^2 \right). \quad (1.8)$$

États maximalement intriqués et états aléatoires On remarque, d'après l'équation 1.26, que les coefficients λ_a pèsent la superposition conjointe d'états pour A et B où à chaque état quantique $|a\rangle_A$ sur le sous-système A correspond un état quantique $|a\rangle_B$ sur le sous-système complémentaire. Un état quantique d'intrication maximale va peser de façon égale ces paires d'états quantiques et s'écrit alors, pour $\ell \leq \frac{N}{2}$

$$|\psi\rangle = \sum_{a=1}^{\mathcal{D}_\ell} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{D}_\ell}} |a\rangle_A \otimes |a\rangle_B$$

avec un nombre d'états aussi grand que la dimension de l'espace d'Hilbert de A .

Dans ce cas, la matrice ρ_ℓ se diagonalise sous la forme

$$\rho_\ell \sim \begin{pmatrix} \frac{1}{\mathcal{D}_\ell} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{\mathcal{D}_\ell} \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

où \mathcal{D}_ℓ est la dimension de l'espace de Hilbert des états quantiques sur le sous-système A , ie $\mathcal{D}_\ell = 2^\ell$.

On remarquera que ce cas particulier est en fait également la matrice densité réduite moyenne d'un état quantique aléatoire de l'espace de Hilbert comme montré par Page [74]. Cependant, l'entropie moyenne d'un sous-système d'un état quantique aléatoire est a priori différente de l'entropie calculée à partir de la matrice densité réduite moyenne à cause de la dispersion des valeurs propres. Néanmoins, ces deux entropies sont comparables comme nous allons en discuter dans la sous-section suivante.

1.1.3 Comportement de l'entropie sur l'espace de Hilbert

Maintenant que l'on a présenté ces outils quantifiant l'intrication d'un sous-système, il est possible de s'intéresser à l'intrication d'états quantiques génériques de l'espace de Hilbert.

Entropie maximale L'entropie d'intrication d'un sous-système sur l'espace de Hilbert est une quantité bornée. Elle est positive et, pour un sous-système de taille ℓ et pour tout indice n , est bornée par $S_{max} = \log \mathcal{D}_\ell$, où \mathcal{D}_ℓ est la dimension de l'espace de Hilbert associé à un sous-système de taille ℓ ie $\mathcal{D}_\ell = 2^\ell$ [99]. Tous les états qui réalisent $S = S_{max}$ sont maximalement intriqués.

Considérons un état quantique pris au hasard et regardons son entropie d'intrication. D'après Page [74], l'entropie moyenne de Von Neumann d'un état quantique aléatoire, que l'on appelle entropie de Page, vaut

$$S_{av}(\ell) \simeq \log \mathcal{D}_\ell - \frac{\mathcal{D}_\ell}{2\mathcal{D}} = \ell \log 2 - 2^{\ell-N-1} \quad (1.10)$$

pour $1 \ll \ell < \frac{N}{2}$.

On remarque que l'entropie Page est très proche de l'entropie maximale sur l'espace de Hilbert total, la correction entre les deux diminuant exponentiellement avec la taille du système. En effet, la correction est maximale en milieu de chaîne et vaut alors $2^{-(\frac{N}{2}+1)}$, ce qui est négligeable devant $S_{max} = N \log 2$. Ainsi un état générique de l'espace de Hilbert est presque maximalement intriqué. On peut alors se poser la question de savoir si ces états quantiques sont importants pour l'étude des systèmes physiques.

Loi d'aire À l'inverse d'un état totalement aléatoire, l'entropie de l'état fondamental d'un Hamiltonien gappé à interaction à courte portée est typiquement proportionnelle à la surface du sous-système, $S_\ell \sim \ell^{d-1}$; on dit alors que l'entropie de cet état suit une loi d'aire [36]. Dans le cas de l'étude que l'on a menée, on se place en $d = 1$ donc

$S_\ell \sim \text{cst}$. Ce comportement en loi d'aire est assez courant parmi les états quantiques qui sont les états fondamentaux ou plus généralement les états excités de basse énergie de Hamiltoniens physiques modélisant par exemple les interactions entre spins dans les solides. Intuitivement ces Hamiltoniens décrivent des interactions locales, ainsi à basse énergie, ces Hamiltoniens produisent de l'intrication par des échanges entre degrés de liberté de sites voisins.

Mais, cette loi n'est plus vérifiée dans le cas d'un système à une dimension sans gap dans le spectre d'excitations, dont les propriétés de basse énergie à grande distance sont décrites par une théorie de champ conforme. Alors l'entropie d'intrication augmente logarithmiquement avec la taille du sous-système. Plus précisément, pour un système aux conditions au bord périodique, l'entropie de von Neumann évolue selon $S_{VN}(\ell) \simeq \frac{c}{3} \log(\ell) + c_1$, et l'entropie de Renyi selon $R_\alpha(\ell) \simeq \frac{c}{6} \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right) \log(\ell) + c_1$, où c est la charge centrale holonomique issue de la théorie des champs conformes [18][98] et c_1 un terme sous-dominant. On dit que la loi d'aire est transgressée logarithmiquement.

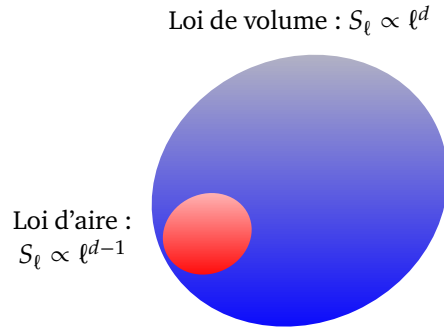


FIG. 1.3 Illustration de la répartition des états quantiques dans l'espace de Hilbert insistant sur la prédominance des états quantiques dont l'entropie évolue en loi d'aire par rapport aux états quantiques évoluant en loi de volume.

Comme on a pu le voir précédemment en discutant de l'entropie de Page, les états qui obéissent à une loi d'aire, même transgressée logarithmiquement, sont assez rares dans l'espace de Hilbert total, la plupart suivant une loi d'évolution de l'entropie totalement différente. Cependant, ce sont les états qui nous intéressent lorsque l'on souhaite étudier l'état fondamental d'un Hamiltonien.

Loi de volume D'autre part, l'entropie d'intrication de la plupart des états excités d'un Hamiltonien (à l'exception des systèmes localisés à N-corps [69]) augmente avec le volume de la sous-partie, $S_\ell \sim \ell^d$ [82], on dit que de tels états suivent une loi de volume. Un exemple notable d'états où la loi de volume est primordiale est représenté par les états atteints dans le régime stationnaire d'une évolution temporelle qui relaxe à partir d'un état arbitraire (quantum *quench*). Pour ces états l'hypothèse de thermalisation des états propres (Eigenstate Thermalization Hypothesis - ETH) [25] énonce que la matrice densité réduite $\rho_\ell(t)$ converge, dans le cas $\ell \gg 1$, vers la

matrice densité réduite d'un état thermalisé donc de la forme $\rho_\ell^{eq} = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}_A}}{Z_A}$, où \mathcal{H}_A est le Hamiltonien qui décrit uniquement les degrés de liberté en A (de manière générale, on décompose $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{AB}$, et on fait l'hypothèse que le terme d'interaction \mathcal{H}_{AB} n'implique que les degrés de liberté de bord pour A et B). L'entropie d'intrication de cet état correspond alors à l'entropie thermique d'un état d'équilibre, qui est extensive *ie* évolue en loi de volume. Pour décrire la dynamique temporelle de systèmes qui thermalisent au sens de l'ETH, il est donc a priori nécessaire de pouvoir décrire des états en loi de volume.

Pour illustrer cette discussion sur la répartition des états quantiques en fonction de leur intrication, on peut s'intéresser à un exemple particulier, celui développé dans [99]. La figure 1.4 présente la distribution de l'entropie des différents états propres d'un Hamiltonien fermionique quadratique avec termes de saut et d'appariement aléatoires à toute distance. On notera que l'entropie moyenne des états propres se détache de l'entropie maximale bien plus que l'entropie de Page, la correction à 36 sites étant négligeable. Cependant on remarque qu'un certain nombre de ces états propres admettent une entropie proche de la valeur maximale.

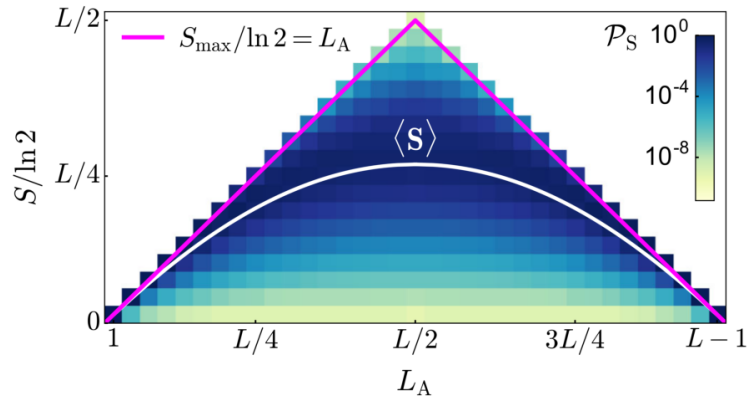


FIG. 1.4 Entropie d'intrication du sous-système A pour les états propres d'un Hamiltonien aléatoire de fermions libres sans spin sur une chaîne périodique de $L = 36$ sites. Les résultats sont tracés en fonction de la taille L_A du sous-système A . La courbe du bas représente l'entropie d'intrication moyenne $\langle S \rangle$ de tous les états propres et la courbe du haut représente l'entropie maximale $S_{max} = \log \mathcal{D}_A = L_A \log 2$ pour $L_A \geq L/2$. Figure tirée de [99].

Systèmes physiques Il est cependant important de noter que pour décrire l'état quantique d'un système physique à l'équilibre suite à un *quench*, il n'est pas nécessaire a priori de pouvoir reproduire les états d'entropie maximale qui, dans le cas des *quenches*, ne correspondraient qu'à des états stationnaires à température infinie. Au contraire, il est possible de se restreindre à des états quantiques d'entropie plus faible même s'ils sont assez rares dans l'espace de Hilbert.

Plus précisément, considérons la forme que doit avoir un Hamiltonien menant à une évolution totalement indépendante des coefficients d'un état quantique arbitraire et

donc à un état aléatoire. Si l'on reprend la décomposition de l'équation 1.1 et un état initial $|\psi_0\rangle$ (dont les coefficients dans la base $|\sigma\rangle$ sont a priori corrélés), alors l'état évolué s'écrit sous la forme

$$\begin{aligned} W_\sigma(t) &= \langle \sigma | e^{-i\mathcal{H}t} | \psi_0 \rangle \\ &\sim \langle \sigma | \psi_0 \rangle - i \langle \sigma | \mathcal{H} | \psi_0 \rangle + \dots \end{aligned} \quad (1.11)$$

Ainsi, pour que l'évolution temporelle décorrèle les coefficients $W_\sigma(t)$ et puisse les transformer en variables aléatoires indépendantes, les éléments de la matrice Hamiltonienne $\langle \sigma | \mathcal{H} | \psi_0 \rangle$ doivent être indépendants les uns des autres. Ce système est ainsi très fortement intriqué.

Cependant, lorsque l'on s'intéresse à des systèmes physiques, il est peu probable de s'intéresser à ce genre de Hamiltonien. Même en prenant un Hamiltonien avec des termes aléatoires de la forme $\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta$, où la somme sur α et β se fait sur

les trois axes x, y et z , il ne couplera pas tous les vecteurs de la base de l'espace de Hilbert de façon indépendante les uns des autres. Dans les cas de systèmes physiques, on peut ainsi se demander si pouvoir décrire tous les états quantiques de l'espace de Hilbert est réellement nécessaire lorsque l'on est intéressé que par certains problèmes spécifiques. Cette intuition, résumée par Laudauer par la citation *'Information is physical'* est au centre de la démarche des méthodes variationnelles : peut-on décrire les états quantiques qui nous intéressent et leurs propriétés physiques en utilisant moins d'informations que pour décrire l'espace de Hilbert tout entier, en reproduisant seulement l'information qui a un sens physique ?

Dans la suite de notre étude, nous verrons en quoi la question de la reproduction de l'entropie est un problème central des méthodes variationnelles, la difficulté résidant dans le compromis entre décrire tout l'espace de Hilbert pour reproduire avec fidélité l'état quantique recherché et restreindre l'espace de Hilbert considéré pour rendre les calculs faisables.

1.2 Structure du signe des états quantiques et conséquences algorithmiques

Lorsque l'on s'intéresse à la recherche de l'état fondamental d'un Hamiltonien s'exprimant sous la forme d'une matrice à coefficients réels sur une certaine base, on peut supposer que l'état recherché est à coefficients réels sur cette base. Cependant, le signe de ces coefficients n'est pas déterminé a priori et cette structure du signe de l'état

fondamental représente une propriété importante de l'état, comme nous allons en discuter par la suite.

Dans le cas général, il est ainsi difficile de connaître la structure du signe de l'état fondamental a priori, cependant, il existe un théorème dû à Feynman (en lien avec le théorème mathématique de Perron-Frobenius) : le théorème d'absence de nœuds (no-node theorem) qui permet dans certains cas de conclure que tous les coefficients doivent être finis et de même signe et auquel il est parfois possible de se ramener par une transformation de jauge. Nous présenterons, grâce à ce théorème, la structure du signe des systèmes que nous allons étudier par la suite. Nous montrerons ensuite en quoi certaines structures du signe induisent un problème fondamental dans la méthode Monte Carlo quantique (QMC). Et pour finir, nous relierons cette considération sur la structure du signe à l'intrication que nous avons présentée précédemment.

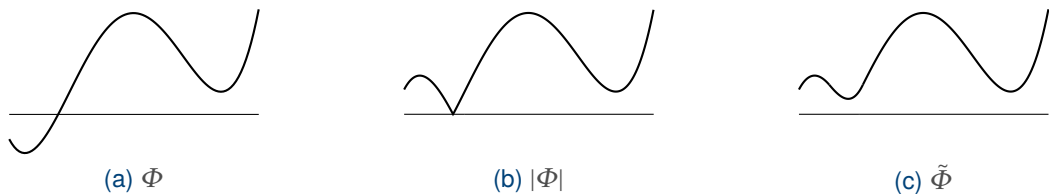
1.2.1 Structure du signe des états fondamentaux

Théorème d'absence de nœuds Dans le cas de bosons dans un potentiel scalaire, le théorème d'absence de nœuds [41] nous assure que la structure de signe de l'état fondamental est triviale *ie* les coefficients de l'état fondamental décomposé sur la base des états propres des opérateurs position $|\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_N\rangle$ sont positifs. Prenons un Hamiltonien \mathcal{H} en seconde quantification de la forme

$$\mathcal{H} = \int d^d \mathbf{x} \psi^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{x} d^d \mathbf{x}' \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}) \quad (1.12)$$

où ψ et ψ^\dagger sont des opérateurs de champs bosoniques : $[\psi(\mathbf{x}), \psi^\dagger(\mathbf{x}')] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$, et U et V sont des potentiels externes et d'interaction quelconques.

Dans ce cas, la fonction d'onde de tout état propre $\varphi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ de \mathcal{H} est réelle puisque \mathcal{H} est un opérateur réel sur la base $|\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_N\rangle$.



Fixons désormais à une valeur constante les variables dont dépend la fonction d'onde de l'état fondamental à part une : ξ , on a alors une fonction d'onde $\Phi(\xi) = \varphi(x_1, x_2, \dots, \xi, \dots)$,

voir la figure 1.5a. Nous allons voir que si la fonction Φ présente un nœud, ie change de signe, alors φ n'est pas la fonction d'onde de l'état fondamental. Commençons par remarquer que la fonction $|\varphi|$, voir figure 1.5b, est aussi fonction d'onde de l'état fondamental. En effet, la fonction $|\varphi|$ prend les mêmes valeurs $(\partial_{\xi}\varphi)^2$, $(\partial_{x_i}\varphi)^2$ et φ^2 que φ (à part dans un ensemble de points de mesure nulle, où la dérivée n'est pas définie), elle minimise donc elle aussi l'énergie

$$\langle E \rangle = \frac{\int \left(\frac{1}{2m} \sum_i (\nabla_i \varphi)^2 + \sum_{i < j} V \varphi^2 \right) d^N \mathbf{R}}{\int \varphi^2 d^N \mathbf{R}}. \quad (1.13)$$

Pour finir, il est alors possible de créer une fonction d'onde de plus basse énergie que φ en retirant le nœud, en effet, si l'on remplace le point anguleux par une fonction plus régulière, on diminue beaucoup $(\partial_{\xi}\varphi)^2$ en ne changeant quasiment pas φ^2 , la fonction ainsi obtenue $\tilde{\varphi}$, voir figure 1.5c, est donc d'énergie plus basse que φ . L'état de plus basse énergie étant l'état fondamental, on trouve que l'état fondamental n'est pas φ mais $\tilde{\varphi}$ et a donc tous ses coefficients positifs (ne présente pas de nœuds).

Ce résultat valable pour les bosons est aussi primordial pour plusieurs modèles de spins grâce au mapping qu'on peut établir entre spins et bosons, comme nous allons le détailler dans le prochain paragraphe.

Modèle XX et structure positive Par la suite (dans le chapitre 2), nous étudierons un modèle de chaîne de spins $\frac{1}{2}$: la chaîne XX. Ce modèle a pour Hamiltonien

$$\mathcal{H}_{XX} = -J \sum_i (S_{i+1}^x S_i^x + S_{i+1}^y S_i^y). \quad (1.14)$$

En introduisant les opérateurs $S_i^+ = \frac{1}{2}(S_i^x + iS_i^y)$ et $S_i^- = \frac{1}{2}(S_i^x - iS_i^y)$, le Hamiltonien se réécrit

$$\mathcal{H}_{XX} = -\frac{J}{2} \sum_i (S_i^- S_{i+1}^+ + hc). \quad (1.15)$$

Ce modèle de spin se mappe sur un modèle de bosons à cœur dur par la transformation $S_i^+ \rightarrow \tilde{b}_i^\dagger$, $S_i^- \rightarrow \tilde{b}_i$ et $S^z = \tilde{b}_i^\dagger \tilde{b}_i - \frac{1}{2}$, avec $\{\tilde{b}_i, \tilde{b}_i^\dagger\} = 1$ et $[\tilde{b}_i, \tilde{b}_j^{(\dagger)}] = 0$ pour $i \neq j$. Le Hamiltonien de bosons à cœur dur peut être ré-écrit comme

$$\mathcal{H}_B = -\frac{J}{2} \sum_i (\tilde{b}_i^\dagger \tilde{b}_{i+1} + hc) + \frac{W}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) \quad (1.16)$$

avec $\frac{W}{J} \rightarrow \infty$ et où b_i et b_i^\dagger sont des opérateurs bosoniques standards. Ce modèle (dit de Bose-Hubbard) peut être vu comme l'approximation discrète d'un modèle de bosons dans l'espace continu comme décrit par l'équation 1.12, avec $\psi(\mathbf{x}_i) = \frac{b_i}{\sqrt{a}}$, $J = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ et $U(\mathbf{x}) = 0$, avec a le pas de discrétisation.

Ainsi, d'après le théorème d'absence de nœuds, la structure du signe de l'état fondamental est positive.

Une autre façon d'arriver à ce résultat, qui est moins parlante quant à la physique du système mais plus directe, est d'utiliser le théorème de Perron-Frobenius sur la matrice du Hamiltonien [44][77]. En effet, pour tout élément de la base de calcul le long de l'axe z $|\sigma\rangle$, l'élément de matrice vaut $\langle\sigma|\mathcal{H}|\sigma'\rangle = -J < 0$ si les configurations σ et σ' ne diffèrent que d'un spin et 0 sinon. D'après le théorème de Perron-Frobenius, l'état propre associé à la valeur propre de plus basse énergie se décompose dans la base $|\sigma\rangle$ avec des coefficients positifs.

Modèle XXZ antiferromagnétique et signe de Marshall Le Hamiltonien du modèle XXZ antiferromagnétique prend la forme :

$$\mathcal{H}_{\text{XXZ}} = J \sum_i (S_{i+1}^x S_i^x + S_{i+1}^y S_i^y) + \Delta \sum_i S_{i+1}^z S_i^z. \quad (1.17)$$

L'état fondamental de ce modèle, dont l'étude constituera une partie du chapitre 3, admet une structure du signe qui semble différente de celle que l'on a obtenue pour le modèle précédent.

Il est possible d'effectuer le même mapping que précédemment, mais alors le Hamiltonien se réécrit

$$\mathcal{H}_{\text{XXZ}} = \frac{J}{2} \sum_i (\tilde{b}_i^\dagger \tilde{b}_{i+1} + hc) + \Delta \sum_i \left(\tilde{b}_i^\dagger \tilde{b}_i - \frac{1}{2} \right) \left(\tilde{b}_{i+1}^\dagger \tilde{b}_{i+1} - \frac{1}{2} \right). \quad (1.18)$$

On ne peut pas, dans ce cas, se ramener directement au Hamiltonien 1.12 car le préfacteur du terme de saut est positif et ne peut donc plus correspondre à un terme d'énergie cinétique standard. On remarque en parallèle que la matrice Hamiltonienne ne vérifie plus l'hypothèse de négativité des coefficients du théorème de Perron-Frobenius.

Il est cependant possible d'effectuer une transformation de jauge pour revenir au cas d'application des théorèmes utilisés précédemment. Pour ce faire, considérons le sous-réseau A des sites pairs et la transformation de jauge $\tilde{b}_j \rightarrow \tilde{b}_j e^{i\pi}$ pour $j \in A$, ie la transformation canonique $\mathcal{U}^\dagger \tilde{b} \mathcal{U}$ avec $\mathcal{U} = e^{i\pi \sum_{i \in A} n_i}$.

Ce qui transforme le Hamiltonien \mathcal{H}_{XXZ} en

$$\tilde{\mathcal{H}}_{XXZ} = -\frac{J}{2} \sum_i (\tilde{b}_i^\dagger \tilde{b}_{i+1} + hc) + \Delta \sum_i \left(\tilde{b}_i^\dagger \tilde{b}_i - \frac{1}{2} \right) \left(\tilde{b}_{i+1}^\dagger \tilde{b}_{i+1} - \frac{1}{2} \right). \quad (1.19)$$

Les théorèmes que nous avons utilisés précédemment s'appliquent sur ce Hamiltonien, son état fondamental a donc ses coefficients positifs dans la base $|\sigma\rangle$, posons $|\tilde{\psi}_0\rangle = \sum_{\sigma} \tilde{W}_{\sigma} |\sigma\rangle$ avec $\tilde{W}_{\sigma} \geq 0$. L'état fondamental de \mathcal{H}_{XXZ} est alors

$$|\psi_0\rangle = \mathcal{U}|\tilde{\psi}_0\rangle = e^{i\pi N_{A\uparrow}} |\tilde{\psi}_0\rangle = \sum_{\sigma} e^{i\pi N_{A\uparrow}^{\sigma}} \tilde{W}_{\sigma} |\sigma\rangle \quad (1.20)$$

où $N_{A\uparrow} = \sum_{i \in A} \left(S_i^z + \frac{1}{2} \right) = \sum_{i \in A} n_i$ est l'opérateur qui compte les spins \uparrow sur le sous-réseau A . La structure de signe en $\text{sgn}(W_{\sigma}) = e^{i\pi N_{A\uparrow}(\sigma)}$ est dite de Marshall [7][62] et elle est commune à tous les systèmes antiferromagnétiques XXZ définis sur un réseau bipartite, ie qui admettent une décomposition en deux sous-réseau A et B de sorte à ce qu'aucun terme d'interaction XY du Hamiltonien ne couple deux sites du même sous-réseau.

Dans le cas général, il est cependant difficile de trouver a priori la structure de signe de l'état fondamental d'un Hamiltonien. Un cas où cette difficulté est notable est celui des modèles de spins antiferromagnétiques définis sur des réseaux non-bipartites. On peut citer comme exemple de ce type de réseau : le réseau triangulaire, kagome, Les interactions antiferromagnétiques entre sites de ces réseaux rentrent en compétition car elles ne peuvent être satisfaites en même temps, on parle alors de frustration magnétique. Dans ce contexte, il n'est pas possible de considérer une transformation de jauge qui réécrit le Hamiltonien sous une forme satisfaisant le théorème de Perron-Frobenius et donc la règle du signe de Marshall ne s'applique pas. Cette difficulté à trouver la structure du signe a priori est un obstacle à bon nombre d'approches numériques statistiques comme nous allons le voir dans la sous-section suivante.

1.2.2 QMC et problème du signe

Le terme Monte Carlo quantique (QMC) regroupe de nombreux algorithmes au fonctionnement et à la finalité très différentes. Pour mettre en évidence le problème du signe, nous allons commencer par nous intéresser au Monte Carlo à intégrales de chemins (path integral Monte Carlo - PIMC). Dans le cas du path integral MC, le problème du signe est lié à la structure du signe de l'état fondamental, ou plus précisément lié au non respect des hypothèses du théorème de Perron-Frobenius. Nous nous limiterons cependant au maximum à présenter seulement les principes de l'approche pour nous plonger dans les détails techniques seulement dans la sous-section 2.1.2 dans le but de rendre cette présentation plus digeste et de ne pas seulement faire un catalogue de méthodes numériques.

Le PIMC vise à calculer la moyenne d'équilibre thermique des différentes observables physiques décrivant le système. Il est important de noter qu'il ne s'agit plus d'un calcul exact comme on a pu en discuter dans la section précédente, mais d'un calcul par échantillonnage Monte Carlo. Malgré son efficacité, cet échantillonnage statistique entraîne un certain nombre de difficultés tant statistiques qu'algorithmiques, le problème du signe en est une des plus importantes.

Considérons un système quantique décrit par un Hamiltonien \mathcal{H} à l'équilibre thermique, sa fonction de partition s'écrit alors

$$Z = \text{Tr } e^{-\beta \mathcal{H}} = \text{Tr } (e^{-\tau \mathcal{H}})^M \quad (1.21)$$

avec $\beta = \tau M$ et $M \rightarrow \infty$. En insérant la relation de fermeture de la base $|\sigma\rangle$ entre chaque paire de propagateurs $e^{-\tau \mathcal{H}}$, on peut décomposer Z sur un ensemble de configurations $\zeta = (\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ sous la forme

$$Z = \sum_{\zeta} W_{\zeta} \quad (1.22)$$

où les coefficients W_{ζ} dépendent des valeurs des éléments de matrice $\langle \sigma | e^{-\tau \mathcal{H}} | \sigma' \rangle$. τ étant faible en module, ces éléments de matrice sont proches de $-\tau \langle \sigma | \mathcal{H} | \sigma' \rangle$ pour $\sigma \neq \sigma'$. Dans le cas où le théorème de Perron-Frobenius ne s'applique pas, ces éléments de matrice ne sont plus positifs et les coefficients W_{ζ} ne sont pas tous positifs. Posons alors $W_{\zeta} = P_{\zeta} \text{sgn}(\zeta)$, où P_{ζ} est le module de W_{ζ} et $\text{sgn}(\zeta)$ est son signe.

Ainsi [22], la valeur de l'équilibre thermique d'une observable physique O peut s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \frac{\text{Tr } (O e^{-\beta \mathcal{H}})}{Z} \\ &= \frac{\sum_{\zeta} P_{\zeta} \text{sgn}(\zeta) O(\zeta)}{\sum_{\zeta} P_{\zeta} \text{sgn}(\zeta)} \end{aligned} \quad (1.23)$$

où $O(\zeta)$ est l'estimateur QMC de l'observable O .

La fonction P_{ζ} est positive et sa somme est égale à un, il est donc possible de l'identifier à une probabilité. L'algorithme Monte Carlo fournit ainsi un échantillonnage de N_{MC} éléments ζ tirés aléatoirement par un tirage biaisé par les probabilités mentionnées précédemment ; nous détaillerons plus précisément cette procédure dans 2.1.2.

Pour calculer la valeur d'une observable physique, il suffit alors de moyenner les quantités $\text{sgn}(\zeta)O(\zeta)$ et $\text{sgn}(\zeta)$ sur tous les N_{MC} éléments obtenus. Cependant, dans le cas où les hypothèses du théorème de Perron-Frobenius ne s'appliquent pas, le calcul de la moyenne de la quantité $\text{sgn}(\zeta)$ pose problème, en effet, la valeur moyenne du signe s'annule exponentiellement avec la taille du système et l'inverse de la température, tandis que la variance reste finie [22]. Ainsi pour avoir un calcul fiable de cet quantité, il est nécessaire d'augmenter la taille de l'échantillonnage Monte Carlo exponentiellement avec la taille du système et l'inverse de la température. La complexité de l'algorithme devient donc comparable avec celle de la diagonalisation exacte. C'est ce phénomène d'augmentation exponentielle du temps de calcul que l'on appelle le 'problème du signe'. On remarquera que ce problème n'apparaît pas seulement dans le cas où la structure du signe de l'état fondamental n'est pas positive, mais plus généralement dès que les hypothèses du théorème de Perron-Frobenius ne sont pas vérifiées ; cependant dès que la structure du signe de l'état fondamental du système n'est pas positive, nécessairement les hypothèses du théorème ne sont pas vérifiées et le problème du signe apparaît.

D'autres approches Monte Carlo, comme le Monte Carlo de la fonction de Green (Green's function Monte Carlo - GFMC) ou le Monte Carlo par reptation (reptation Monte Carlo - RMC) [37], qui ont pour but d'approximer l'état fondamental d'un système quantique, rencontrent également ce problème du signe et ne peuvent accéder à un état fondamental dont la structure du signe n'est pas positive.

Une façon de contourner cette difficulté est de connaître a priori la structure du signe de l'état fondamental et de résoudre le problème par des approches QMC qui fonctionnent pour une structure de signe prédéfinie (stratégie fixed-node) telles le GFMC et le RMC. Cependant comme on en a discuté dans la sous-section précédente, connaître la structure du signe a priori est rarement possible sans connaître l'état fondamental. Une solution est alors d'utiliser une approche qui n'est pas soumise à ce problème du signe : l'approche variationnelle. On discutera plus tard les difficultés que l'approche variationnelle rencontre pour décrire des états fortement intriqués. Mais, avant cela, nous allons nous pencher sur le lien existant entre structure du signe et intrication.

1.2.3 Lien entre intrication et structure de signe

À première vue, il ne semble pas y avoir un lien particulier entre la structure du signe d'un état et son entropie d'intrication. En fait, il est toujours possible de créer, pour une structure de signe donnée, un état dont l'entropie est en loi de volume. En effet, prenons l'exemple de la structure de signe triviale : on peut construire un état "arc-en-ciel" $|\psi_{ael}\rangle = \bigotimes_i (|\uparrow\rangle_i \otimes |\downarrow\rangle_{j(i)} + e^{i\varphi} |\downarrow\rangle_{j(i)} \otimes |\uparrow\rangle_i)$, où $j(i)$ est le site symétrique par réflexion autour du milieu de la chaîne du site i , voir figure 1.5. Cet état quantique

possède une structure de signe positive, dans le cas $\varphi = 0$, et son entropie d'intrication, quelque soit la taille du sous-système est en loi de volume, tant qu'on se restreint à la moitié gauche ou droite de la chaîne.

L'entropie d'intrication d'un état quantique particulier avec une structure de signe donnée ne semble donc pas être un bon indicateur pour analyser le lien entre cette structure de signe et l'intrication globale des états quantiques la possédant. Cependant, ce lien se manifeste si on considère la moyenne de l'entropie d'intrication sur tous les états quantiques ayant une structure de signe donnée.

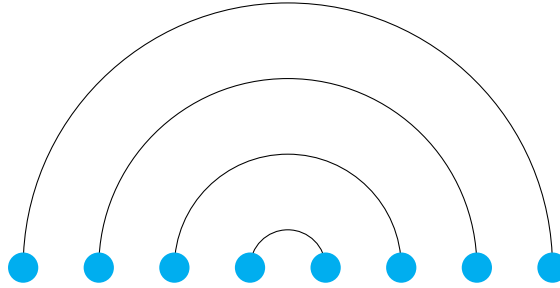


FIG. 1.5 Schéma d'un état arc-en-ciel

Ainsi, si on fixe les amplitudes des différents coefficients d'un état quantique et que l'on fait varier aléatoirement les signes des coefficients entre -1 et 1 , la moyenne de l'entropie d'intrication évolue en loi de volume, exactement comme l'entropie d'intrication d'un état quantique pris au hasard [49].

Si maintenant, on fixe le signe des coefficients à 1 et que l'on fait varier aléatoirement leur amplitude, alors on trouve que l'entropie d'intrication moyenne reste constante et ne dépend pas de la taille du sous-système [50]. Plus que ça, on trouve que l'entropie d'intrication pour tout sous-système de taille supérieure à 2 ne dépend quasiment pas de l'amplitude des coefficients de l'état quantique, mais presque exclusivement de la structure de signe.

Ainsi l'état "arc-en-ciel" est particulièrement rare en terme d'entropie d'intrication parmi les états quantiques à structure de signe positive, et les états quantiques à structure de signe positive sont majoritairement peu intriqués. Par contre, les états quantiques ayant une structure de signe non positives sont généralement fortement intriqués et, comme nous allons le discuter dans la prochaine section, l'entropie d'intrication est une grandeur difficile à reproduire pour les approches variationnelles.

1.3 Méthodes variationnelles

Dans cette section, nous allons commencer par présenter les méthodes variationnelles de façon générale en présentant les concepts théoriques et les enjeux. Nous présente-

rons ensuite deux exemples d'approches variationnelles basées sur les états produits de matrices (Matrix Product States - MPS) et les états projetés de type Bardeen-Cooper-Schrieffer (p-BCS), qui nous permettront de présenter les définitions des quantités variationnelles importantes et de dégager deux problématiques que nous développerons par la suite dans le cas de l'Ansatz EPS : la reproduction de l'intrication du système et la reproduction de la structure de signe.

1.3.1 Explication de la méthode

Comme nous en avons discuté dans la sous section 1.1.3, l'idée à la base des méthodes variationnelles est qu'il n'est pas nécessaire de savoir représenter des états quantiques arbitraires pour pouvoir étudier des systèmes physiques. Pour ce faire, on ne va pas considérer des états quantiques se développant sur une base d'un espace de Hilbert d'une façon quelconque comme dans l'équation 1.1, mais se développant sous la forme

$$|\psi(\boldsymbol{\alpha})\rangle = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} W_{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\alpha}) |\boldsymbol{\sigma}\rangle \quad (1.24)$$

où $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_M)$ sont les paramètres variationnels à optimiser.

Pour illustrer ces définitions, nous allons prendre l'exemple de l'approche champ moyen. Dans ce cas, on ne considère que les états quantiques factorisables entre sites. Les coefficients d'un état quantique, ne dépendant que des valeurs des spins en chaque sites, s'écrivent $W_{\boldsymbol{\sigma}} = \prod_i C_i^{\sigma_i}$ où le produit se fait sur chaque site i du système et où les $C_i^{\sigma_i}$ sont des variables. On décrit un tel état quantique avec $2N$ variables $\alpha_{i,\sigma_i} = C_i^{\sigma_i}$.

Toute la question des algorithmes variationnels est alors le choix de ces variables et l'expression des coefficients $W_{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\alpha})$. On se retrouve en effet tiraillé par deux buts qui semblent opposés :

- * Limiter le nombre M de variables pour permettre un calcul rapide et efficace même pour des systèmes de grande taille. On cherche à se limiter à un nombre de variables polynomial en la taille du système $M \sim N^k$, avec $k \sim O(1)$, pour échapper au problème de l'augmentation exponentielle du temps de calcul posé par la méthode exacte.
- * Réussir à décrire avec fidélité les observables d'un système physique.

Un présupposé des méthodes variationnelles est que l'on peut réussir à contenter ces deux points avec un choix judicieux des variables. Cette question sera au cœur de mon manuscrit et nous reviendrons de nombreuses fois sur cette interrogation dans le cas du choix de variables que nous avons fait.

Il faut cependant faire attention au fait que l'on ne cherche pas d'approche nous fournissant une solution universelle reproduisant toutes les informations que l'on souhaite pour tous les systèmes physiques. La plupart des approches variationnelles ont des domaines d'application particuliers et fonctionnent efficacement pour une classe de systèmes physiques ou pour décrire certaines observables particulières.

Pour illustrer cette remarque, revenons au cas de l'approche champ moyen : considérer seulement des états quantiques de cette forme permet de décrire avec efficacité certains systèmes physiques, comme par exemple la transition superfluide - isolant de Mott dans des gaz bosoniques sur réseau [43]. Cependant, si l'on considère les corrélations à deux points, elles sont nulles dès que $i \neq j$, pour tous les états quantiques décrits par l'approche champ moyen. Cette approche ne permet donc pas d'étudier les corrélations, pour n'importe quel système physique.

L'ensemble de variables et la forme fonctionnelle des coefficients $W_{\sigma}(\alpha)$ définit un sous-ensemble de l'espace de Hilbert $\{|\psi(\alpha)\rangle\}$ et constitue ce qu'on appelle un *Ansatz* de la méthode variationnelle. La méthode variationnelle consiste alors à rechercher la meilleure approximation de l'état quantique d'intérêt en s'appuyant sur un principe variationnel.

Nous reviendrons plus en détail sur l'utilisation du principe variationnel par les approches d'optimisation variationnelle, tant pour la recherche de l'état fondamental que pour l'étude de l'évolution temporelle dans la partie 2.1.3, qui sera consacrée à discuter des aspects plus techniques de l'approche que nous avons utilisée. Dans la suite de cette partie, nous allons présenter deux exemples d'Ansätze pour illustrer les notions que nous avons évoquées précédemment et mettre en évidence quelques enjeux des méthodes variationnelles.

1.3.2 États MPS et algorithmes associés

DMRG Le groupe de renormalisation de la matrice densité (Density Matrix Renormalization Group - DMRG) [100][101] est un algorithme particulièrement efficace pour étudier les systèmes 1D ou quasi-1D [87]. En premier lieu utilisé pour étudier les états de basse énergie, notamment les états fondamentaux, d'Hamiltoniens fortement corrélés à 1D comme la chaîne de Heisenberg [51] ou le modèle de Hubbard, cet algorithme est maintenant applicable à quasiment tous les modèles à une dimension et est d'une efficacité redoutable parfois seulement limitée par la précision machine notamment grâce à la faible intrication de l'état fondamental de la plupart des Hamiltoniens physiquement intéressants, comme nous le développerons dans la suite de cette sous-section. Cet algorithme a été appliqué pour étudier l'état fondamental d'Hamiltoniens de chaînes comprenant quelques milliers de sites.

Le DMRG a également été utilisé pour étudier des systèmes à deux dimensions avec un succès plus mitigé, la complexité de l'algorithme augmentant exponentiellement avec la taille du système. Seule une étude des petits systèmes est alors possible avec une excellente précision [87] ou des systèmes 2D en cylindre avec un rayon faible par rapport à sa hauteur [92]. Ce changement de comportement du DMRG avec l'augmentation de la dimension est profondément liée au changement de comportement de l'entropie d'intrication entre les systèmes 1D et 2D, dont l'entropie en loi d'aire passe d'un comportement constant à 1D à une augmentation linéaire à 2D.

Cet algorithme a également été utilisé pour décrire la dynamique de systèmes 1D de taille modérée ou pour des *quenches* de basse énergie [103] à température nulle ainsi qu'à température non nulle [89]. Là encore l'intrication s'avère être un obstacle majeur dans l'étude de ces systèmes obligeant à une augmentation exponentielle de la complexité de l'algorithme pour augmenter la durée d'étude de l'évolution temporelle, comme nous allons le détailler dans la suite.

Le DMRG a longtemps été considéré comme n'étant pas une méthode variationnelle, en effet, l'algorithme original ne s'exprime pas sous forme variationnelle. L'idée de l'algorithme est de considérer non pas l'espace de Hilbert total mais une troncature pour se ramener à une fonction d'onde décrite par moins d'états quantiques qu'une base entière de l'espace de Hilbert. Comme on l'a vu dans la sous-section précédente 1.3.1, l'idée qu'il existe un sous-ensemble réduit de l'espace de Hilbert permettant de décrire les propriétés physiques du système est la base des méthodes variationnelles et est assez bien vérifiée pour les Hamiltoniens 1D à interactions à courte portée. Afin de choisir les états quantiques permettant de décrire la fonction d'onde du système, le DMRG considère une série de sous-systèmes de taille de plus en plus grande et ne garde pour chacun d'eux qu'un nombre réduit D d'états considérés comme importants. L'algorithme considère que les états quantiques importants sont les états propres les plus probables de la matrice densité réduite sur le sous-système considéré. La quantité D est centrale dans l'algorithme DMRG et reviendra souvent par la suite, il s'agit de la dimension de lien, dans la littérature sur le DMRG elle est souvent notée m ou M et dans la littérature sur les MPS plutôt D ou χ .

Il est cependant possible d'exprimer l'algorithme DMRG comme un algorithme variationnel basé sur l'Ansatz MPS [30] [72].

États MPS Nous allons nous attarder un peu plus précisément sur l'Ansatz MPS pour mettre en avant le rôle de la dimension de lien D et pour ensuite pouvoir comparer la structure de l'Ansatz MPS avec celle de l'Ansatz EPS que nous développerons dans le chapitre suivant.



FIG. 1.6 Schéma de l'Antatz MPS

Par définition, un état quantique faisant parti de l'*Ansatz* MPS peut se composer sous la forme d'un produit de matrices A^{σ_i} de dimension $D \times D$ chacune attachée à un site de la chaîne (figure 1.6), en prenant A^{σ_1} et A^{σ_N} des vecteurs dans le cas d'un système à conditions de bord ouvertes. Plus précisément, un tel état quantique s'écrit

$$|\psi(A^{\sigma_1}, \dots, A^{\sigma_N})\rangle = \sum_{\sigma} \text{Tr}(A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_N}) |\sigma\rangle.$$

Un état quantique de l'*Ansatz* MPS d'un système de spin $\frac{1}{2}$ est donc décrit par $2N \times D^2$ variables. Dans le cas où la dimension de lien D ne dépend pas de la taille du système N , le nombre de variables est linéaire en N , la complexité de la description de l'état quantique est fortement réduite, cependant la dépendance en D^2 impose un coût important pour décrire des systèmes ayant une entropie d'intrication élevée, comme on va l'expliquer dans le paragraphe suivant.

MPS et intrication Pour comprendre le lien entre la dimension du lien D et l'entropie d'intrication d'un état quantique décrit par l'*Ansatz* MPS, il y a plusieurs façons différentes de procéder, chacune appelant à une vision différente de l'*Ansatz*.

On peut d'une part revenir sur le fonctionnement de l'algorithme DMRG qui consiste à réduire l'espace de Hilbert pour chaque sous-système à un sous-espace de dimension D (ou D^2 suivant la géométrie du système). La matrice densité réduite ρ_A sur un sous-système A d'un état créé par l'algorithme DMRG se ramène donc à une matrice avec seulement D valeurs propres (dans le cas d'une partition gauche/droite), et l'entropie maximale sur le sous-système A pour un tel état est $S \propto \log_2 D$.

D'autre part, on peut considérer l'état MPS lui même. En effet, si l'on considère deux sous-systèmes complémentaires A et B , on peut réécrire l'état MPS sous la forme

$$|\psi(A^{\sigma_1}, \dots, A^{\sigma_N})\rangle = \sum_{\sigma_A \sigma_B} \text{Tr}(A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_N}) |\sigma_A\rangle \otimes |\sigma_B\rangle. \quad (1.25)$$

$$\text{Or } \text{Tr}(A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_N}) = \sum_{j_1, \dots, j_N} A_{j_1}^{\sigma_1} A_{j_1 j_2}^{\sigma_2} \dots A_{j_{N-1} j_N}^{\sigma_{N-1}} A_{j_N}^{\sigma_N}.$$

$$\text{On pose } |\psi_A^A\rangle = \sum_{\sigma_A} \sum_{j_1, \dots, j_{\ell-1}} A_{j_1}^{\sigma_1} A_{j_1 j_2}^{\sigma_2} \dots A_{j_{\ell-1} j_\ell}^{\sigma_\ell} |\sigma_A\rangle \text{ et } |\psi_B^B\rangle = \sum_{\sigma_B} \sum_{j_{\ell+1}, \dots, j_N} A_{j_{\ell+1}}^{\sigma_{\ell+1}} \dots A_{j_N}^{\sigma_N} |\sigma_B\rangle.$$

On trouve alors la décomposition de l'état MPS suivante

$$|\psi\rangle = \sum_{j_\ell} \lambda_{j_\ell} |\psi_{j_\ell}^A\rangle \otimes |\psi_{j_\ell}^B\rangle \quad (1.26)$$

avec λ_{j_ℓ} des facteurs de normalisation. On remarque que pour un état MPS quelconque, la condition d'orthogonalité $\langle \psi_j^A | \psi_{j'}^B \rangle \propto \delta_{jj'}$ n'est pas vérifiée. Cependant, pour les états MPS vérifiant cette condition d'orthogonalité, la décomposition 1.26 est la décomposition de Schmidt de l'état quantique.

La somme sur les indices j_ℓ allant de 1 à D , l'état d'intrication maximale est obtenue pour une base de décomposition $|\psi_j^A\rangle, |\psi_{j'}^B\rangle$ orthogonale et pour tous les λ_{j_ℓ} égaux à $\frac{1}{\sqrt{D}}$, on a alors que l'entropie d'intrication maximale vaut $S = \log D$.

Une dernière façon de présenter le contenu en intrication des états MPS est de considérer une autre représentation des états MPS comme projection de l'état quantique appartenant à un espace de Hilbert plus large. Un état MPS peut en effet s'écrire comme la projection d'un état quantique de paires de sites maximalement intriqués d'une chaîne de spins $s = \frac{D-1}{2}$ [97], voir figure 1.7. Si l'on considère l'intrication entre deux sous-systèmes de cet état, elle ne peut dépasser l'intrication d'une paire, puisqu'il s'agit d'une paire de spin $\frac{D-1}{2}$ intriquée, $S = \log D$. Cette représentation est intéressante car elle donne une interprétation physique à la dimension de lien et rend son rôle dans l'Ansatz MPS plus intuitif. Elle est également intéressante à considérer car elle illustre la capacité de l'Ansatz MPS à reproduire les comportements locaux, notamment l'intrication en loi d'aire qui se manifeste par l'intrication au travers des paires maximalement intriquées de l'état projeté.

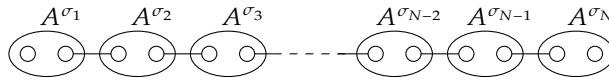


FIG. 1.7 Schéma de l'Ansatz MPS interprété comme une chaîne de singulets de spins $\frac{D-1}{2}$

Au final, on trouve que pour rendre compte d'un état avec une entropie d'intrication S d'un sous-système, la dimension de lien doit évoluer selon la loi $D \geq e^S$. Cette condition devient rapidement limitante pour des états dont l'entropie d'intrication suit une loi de volume, puisque cela implique que la dimension de lien D augmente exponentiellement avec la taille du système. Ce qui est le cas par exemple pour des états atteints via des *quenches*, pour lesquels l'entropie d'intrication croît au cours du temps jusqu'à atteindre une loi de volume. On peut ainsi voir sur la figure 1.8 provenant de l'article [60] que l'entropie des états évolués dans le temps décrits par l'algorithme DMRG stagne vers une valeur $S \leq \log D$.

D'autre part, dans le cas de l'étude de l'état fondamental d'un Hamiltonien à interaction à courte portée gappé à une dimension, l'entropie d'intrication suit une loi des aires

comme nous en avons discuté dans la sous-section 1.1.3, donc $S \sim cst$, la dimension de lien nécessaire pour reproduire correctement l'état quantique ne croît pas avec la taille du système. Si l'on s'intéresse aux états fondamentaux à 1D suivant une transgression logarithmique de la loi d'aire, on a $S \sim \frac{c}{6} \log N$ dans le cas des conditions ouvertes au bord. D'après [38], une description MPS de tels états limite l'entropie d'intrication à la valeur $S = \frac{c\kappa}{6} \log(D)$ où κ est une fonction de c , d'où $D \sim N^{\frac{1}{\kappa}}$, la dimension de lien nécessaire pour reproduire l'entropie d'intrication augmente donc assez lentement avec la taille du système.

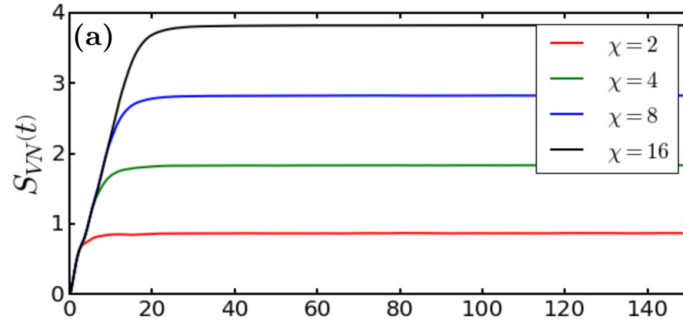


FIG. 1.8 Entropie d'intrication de von Neumann pour un sous-système de taille $N/2$ après un quench depuis un état initial aléatoire. La dimension de lien est χ . Figure tirée de [60].

États 2d-MPS et PEPS Il est en principe possible d'utiliser l'Ansatz MPS en dimensions supérieures à 1. Cependant le problème de reproduction de l'intrication évoqué précédemment est bien plus sérieux dans le cas 2D que 1D. En effet, en 2D, même pour un état fondamental d'un réseau $N \times N$ dont l'entropie d'intrication évolue en loi des aires $R_2 \sim N$, la dimension de lien D doit alors augmenter exponentiellement avec la taille du système $D \sim 2^N$ pour rendre compte de l'intrication, voir figure 1.9, puisque l'intrication entre sous-systèmes divisés par une coupe verticale doit être reproduite par un seul lien. Cela explique la différence d'efficacité notable de l'algorithme DMRG entre un système 2D sur un cylindre avec une largeur faible, même pour une hauteur très longue, par rapport à un système 2D plan où la longueur et la largeur sont similaires.

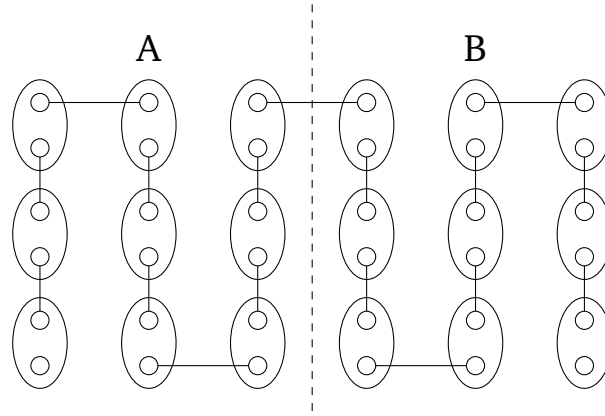


FIG. 1.9 Schéma de l'Ansatz 2d-MPS

Une autre possibilité pour utiliser l'algorithme DMRG en dimension 2 est de modifier l'Ansatz, et de considérer l'Ansatz des états projetés de paires intriquées (Projected Entangled Pair States - PEPS). Dans ce cas, l'Ansatz s'écrit d'un façon analogue au cas MPS mais les coefficients A^{σ_i} ne sont plus des matrices, mais des tenseurs de taille $\overbrace{D \times \dots \times D}^z$ où z est le nombre de coordination du site i , ie le nombre de voisins du site i , voir la figure 1.10. Chaque tenseur, associé à un site i , est alors multiplié avec les tenseurs associés aux sites voisins du site i . L'avantage de cet Ansatz est que, contrairement au cas précédent, la loi d'aire y est inscrite et la dimension de lien D n'a plus à augmenter avec la taille du système, mais alors le calcul de chaque coefficient de l'Ansatz demande la contraction d'un réseau 2D de tenseurs, ce qui représente une opération dont le coût numérique croît comme D^N , donc exponentiellement en la taille du système. Pour palier cette difficulté de calcul des coefficients certaines stratégies ont été mises en place pour contracter les tenseurs d'une façon approximée [71].

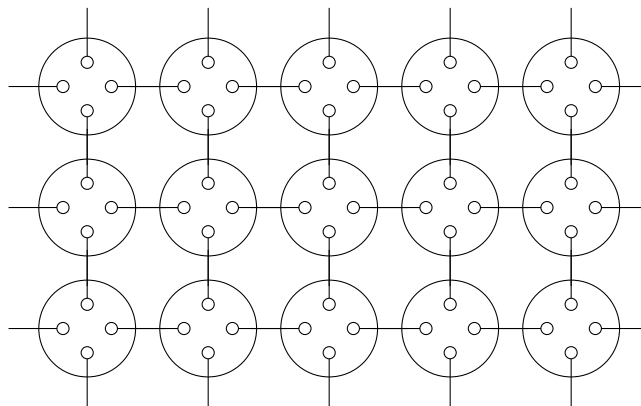


FIG. 1.10 Schéma de l'Ansatz PEPS

1.3.3 Projected BCS

Une autre méthode efficace pour choisir la forme de l'*Ansatz* est de se baser sur des fonctions d'onde de modèles physiques.

Pour illustrer cette idée, on peut s'intéresser à la modélisation de la molécule de dihydrogène proposée, en 1927, par Heitler et London [54]. Ils considèrent deux électrons fortement corrélés formant un singulet. Ce qui s'exprime sous la forme :

$$|\psi_{HL}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{1,\uparrow}^\dagger c_{2,\downarrow}^\dagger + c_{2,\uparrow}^\dagger c_{1,\downarrow}^\dagger) |0\rangle \quad (1.27)$$

où $|0\rangle$ est le vide et $c_{i,\sigma}^\dagger$ crée un électron avec spin $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow sur une orbitale de l'atome i .

Cet *Ansatz* décrit assez bien la limite atomique, lorsque les deux atomes d'hydrogène sont suffisamment éloignés l'un de l'autre pour que la configuration où l'électron est localisé sur un atome soit favorisée.

En généralisant cette approche, Pauling a développé le concept de résonance entre les différentes configurations de la molécule de benzène [55]. Poursuivant cette démarche, Fazekas et Anderson ont ensuite développé l'*Ansatz* des liens de valence résonnant (Resonating Valence Bond - RVB) [39].

Les états quantiques considérés dans l'*Ansatz* RVB sont les combinaisons linéaires d'états quantiques construits par pavage du réseau avec des singulets. Ces états ne présentent pas d'ordre magnétique, ne brisent pas les symétries du réseau et ce sont un exemple de 'liquides de spins'. Cet *Ansatz* a été proposé en premier lieu pour l'étude de l'état fondamental du modèle de Heisenberg de spins $\frac{1}{2}$ sur un réseau triangulaire. Une application remarquable de l'*Ansatz* RVB est de proposer une explication de la supraconductivité à haute température critique comme émergente du dopage d'un isolant de Mott [4].

Cependant, si l'on essaie d'optimiser l'*Ansatz* ainsi obtenu, dans le cas d'une structure de signe non triviale, on se retrouve alors face au même problème de signe que l'on a évoqué dans le cas du QMC 1.2.2. Cette fois-ci le problème du signe émerge, non pas de la structure du signe de l'état quantique mais de la structure de la base considérée, dont les éléments ne sont pas orthogonaux.

Considérons, un état quantique $|\psi\rangle$ se développant sur une base de l'espace de Hilbert $|\zeta\rangle$, qui est la base des états quantiques composés par des singulets de sites, sous la forme $|\psi\rangle = \sum_{\zeta} W_{\zeta} |\zeta\rangle$. Par un calcul que nous détaillerons ultérieurement dans la section 2.1.2, la valeur d'une observable physique O se met sous la forme suivante

$$\frac{\langle \psi | O | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_{\zeta} P_{\zeta} \tilde{O}(\zeta)}{\sum_{\zeta} P_{\zeta} Q(\zeta)} \quad (1.28)$$

où $Q(\zeta) = \sum_{\zeta'} \frac{W_{\zeta'}^*}{W_{\zeta}^*} \langle \zeta' | \zeta \rangle$, $P(\zeta) = |W(\zeta)|^2$ et $\tilde{O}(\zeta) = \sum_{\zeta'} \frac{W_{\zeta'}^*}{W_{\zeta}^*} \langle \zeta' | O | \zeta \rangle$.

Ainsi, rechercher l'état fondamental de l'*Ansatz* RVB par algorithme Monte Carlo se confronte à l'obstacle de l'augmentation exponentielle de la taille de l'échantillonnage statistique pour reproduire de façon fiable la somme $\sum_{\zeta} P_{\zeta} Q(\zeta)$, dont le signe des termes varie du fait de la non orthogonalité de la base considérée [88].

Ce problème peut être résolu en donnant une représentation fermionique de l'état RVB. Une telle représentation est fournie par le lien entre états RVB et états BCS, ie les états fondamentaux d'Hamiltoniens de type

$$\mathcal{H}_{BCS} = \sum_{R,R',\sigma} t_{R,R'} c_{R,\sigma}^{\dagger} c_{R',\sigma} + \sum_{R,R'} \Delta_{R,R'} (c_{R,\uparrow}^{\dagger} c_{R',\downarrow}^{\dagger} + c_{R',\uparrow}^{\dagger} c_{R,\downarrow}^{\dagger}) + h.c. \quad (1.29)$$

où $c_{R,\sigma}^{\dagger}$ crée un électron de spin $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ au site R , $t_{R,R'}$ est un terme de saut et $\Delta_{R,R'}$ est un terme d'appariement de singulet. Le Hamiltonien BCS permet de décrire la supraconductivité due au couplage électrons-phonons [9]. Anderson a montré qu'un état propre de cet Hamiltonien, projeté sur le sous-espace d'états avec une et une seule particule sur chaque site (par la projection de Gutzwiller [37]), correspond à un état RVB. Le calcul de valeurs moyennes sur l'état fermionique n'introduit pas de problème de signe. Ainsi cet *Ansatz* a montré son efficacité pour l'étude de l'état fondamental de plusieurs modèles de magnétisme frustré [56].

Nous allons pour notre part opter pour une autre stratégie, en se basant sur l'idée de reproduire avec fidélité les corrélations au sein du système, à distances arbitraires, ainsi que de reproduire différentes structures de signe parmi lesquelles on choisira en suivant la prescription du principe variationnel.

États à plaquettes intriquées

夫兵形象水，水之形，避高而下：兵之形，
避而虚；水因地而制流，兵因而制。
故兵无常，水无常形；能因化而取，之神

— Sun Tzu

Tel l'eau qui fuit les hauteurs et s'écoule dans la vallée, le général doit éviter les places fortes et se concentrer sur les points faibles. Tel l'eau qui s'écoule suivant le relief du terrain, le général doit s'adapter à l'adversaire. Toujours mouvant, sans forme réelle, car une tactique qui s'adapte à l'ennemi est la clé de la victoire.

Pour étudier l'état fondamental et l'état évolué dans le temps de systèmes de spins fortement corrélés, nous avons développé plusieurs optimisations variationnelles basées sur l'*Ansatz* des états à plaquettes intriquées (Entangled Plaquette States - EPS). Plus spécifiquement, dans ce chapitre, nous allons détailler la structure de notre approche, se basant sur le principe variationnel dépendant du temps et l'échantillonnage Monte Carlo ; et nous allons discuter la généralisation des états EPS que nous avons élaboré en vue de décrire des états critiques (*ie* des états quantiques dont les corrélations décroissent avec la distance en loi de puissance et qui présentent de l'intrication à longue portée). Nous montrerons ainsi que cette généralisation des états EPS est cruciale pour décrire la physique de la chaîne XX, que nous arrivons à reproduire avec une très grande précision.

2.1	<i>Ansatz</i> variationnel et algorithme d'optimisation	34
2.1.1	Paramétrisation de l'état variationnel	34
2.1.2	Calcul des quantités physiques	38
2.1.3	Principe variationnel et évolution en temps réel et imaginaire	41
2.2	Application à l'état fondamental de la chaîne XX	47
2.2.1	Résolution exacte	47
2.2.2	Fonctionnement de l'algorithme d'optimisation variationnelle	50
2.2.3	Comparaison avec le résultat exact	54
2.2.4	Contenance en information	57
2.3	Entropie d'intrication d'un état LR-EPS aléatoire	60

2.1 *Ansatz* variationnel et algorithme d'optimisation

La méthode variationnelle repose sur deux idées principales : restreindre l'espace des états quantiques décrits par l'*Ansatz* en choisissant les variables décrivant le système ; et chercher parmi ces états quantiques l'état le plus proche de l'état recherché en s'appuyant sur un principe variationnel fondamental.

Nous commencerons par ce qui entrera en argument des algorithmes d'optimisation variationnelle : le choix des variables décrivant un état quantique de l'*Ansatz*. Nous présenterons l'*Ansatz* EPS à plaquettes adjacentes (A-EPS) qui est l'*Ansatz* sur lequel nous avons basé notre approche, avant de présenter la généralisation que nous avons développé, l'*Ansatz* EPS à longue portée (LR-EPS) et nous comparerons leurs résultats dans la partie 2.2. Nous nous intéresserons ensuite à l'algorithme d'optimisation en tant que tel. Nous verrons comment pour un système dans un état quantique donné, nous avons calculé par échantillonnage Monte Carlo les différentes variables physiques décrivant le système. Et enfin nous discuterons comment, étant donné un *Ansatz* variationnel, nous pouvons chercher l'état fondamental d'un système donné, ou encore étudier l'évolution d'un état quantique donné au travers du temps, par un principe variationnel.

2.1.1 Paramétrisation de l'état variationnel

Dans cette sous-section, nous allons principalement nous intéresser à deux *Ansätze* basés sur l'approche EPS relativement différents dans leur philosophie : l'A-EPS et le LR-EPS. Dans ces deux cas, nous considérerons un état quantique du système $|\psi\rangle$. Comme nous l'avons présenté précédemment, cet état quantique se développe sur la base de calcul du système $|\sigma\rangle$ sous la forme $|\psi\rangle = \sum_{\sigma} W(\sigma) |\sigma\rangle$. On remarquera que tout état quantique peut s'écrire sous cette forme avec 2^N éléments distincts $W(\sigma)$, cependant l'*Ansatz* variationnel est décrit par un nombre plus restreint de variables imposant une structure particulière aux coefficients $W(\sigma)$.

A-EPS Afin de gagner en clarté et de donner une intuition du comportement physique de l'algorithme, nous allons construire l'*Ansatz* A-EPS à partir de l'*Ansatz* champ moyen que nous avons présenté précédemment dans la section 1.3.1. Un état quantique décrit par cet *Ansatz* s'écrit donc $|\psi\rangle = \sum_{\sigma} \prod_i C_i^{\sigma_i} |\sigma\rangle$, le produit s'effectuant sur tous les sites i du système et pour chacun de ces sites, on multiplie par l'une des deux variables possibles C_i^{\uparrow} ou C_i^{\downarrow} en fonction de la valeur σ_i de la configuration σ sur le site i , voir figure 2.1a. On peut alors noter que l'état quantique est décrit par bien moins de variables que dans le cas du calcul exact. En effet, dans le cas champ moyen, un état quantique de l'*Ansatz* est décrit par un nombre de variables égal au nombre de sites multiplié par le nombre de configurations de spin : $2N$, au lieu des 2^N d'une fonction d'onde générique. Ce nombre de variables, linéaire en la taille du système,

permet d'utiliser cet *Ansatz* pour étudier des systèmes de grande taille contrairement à l'algorithme de diagonalisation exacte.

On peut généraliser cet *Ansatz* au cas d'une décomposition du réseau en agrégats. Si l'on ne considère plus des sites, mais des plaquettes P de taille m ne se recouvrant pas la décomposition se réécrit alors $|\psi\rangle = \sum_{\sigma} \prod_P C_P^{\sigma_P} |\sigma\rangle$ où le produit se fait sur toutes les plaquettes P et σ_P est la sous-configuration associée à la configuration σ sur la plaquette P . Cet *Ansatz* correspond à la classe variationnelle des états de champ moyen à agrégats (cluster mean-field state), voir figure 2.1b pour le cas $m = 3$.

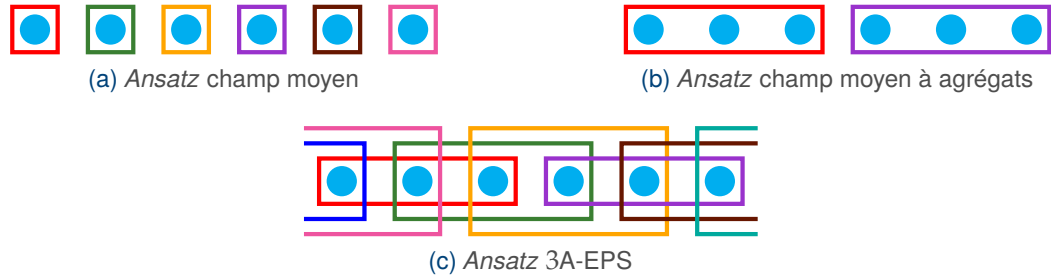


FIG. 2.1 Schémas de différents Ansätze à plaquettes adjacentes permettant de rechercher l'état fondamental d'une chaîne de spins

L'état quantique ainsi défini est décrit par $\frac{N}{m}$ plaquettes et sur chacune de ces plaquettes, il y a 2^m sous-configurations possibles. L'*Ansatz* ainsi construit est décrit par $2^{m \frac{N}{m}}$ variables. Le nombre de variables est alors toujours linéaire en la taille du système, ce qui permet de l'utiliser pour des grands systèmes tout comme l'*Ansatz* champ moyen.

On remarquera cependant que le nombre de variables est exponentiel en la taille des plaquettes et agrandir les plaquettes augmente donc rapidement la complexité de l'algorithme, ceci est compréhensible puisque, dans ce cas extrême $m \rightarrow N$, l'*Ansatz* se ramène à l'espace de Hilbert tout entier. Cependant cet *Ansatz* à agrégats ne tient pas compte des corrélations qu'au sein d'une plaquette, mais ignore les corrélations entre plaquettes de la même façon que l'algorithme champ moyen à un site ignorait les corrélations entre sites.

Une modification cruciale de l'*Ansatz* pour rendre compte des corrélations entre les différentes plaquettes dans le cas de plaquettes de taille m composées de sites adjacents est de les considérer se recouvrant sur $(m - 1)$ sites (pour des systèmes 1D), ce choix définit l'*Ansatz* m A-EPS (figure 2.1c). L'*Ansatz* s'écrit alors sous la même forme que précédemment $|\psi\rangle = \sum_{\sigma} \prod_P C_P^{\sigma_P} |\sigma\rangle$ mais le produit se fait ici sur toutes les plaquettes P se recouvrant les unes les autres. Cet *Ansatz*, introduit par [23][68], a été utilisé avec succès dans l'étude de systèmes de spins à une dimension [31] et à deux dimensions, en l'absence [6] et en présence de frustration [67][65][66]. Nous discuterons dans la section 2.2 de l'efficacité de cet algorithme à reproduire les corrélations entre sites dans le système de spins en dimension $d = 1$. L'*Ansatz* m A-EPS est décrit par $2^m N$

variables, et comme dans le cas de l'*Ansatz* précédent la dépendance est toujours linéaire en la taille du système mais est exponentielle en la taille de la plaquette.

LR-EPS L'*Ansatz* A-EPS présente l'avantage d'introduire des corrélations entre plaquettes. Cependant, pour aller plus loin, une variante visant à introduire des corrélations à longue portée est d'utiliser non plus des plaquettes de sites adjacents mais des plaquettes de taille $n = 2m$ dont les sites sont répartis en deux agrégats de m sites adjacents, qui peuvent être placés à des distances relatives arbitraires (figure 2.2). Ce choix définit l'*Ansatz* nLR-EPS. Dans la suite de ce chapitre, nous nous concentrerons sur le cas $n = 2$, pour considérer ensuite la cas $n > 2$ dans le chapitre 3.

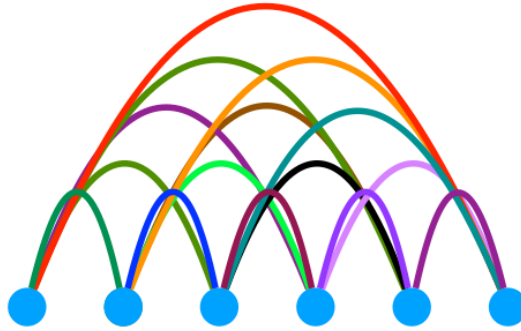


FIG. 2.2 Schéma de l'*Ansatz* EPS à plaquettes délocalisées de taille 2 pour une chaîne de taille 6, il y a donc 15 plaquettes représentées

Dans le cas 2LR-EPS, il est alors possible d'écrire les coefficients sous une forme exponentielle par

$$W_{\sigma} = \prod_{i < j} e^{i(a_{0ij} + a_{1ij}\sigma_i + a_{2ij}\sigma_j + b_{ij}\sigma_i\sigma_j)} \quad (2.1)$$

où les variables a_{ij}^0 , a_{ij}^1 , a_{ij}^2 et b_{ij} sont à valeur complexe. La forme de ces coefficients établit un lien entre l'*Ansatz* LR2 EPS et l'*Ansatz* spin-Jastrow [75]. Cependant, notre approche généralise les états spin-Jastrow par la taille des plaquettes qui sont explicitement corrélés dans l'*Ansatz* et par l'utilisation de coefficients complexes.

L'*Ansatz* 2LR-EPS est constitué de plaquettes couvrant les paires de sites séparés d'une distance quelconque ; le nombre de variables utilisées pour décrire un état quantique quelconque de l'*Ansatz* est alors le nombre de paires dans un réseau de N sites multiplié par le nombre de sous-configurations possibles sur ces paires de sites : $2N(N-1) \underset{N \gg 1}{\sim} 2N^2$. Le nombre de variables augmente alors en N^2 , ce qui est plus lourd que dans le cas A-EPS, mais le coût reste polynomial en la taille du système, ce qui permet à l'*Ansatz* d'être applicable à des systèmes de grande taille. Pour se donner un ordre de grandeur, par rapport aux systèmes étudiés lors de ma thèse, pour un système de taille $N = 20$, un état quantique est décrit par 80 variables complexes dans le cas de l'algorithme

2A-EPS, 640 variables complexes dans le cas 5A-EPS et 760 dans le cas 2LR-EPS. Pour un système de taille 80, un état quantique est décrit par 320 variables complexes dans le cas 2A-EPS, par 2560 variables complexes dans le cas 5A-EPS et 12640 dans le cas 2LR-EPS. Cependant, la complexité de l'algorithme ne dépend pas que du nombre de variables, en effet, comme nous allons en discuter dans la section suivante 2.1.2, le calcul des grandeurs physiques dans le cas LR-EPS est plus complexe que dans le cas A-EPS, ce qui augmente d'autant la durée de l'optimisation. Cependant, bien que cette croissance des paramètres LR-EPS en N^2 semble imposer un coût important par rapport au A-EPS (dont le nombre de paramètres croît comme N), ce coût peut être sensiblement réduit en utilisant les symétries du système.

Simplification de l'Ansatz Il est important de noter que le choix de la forme de l'Ansatz à considérer ne s'arrête pas simplement au choix entre algorithme A-EPS et LR-EPS et au choix de la taille des plaquettes. En effet, le gros intérêt de ces approches variationnelles est leur adaptabilité en fonction du système étudié et des propriétés physique que l'on cherche à étudier. Comprendre la physique des états quantiques contenus dans l'Ansatz était en effet une grande partie de mon travail de thèse. Dans le cas du m A-EPS, on se concentre sur les corrélations à m points à courte portée, alors que dans le cas des 2LR-EPS, au prix d'une complexité augmentée, on met en avant les corrélations à distance quelconque, mais en se concentrant sur les corrélations à deux sites.

Dans le cas d'un système physique donné, il est possible d'utiliser les propriétés du système pour réduire le nombre de variables. En particulier si le système étudié est invariant par translation, il est possible de considérer que toutes les variables associées à des plaquettes translatées les unes par rapport aux autres sont en fait égales modulo un facteur de phase. Dans le cas du m A-EPS, l'Ansatz est $|\psi\rangle = \sum_{\sigma} \prod_P A^{\sigma_P} e^{i\phi_P^{\sigma_P}} |\sigma\rangle$. On réduit alors le nombre de variables A^{σ_P} de module à 2^m , on remarque que ce nombre ne dépend plus de la taille du système. On peut effectuer la même procédure dans le cas du 2LR-EPS et on a alors des variables de module $A_d^{\sigma_P}$, où d est la distance entre les deux sites de la plaquette, et des variables de phase $\phi_i^{\sigma_P}$, où i est le premier site de la plaquette. Un état quantique quelconque de cet Ansatz se réécrit alors comme $|\psi\rangle = \sum_{\sigma} \prod_{i < j} A_{d_{ij}}^{\sigma_{ij}} e^{i\phi_i^{\sigma_{ij}}} |\sigma\rangle$ où d_{ij} est la distance entre le site i et le site j ($d_{ij} = |i-j| \bmod N$) et σ_{ij} est la sous-configuration sur la plaquette constituée des sites i et j . On réduit alors le nombre de variables de module $A_{d_{ij}}^{\sigma_{ij}}$ à $2(N-1)$, et le nombre de variables de phase $\phi_i^{\sigma_{ij}}$ à $4N$; la dépendance est alors linéaire en la taille du système. On verra même plus tard, sections 3.2.1, qu'il est possible de contraindre encore plus cette invariance dans certains cas particuliers, réduisant d'autant le nombre de variables nécessaire pour décrire l'Ansatz.

C'est cette forme des coefficients 2LR-EPS que nous avons considérée dans la suite du chapitre ; nous avons cependant conservé l'*Ansatz* A-EPS sans considérer de symétries, le nombre de variables étant réduit.

2.1.2 Calcul des quantités physiques

Dans la première sous-section, nous avons construit les états quantiques utilisés par les différentes versions de l'algorithme EPS. Dans cette section, nous allons voir comment à partir d'un *Ansatz* donné nous pouvons calculer les différentes grandeurs physiques d'un système dans un état quantique paramétré par cet *Ansatz*.

Calculs des valeurs moyennes Les valeurs moyennes d'observables sont obtenues par un échantillonnage stochastique de la base $|\sigma\rangle$ par la méthode Monte Carlo. Pour ce faire, commençons par réécrire la formule de l'énergie du système dans un état quantique quelconque qui se décompose sur la base de calcul comme $|\psi\rangle = \sum_{\sigma} W(\sigma) |\sigma\rangle$.

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle &= \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \\
 &= \frac{\sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} W(\sigma) W^*(\sigma') \langle \sigma' | H | \sigma \rangle}{\sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} W(\sigma) W^*(\sigma') \langle \sigma' | \sigma \rangle} \\
 &= \frac{\sum_{\sigma} |W(\sigma)|^2 E(\sigma)}{\sum_{\sigma} |W(\sigma)|^2} \\
 &= \sum_{\sigma} P(\sigma) E(\sigma)
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

Où nous avons défini les quantités $E(\sigma) = \sum_{\sigma'} \frac{W^*(\sigma')}{W^*(\sigma)} \langle \sigma' | H | \sigma \rangle$ et $P(\sigma) = \frac{|W(\sigma)|^2}{\sum_{\sigma'} |W(\sigma')|^2}$.

On appelle la quantité $E(\sigma)$ l'estimateur de l'énergie. On remarque que toute observable A peut de façon analogue se décomposer sous la forme $\sum_{\sigma} P(\sigma) A(\sigma)$ pour un estimateur $A(\sigma)$ de l'observable A .

Cependant, par rapport à une observable générique A , l'expression de l'énergie moyenne, comme celle de toute observable extensive qui se compose de $O(N)$ observables locales, présente un gros avantage : l'estimateur est rapide à calculer. En effet, dans le cas d'un Hamiltonien avec interactions à deux spins de portée finie, pour une configuration $|\sigma\rangle$ donnée la quantité $\langle \sigma' | H | \sigma \rangle$ est nulle sauf pour un nombre $O(N)$ de configurations σ' qui ne diffèrent de la configuration σ qu'en deux spins. Dans le cas spécifique des *Ansätze* EPS, le calcul de la quantité $\frac{W^*(\sigma')}{W^*(\sigma)}$ se résume pour le *mA*-EPS au quotient de moins de $2m$ coefficients $C_p^{\sigma_p}$, P étant les plaquettes comprenant les spins changeant de direction entre σ et σ' , les autres coefficients se simplifiant les uns avec les autres ;

pour le 2LR-EPS, ce quotient se réduit à un quotient de l'ordre de N coefficients. Le calcul de ces estimateurs est donc assez rapide. On remarquera cependant la différence de la complexité de ce calcul entre le cas mA -EPS et 2LR-EPS : le calcul de l'estimateur de l'énergie est linéaire en N dans le cas mA -EPS mais augmente quadratiquement avec la taille du système dans le cas 2LR-EPS.

Il reste ensuite à calculer la somme \sum_{σ} , cependant cette somme est effectuée sur l'ensemble des configurations σ et comporte donc un nombre de termes qui croît exponentiellement avec la taille du système. Pour éviter ce coût numérique, il est possible d'échantillonner cette somme en construisant une chaîne de Markov en utilisant l'algorithme de Metropolis [37][64], qui va interpréter le terme $P(\sigma)$ comme une probabilité, en effet, toutes les valeurs possibles de $P(\sigma)$ sont positives.

Algorithme Metropolis L'algorithme Metropolis permet d'effectuer un échantillonnage statistique et parcourir aléatoirement l'espace des configurations en le biaisant par la probabilité $P(\sigma)$. Les observables sont alors l'espérance des estimateurs évalués en les configurations trouvées par l'échantillonnage statistique.

Pour effectuer cet échantillonnage statistique, on part d'une configuration classique σ_{old} donnée et on choisit un des spins au hasard, en *flippant* ce spin on obtient une nouvelle configuration σ_{new} et on définit alors une probabilité de passer de l'ancienne à la nouvelle configuration, que l'on appelle probabilité d'acceptation du spin *flip*. La valeur de cette probabilité d'acceptation définit une chaîne de Markov et elle est choisie de telle sorte que le régime stationnaire de la chaîne produit statistiquement la probabilité $P(\sigma)$ [37]. Une telle condition est obtenue en imposant que la probabilité de passer d'une configuration σ_{old} à une configuration σ_{new} soit

$$P_{acc} = \min \left(\left| \frac{W(\sigma_{new})}{W(\sigma_{old})} \right|^2, 1 \right). \quad (2.3)$$

Tout comme dans le paragraphe précédent, le calcul de ce quotient est simplifié par la structure multiplicative des coefficients des Ansätze EPS et il demande uniquement le calcul des rapports entre coefficients associés aux plaquettes qui contiennent le spin mis à jour.

Une fois cette probabilité calculée, on tire un réel p entre 0 et 1 au hasard et en fonction du résultat obtenu, on prend la nouvelle configuration ($p \leq P_{acc}$) ou on garde l'ancienne ($p > P_{acc}$) et on réitère le processus. On obtient ainsi un échantillonnage statistique de configurations $\{\sigma\}$, par des chaînes de Markov, reproduisant les probabilités $P(\sigma)$.

Un pas Monte Carlo est alors défini par N essais de *spin flips* et on ne retient dans notre échantillonnage que les configurations obtenues après un pas Monte Carlo complet afin de décorréler deux configurations successives.

Dans le cas particulier où la physique du système étudié interdit un certain nombre de configurations $|\sigma\rangle$, comme dans le cas d'un système à aimantation totale constante, il est possible de restreindre l'échantillonnage aux seules configurations possibles. Par exemple, dans le cas d'un système où l'aimantation totale M commute avec le Hamiltonien du système, il est possible de considérer qu'une mise à jour élémentaire consiste en fait à prendre deux spins au hasard et à les *flipper* seulement si $p \geq P_{acc}$ et qu'ils sont de sens opposés ; on restreint alors l'échantillonnage aux configurations d'aimantation totale M , si l'on est parti d'une configuration de spins à la bonne aimantation.

Cet échantillonnage statistique introduit une erreur qui décroît comme l'inverse de la racine carrée du nombre de pas Monte Carlo ; pour plus de détails, se reporter à l'annexe A.

Il reste un problème lié à cet échantillonnage : si la configuration arbitraire dont l'on part est trop improbable au sens des probabilités $P(\sigma)$, les premiers pas de l'échantillonnage ne seront pas représentatifs et il faudra attendre un certain nombre de pas Monte Carlo avant de commencer réellement à échantillonner des configurations probables et non pas seulement des événements rares (ce phénomène est appelé la thermalisation de l'algorithme Monte Carlo). Pour éviter les biais statistiques dû à la thermalisation, dans chacun de nos échantillonnages nous avons retiré les premières configurations (le premier dixième des pas effectués par l'algorithme Monte Carlo) jusqu'à ce que nous considérons que l'algorithme Métropolis avait thermalisé. De plus à chaque fois que l'on passe d'un état quantique à un autre dans la minimisation (voir la prochaine sous-section), la première configuration utilisée pour l'algorithme Métropolis du nouvel état était la dernière configuration utilisée pour l'algorithme Métropolis de l'état précédent. Ainsi, si les deux états sont assez proches l'un de l'autre, la configuration a plus de chances de faire thermaliser rapidement l'algorithme Métropolis pour le nouvel état quantique.

Pour finir, on remarquera que dans le cas de notre algorithme le quotient $\sum_{\sigma} |W(\sigma)|^2$ est constitué de termes positifs. L'approche que nous utilisons n'est donc pas soumise au problème du signe, comme nous en avons discuté dans la section 1.2.2. C'est en effet la positivité de ces coefficients qui nous permet de définir les probabilités $P(\sigma)$ et d'utiliser un algorithme Monte Carlo pour le calcul des observables physiques du système.

2.1.3 Principe variationnel et évolution en temps réel et imaginaire

Dans les sous-parties précédentes nous avons introduit l'*Ansatz* EPS et nous avons vu comment calculer les observables liées à ces états quantiques. Dans cette sous-section nous allons voir comment minimiser l'énergie de ces états en optimisant leurs paramètres et comment approximer la dynamique unitaire de l'état au travers de notre *Ansatz*. Nous allons montrer que ces deux problèmes sont liés, et que la méthode pour approximer l'état fondamental d'un système est la même que celle utilisée pour approximer son évolution temporelle, car on peut les baser sur un même principe variationnel [73].

Principe variationnel sur l'état fondamental Un résultat fondamental en mécanique quantique est qu'en prenant un état arbitraire $|\psi(\mathbf{C})\rangle$ dépendant des paramètres \mathbf{C} , on a

$$E(\mathbf{C}) = \frac{\langle \psi(\mathbf{C}) | \mathcal{H} | \psi(\mathbf{C}) \rangle}{\langle \psi(\mathbf{C}) | \psi(\mathbf{C}) \rangle} \geq E_0 \quad (2.4)$$

où E_0 est l'énergie du fondamental du Hamiltonien $|\psi_0\rangle$.

Donc chercher la meilleure approximation de l'état fondamental $|\psi_0\rangle$ au sein de l'*Ansatz* $|\psi(\mathbf{C})\rangle$ revient à chercher la minimisation absolue de la fonction $E(\mathbf{C})$, que l'on appellera dans la suite l'optimum variationnel.

Principe variationnel dépendant du temps (time-dependent variational principle - TDVP) Le principe variationnel dépendant du temps permet de dériver l'équation de Schrödinger $i|\dot{\psi}\rangle = \mathcal{H}|\psi\rangle$ comme l'extremum de l'action

$$\mathcal{S} = \int dt \mathcal{L}(|\psi(t)\rangle, \langle\psi(t)|) \quad (2.5)$$

avec le Lagrangien effectif

$$\mathcal{L}(|\psi\rangle, \langle\psi|) = \frac{i}{2} \frac{\langle\psi|\dot{\psi}\rangle - \langle\dot{\psi}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} - \frac{\langle\psi|\mathcal{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}. \quad (2.6)$$

\mathcal{S} est une fonctionnelle du vecteur dépendant du temps $|\psi(t)\rangle$ et de son conjugué $\langle\psi(t)|$ qui sont considérés comme indépendants. Si l'on considère la variation de la fonctionnelle $\delta\mathcal{S} = \int dt \delta\mathcal{L}$, on trouve que la fonctionnelle \mathcal{S} est extrémale lorsque l'état quantique $|\psi(t)\rangle$ vérifie l'équation (de type Euler-Lagrange)

$$(i\partial_t - \mathcal{H})|\psi\rangle = \frac{\langle\psi|i\partial_t - \mathcal{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} |\psi\rangle. \quad (2.7)$$

L'équation ainsi obtenue, bien que proche, n'est pas l'équation de Schrödinger, cependant, en posant

$$|\phi\rangle = \exp\left(i \int_{-\infty}^t dt' \frac{\langle\psi|i\partial_{t'} - \mathcal{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\right) |\psi\rangle \quad (2.8)$$

le vecteur ainsi défini $|\phi\rangle$ vérifie bien l'équation de Schrödinger

$$(i\partial_t - \mathcal{H})|\phi\rangle = 0. \quad (2.9)$$

Au final, on trouve que l'état quantique $|\psi\rangle$ extrémisant l'action 2.5 est égal (à une phase dépendant du temps près) à la solution de l'équation de Schrödinger. Le facteur multiplicatif les différenciant étant une phase globale, on obtient que toute propriété physique de $|\phi\rangle$ coïncide avec celle de $|\psi\rangle$. On peut donc se concentrer sur $|\psi(t)\rangle$ dans la suite de cette section.

Application à la méthode variationnelle Le TDVP ramène la question de l'évolution temporelle d'un état quantique à l'extrémalisation de l'action donnée par la formule 2.5. Nous allons donc regarder comment se réécrit le Lagrangien effectif (voir équation 2.6) dans le cas où l'état quantique dépendant du temps s'écrit sous la forme d'un *Ansatz* variationnel $|\psi(\mathbf{C})\rangle$ dépendant des paramètres $\mathbf{C} = (C_1, C_2, \dots, C_M) = \mathbf{C}(t) \in \mathbb{C}^M$ [73] :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{C}, \mathbf{C}^*) &= \frac{i}{2} \frac{\sum_j (\dot{C}_j \langle\psi|\partial_{C_j}\psi\rangle - \dot{C}_j^* \langle\partial_{C_j^*}\psi|\psi\rangle)}{\langle\psi|\psi\rangle} - \frac{\langle\psi|\mathcal{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \\ &= \frac{i}{2} \sum_j (\dot{C}_j \partial_{C_j} - \dot{C}_j^* \partial_{C_j^*}) \ln N(\mathbf{C}, \mathbf{C}^*) - E(\mathbf{C}, \mathbf{C}^*) \end{aligned} \quad (2.10)$$

en posant $N(\mathbf{C}, \mathbf{C}^*) = \langle\psi(\mathbf{C})|\psi(\mathbf{C})\rangle$ et $E(\mathbf{C}, \mathbf{C}^*) = \frac{\langle\psi(\mathbf{C})|\mathcal{H}|\psi(\mathbf{C})\rangle}{\langle\psi(\mathbf{C})|\psi(\mathbf{C})\rangle}$, et en considérant \mathbf{C} et \mathbf{C}^* comme des variables indépendantes. Le problème de l'évolution temporelle d'un état quantique se ramène donc à l'étude d'un Lagrangien effectif fonction d'un vecteur complexe $\mathbf{C}(t)$.

Si l'on décompose l'état quantique du système à un temps t donné $|\psi(\mathbf{C}(t))\rangle$ dans la base de calcul $|\sigma\rangle$ en $|\psi(\mathbf{C})\rangle = \sum_{\sigma} W_{\sigma}(\mathbf{C}) |\sigma\rangle$ où $W_{\sigma}(\mathbf{C}) = \langle\sigma|\psi(\mathbf{C})\rangle$, alors la dérivée par rapport aux paramètres de $|\psi\rangle$ s'écrit

$$|\partial_{C_j}\psi\rangle = \sum_{\sigma} \partial_{C_j} W_{\sigma}(\mathbf{C}) |\sigma\rangle; \quad (2.11)$$

ces M vecteurs non-orthogonaux forment ce qu'on appelle l'espace tangent à l'ensemble des états quantiques faisant parti de l'*Ansatz* variationnel considéré.

En effectuant la dérivée fonctionnelle de l'action par rapport aux variables C_j et C_j^* , les équations du mouvement se ramènent à

$$i \sum_j S_{kj} \dot{C}_j = \partial_{C_k^*} E \quad (2.12)$$

où la matrice S est la matrice définie par

$$S_{kj} = \partial_{C_k^*} \partial_{C_j} \ln N. \quad (2.13)$$

Puisque N est réel, la matrice S est donc hermitienne.

Finalement, le paramètre variationnel dépendant du temps minimisant l'action (2.5) évolue selon l'équation

$$i \dot{\mathbf{C}} = S^{-1} \nabla_{\mathbf{C}^*} E(\mathbf{C}, \mathbf{C}^*). \quad (2.14)$$

De plus, en notant $\langle O \rangle_{MC} = \frac{\sum_{\sigma} |W_{\sigma}(\mathbf{C})|^2 O(\sigma)}{\sum_{\sigma} |W_{\sigma}(\mathbf{C})|^2}$ et $O_k = \partial_{C_k} \ln W_{\sigma}(\mathbf{C})$, on a

$$\begin{aligned} \langle O_k \rangle_{MC} &= \langle \partial_{C_k} \ln W_{\sigma}(\mathbf{C}) \rangle_{MC} \\ &= \frac{1}{\sum_{\sigma} |W_{\sigma}(\mathbf{C})|^2} \sum_{\sigma} |W_{\sigma}(\mathbf{C})|^2 \frac{\partial_{C_k} W_{\sigma}(\mathbf{C})}{W_{\sigma}(\mathbf{C})} \\ &= \frac{\langle \psi | \partial_{C_k} \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle O_j O_k^* \rangle &= \langle \partial_{C_j} \ln W_{\sigma}(\mathbf{C}) \partial_{C_k^*} \ln W_{\sigma}(\mathbf{C})^* \rangle_{MC} \\
&= \frac{1}{\sum_{\sigma} |W_{\sigma}(\mathbf{C})|^2} \sum_{\sigma} |W_{\sigma}(\mathbf{C})|^2 \frac{\partial_{C_j} W_{\sigma}(\mathbf{C})}{W_{\sigma}(\mathbf{C})} \frac{\partial_{C_k^*} W_{\sigma}(\mathbf{C})^*}{W_{\sigma}(\mathbf{C})^*} \\
&= \frac{\langle \partial_{C_k^*} \psi | \partial_{C_j} \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} .
\end{aligned}$$

Il est alors possible de réécrire la matrice S sous une forme qui la rende plus facile à calculer par algorithme Monte Carlo :

$$S_{kj} = \langle O_j O_k^* \rangle_{MC} - \langle O_j \rangle_{MC} \langle O_k^* \rangle_{MC} . \quad (2.15)$$

Plus précisément, dans le cas de l'*Ansatz* EPS, on trouve grâce à la structure multiplicative des coefficients que l'estimateur du gradient de l'énergie selon une variable $C_P^{\sigma_P}$ s'écrit sous la forme

$$\frac{\partial \langle E \rangle_{MC}}{\partial C_P^{\sigma_P}} = \left\langle \frac{1}{W(\sigma)} \frac{\partial W(\sigma)}{\partial C_P^{\sigma_P}} (E(\sigma) - \langle E \rangle_{MC}) \right\rangle_{MC} . \quad (2.16)$$

Le facteur $\frac{1}{W(\sigma)} \frac{\partial W(\sigma)}{\partial C_P^{\sigma_P}}$ est en réalité assez simple à calculer car il vaut $\frac{1}{C_P^{\sigma_P}}$ si la configuration σ_P est réalisée sur la plaquette P pour la configuration σ et 0 sinon.

Et, en posant k l'indice associé à la variable $C_{P_k}^{\sigma_{P_k}^{(k)}}$, les coefficients de la matrice S s'écrivent

$$S_{kk'} = \left\langle \frac{1}{C_{P_k}^{\sigma_{P_k}^{(k)}}} \frac{1}{(C_{P_{k'}}^{\sigma_{P_{k'}}^{(k')}})^*} \delta_{\sigma_{P_k} \sigma_{P_k}^{(k)}} \delta_{\sigma_{P_{k'}} \sigma_{P_{k'}}^{(k')}} \right\rangle - \left\langle \frac{1}{C_{P_k}^{\sigma_{P_k}^{(k)}}} \delta_{\sigma_{P_k} \sigma_{P_k}^{(k)}} \right\rangle \left\langle \frac{1}{(C_{P_{k'}}^{\sigma_{P_{k'}}^{(k')}})^*} \delta_{\sigma_{P_{k'}} \sigma_{P_{k'}}^{(k')}} \right\rangle . \quad (2.17)$$

Évolution en temps réel et imaginaire Tous les algorithmes que nous avons utilisés pour manipuler notre *Ansatz* variationnel se basent sur l'équation 2.14. En effet, pour approximer l'évolution temporelle $|\psi(t)\rangle$ d'un état quantique paramétré comme EPS $|\psi_0(\mathbf{C}_0)\rangle$ d'un système décrit par le Hamiltonien \mathcal{H} , on calcule l'énergie E liée à ce Hamiltonien et son gradient, ainsi que la matrice S , par échantillonnage Monte Carlo, comme nous l'avons vu dans la sous-section 2.1.2. Enfin, on fait évoluer les paramètres \mathbf{C} de l'état de \mathbf{C}_0 à \mathbf{C}_1 en linéarisant la formule 2.14 par $dt \dot{\mathbf{C}} \simeq \mathbf{C}_1 - \mathbf{C}_0$ pour un pas de temps dt suffisamment petit pour que la linéarisation soit une bonne approximation de la dérivée ; on a alors

$$\mathbf{C}_1 \simeq \mathbf{C}_0 - i dt S^{-1} \nabla_{\mathbf{C}^*} E(\mathbf{C}_0, \mathbf{C}_0^*) . \quad (2.18)$$

Pour étudier non plus l'évolution temporelle, mais pour trouver la meilleure approximation offerte par l'Ansatz pour l'état fondamental du système, on peut regarder une évolution en temps imaginaire [37]. En effet, si on considère un système dans l'état quantique $|\psi_0\rangle$, son évolution temporelle $|\psi(t)\rangle$ est solution de l'équation de Schrödinger et s'écrit

$$|\psi(t)\rangle = e^{-it\mathcal{H}} |\psi_0\rangle . \quad (2.19)$$

Si l'on effectue une rotation de Wick, ie si l'on considère un temps imaginaire $\tau = it$ et que l'on décompose $|\psi_0\rangle$ dans la base des vecteurs propres $|E\rangle$ de \mathcal{H} , alors on a

$$|\psi(\tau)\rangle = \sum_E e^{-\tau E} \langle E|\psi_0\rangle |E\rangle . \quad (2.20)$$

Dans le cas d'un système dont le fondamental $|E_0\rangle$ d'énergie E_0 n'est pas dégénéré (ou dans lequel l'état initial $|\psi_0\rangle$ n'a un recouvrement fini qu'avec un des états dégénérés), on peut réécrire l'état quantique sous la forme

$$|\psi(\tau)\rangle = e^{-\tau E_0} \left(\langle E_0|\psi_0\rangle |E_0\rangle + \sum_{E>E_0} e^{-\tau(E-E_0)} \langle E|\psi_0\rangle |E\rangle \right) . \quad (2.21)$$

Ainsi, puisque $E - E_0 > 0$, tous les termes différents de $|E_0\rangle$ disparaissent exponentiellement au cours de l'évolution temporelle et, à un facteur de normalisation $e^{-\tau E_0} \langle E_0|\psi_0\rangle$ près, l'état $|\psi(\tau)\rangle$ évolue vers l'état fondamental du système. Il est donc possible d'utiliser l'algorithme d'évolution temporelle que nous avons construit précédemment pour rechercher l'état fondamental d'un système en considérant non plus un temps réel t mais imaginaire τ en utilisant la formule suivante de passage d'un état à un autre

$$\mathbf{C}_{new} \simeq \mathbf{C}_{old} - d\tau S^{-1} \nabla_{\mathbf{C}^*} E(\mathbf{C}_{old}, \mathbf{C}_{old}^*) . \quad (2.22)$$

Dans le cas de la recherche de l'état fondamental, on remarquera que l'algorithme que nous avons construit jusqu'à maintenant se ramène à une *méthode du gradient standard* dans le cas où la matrice S est l'identité ; cependant, dans notre cas, la structure de la matrice S est souvent plus complexe. Il est intéressant de noter que la matrice S que nous avons utilisée est exactement la même que celle utilisée par les algorithmes de *reconfiguration stochastique* [20] [37].

Plus généralement, un point stationnaire est défini par la relation $\nabla_C E = 0$. Ainsi en utilisant la formule 2.22, et tant que l'on utilise une matrice S définie et positive, l'algorithme avancera dans la direction du gradient et ne pourra converger que vers un point stationnaire de la fonction énergie. Le choix de la matrice S que nous avons fait suite au raisonnement par évolution en temps imaginaire n'est pas le seul permettant de trouver l'état fondamental, mais de par sa méthode de construction, c'est un choix efficace.

Cependant, il peut être nécessaire de modifier la forme de la matrice S par rapport à la prescription du TDVP. En effet, pour des raisons d'erreurs statistiques sur le calcul Monte Carlo ou de redondance de certaines variables de l'*Ansatz* dans l'état quantique choisi au départ, la matrice S calculée par l'algorithme peut s'avérer non-inversible. Dans le cas de l'étude de l'évolution temporelle d'un état suite à un *quench*, nous avons utilisé la pseudo-inverse de Moore-Penrose pour pallier cette éventualité. Dans le cas de la minimisation de l'énergie, nous avons préféré exploiter la robustesse de l'algorithme face au choix de la matrice S pour contourner cette éventualité en déformant la matrice S . Nous avons suivi la stratégie utilisée par G.Carleo et M.Troyer [20] en ajoutant un terme diagonal à la matrice suivant $S_{kk'} \rightarrow S_{kk'} + \delta_{kk'} \lambda_\tau$ où λ_τ est une suite indépendante de k et k' qui décroît vers 0 avec le temps imaginaire τ . Ainsi, puisque les termes diagonaux $S_{kk} = \langle |O_k|^2 \rangle - |\langle O_k \rangle|^2 \geq 0$ sont positifs par définition, la matrice S modifiée est rendue définie positive tant que l'erreur sur son calcul reste plus petite que le coefficient λ_τ .

Complexification des coefficients Pour finir cette description technique de l'approche variationnelle, j'aimerais revenir sur une difficulté que nous avons rencontrée pendant ma thèse et qui nous a forcé à considérer des variables complexes et non seulement réelles, même quand on cherche à approximer des états qui ne devraient avoir que des coefficients réels sur la base des configurations $|\sigma\rangle$.

En effet, si l'on revient à l'expression de l'estimateur du gradient de l'énergie par rapport à une variable $C_P^{\sigma_P}$, équation 2.16, on remarque que pour une faible valeur de la variable $C_P^{\sigma_P}$, l'estimateur du gradient le long de cette variable augmente fortement. À l'inverse, plus une quantité $C_P^{\sigma_P}$ est faible, plus la probabilité d'acceptation (formule 2.3) d'une configuration réalisant σ_P sur la plaquette P diminue et moins ces configurations apparaissent dans l'échantillonnage Monte Carlo.

Par conséquent, estimer le gradient de E par rapport à un coefficient $C_P^{\sigma_P}$ qui devient très petit requiert une statistique très importante, puisqu'il s'agit d'échantillonner proprement les événements rares d'apparition de σ_P . Avec une statistique insuffisante, on trouve typiquement une dérivée très sous-estimée par rapport à sa vraie valeur ou encore une valeur bien surestimée si la configuration σ_P se produit, pour laquelle l'hypothèse de linéarisation de la dérivée temporelle utilisée dans la formule 2.22 n'est plus valable.

Or dans le cas de variables réelles, ce cas de figure arrive lorsque l'on travaille avec des Hamiltoniens tels que la structure du signe de l'état fondamental n'est pas connue a priori. Cela implique que les signes imposés aux coefficients au début de la minimisation pourraient devoir changer, puisqu'ils sont potentiellement incompatibles avec ceux de l'état fondamental que l'on cherche qui nous sont inconnus. Pour ce faire, un ou plusieurs coefficients $C_P^{\sigma_P}$ doivent passer par zéro et risquent de passer par une faible valeur absolue.

Ainsi, il nous a été nécessaire de considérer des variables complexes, même dans le cas où l'état fondamental attendu pouvait être décrit par des variables réelles : en effet, la variable peut alors contourner 0 dans le plan complexe sans passer par des valeurs de faible module.

2.2 Application à l'état fondamental de la chaîne XX

Nous allons maintenant voir une première application des Ansätze que nous avons construits dans la section précédente, la recherche de l'état fondamental de la chaîne XX. Comme nous l'avons vu dans la section 1.2.1, la structure du signe des coefficients de l'état fondamental de la chaîne XX est simple, tous les signes sont positifs, d'après le théorème d'absence de nœuds de Feynman. On commence donc par prendre un état de départ dont tous les coefficients sont positifs et on lui applique l'algorithme d'évolution en temps imaginaire. Dans un premier temps, nous allons présenter le modèle XX en le résolvant exactement par un *mapping* sur un système de fermions libres, en mettant en avant la criticalité de ce système présentant des corrélations et de l'intrication à longue portée. Nous présenterons ensuite le fonctionnement de l'algorithme de minimisation dans ce cas particulier et présenterons les résultats permettant de reproduire les propriétés de corrélation et d'intrication avec une excellente précision.

2.2.1 Résolution exacte

Nous considérons donc une chaîne de spins $\frac{1}{2}$ aux conditions périodiques au bord suivant le Hamiltonien

$$\mathcal{H} = -J \sum_i (S_{i+1}^x S_i^x + S_{i+1}^y S_i^y). \quad (2.23)$$

Comme on en a discuté dans la sous-section 1.2.1, en introduisant les opérateurs $S_i^+ = \frac{1}{2}(S_i^x + iS_i^y)$ et $S_i^- = \frac{1}{2}(S_i^x - iS_i^y)$, ce Hamiltonien de spins $\frac{1}{2}$ se mappe sur un modèle de bosons à cœur dur par la transformation $S_i^+ \rightarrow \tilde{b}_i^\dagger$, $S_i^- \rightarrow \tilde{b}_i$ et $S_i^z \rightarrow \tilde{b}_i^\dagger \tilde{b}_i - \frac{1}{2}$. On se ramène alors à l'étude du Hamiltonien

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum_i (\tilde{b}_i^\dagger \tilde{b}_{i+1} + hc) . \quad (2.24)$$

Dans ce *mapping*, il a correspondance entre le nombre de bosons à cœur dur dans le système de bosons et le nombre de spins \uparrow dans le système de spins.

On peut ensuite mapper ce système de bosons à cœur dur sur un système de fermions par la transformation de Jordan-Wigner

$$a_i = \left(e^{i\pi \sum_{j<i} \tilde{b}_j^\dagger \tilde{b}_j} \right) \tilde{b}_i \text{ et } a_i^\dagger = \tilde{b}_i^\dagger \left(e^{-i\pi \sum_{j<i} \tilde{b}_j^\dagger \tilde{b}_j} \right) \quad (2.25)$$

où a_i, a_i^\dagger sont des opérateurs fermioniques avec $\{a_i, a_i^\dagger\} = \delta_{ij}$, $\{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0$.

On a alors $a_i^\dagger a_i = \tilde{b}_i^\dagger \tilde{b}_i$, on a donc correspondance entre le nombre de fermions et le nombre de bosons et donc aussi le nombre de spins \uparrow . On se ramène donc à un Hamiltonien

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\frac{J}{2} \sum_i (b_i^\dagger b_{i+1} + hc) \\ &= -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N-1} (a_i^\dagger a_{i+1} + hc) + \frac{J}{2} (a_1^\dagger a_N + a_N^\dagger a_1) e^{i\pi \left(\sum_{i=1}^N a_i^\dagger a_i - 1 \right)} \\ &= -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N-1} (a_i^\dagger a_{i+1} + hc) + \frac{J}{2} (a_1^\dagger a_N + a_N^\dagger a_1) (-1)^{(N_\uparrow - 1)} \end{aligned} \quad (2.26)$$

où N_\uparrow est le nombre de spin \uparrow dans le système. Dans le cas général, N_\uparrow est un opérateur, mais dans le cas de la chaîne XX, l'aimantation totale commute avec le Hamiltonien ; on peut donc pour un état propre du Hamiltonien, définir l'aimantation totale de l'état quantique. En l'occurrence, on a considéré une aimantation totale nulle, ainsi $N_\uparrow = N_\downarrow = \frac{N}{2}$.

On a donc mappé le modèle XX de spins $\frac{1}{2}$ sur un modèle de $\frac{N}{2}$ fermions libres à conditions périodiques au bord si $\frac{N}{2}$ est pair, antipériodique si $\frac{N}{2}$ est impair. On a par la suite calculé grâce à ce *mapping* les valeurs des observables physiques de l'état fondamental comme les fonctions de corrélation (voir annexe B) ou l'entropie d'intrication (voir annexe C) de façon exacte pour pouvoir ensuite les comparer avec les résultats trouvés parmi notre *Ansatz*.

Ce calcul permet de retrouver des résultats connus sur ce système de fermions libres. L'état fondamental possède des corrélations décroissant algébriquement avec la distance entre les sites [95].

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle \sim \frac{1}{|i-j|^2} \text{ et } \langle S_i^x S_j^x \rangle \sim \frac{1}{|i-j|^{\frac{1}{2}}} \quad (2.27)$$

Ces corrélations s'étendent donc à longue portée, ce qui rend l'état fondamental difficile à décrire avec un *Ansatz* qui ne décrit pas proprement les corrélations entre sites à distance arbitraire.

De plus, comme on en a discuté dans la sous-section 1.1.3, l'entropie d'intrication de Renyi d'ordre 2 d'un segment linéaire de taille ℓ augmente avec la taille comme

$$R_2(\ell) = \frac{c}{4} \log \ell + \dots \quad (2.28)$$

avec $c = 1$.

La structure d'intrication est donc plus complexe qu'une loi d'aire.

Une dernière propriété importante de l'état fondamental de la chaîne XX en lien avec l'approche variationnelle que nous avons développé est qu'il peut s'exprimer sous la forme d'un état 2LR-EPS à coefficients réels. En effet, les coefficients de la fonction d'onde exacte de l'état fondamental fermionique sont donnés par le déterminant de Slater et peuvent s'exprimer comme le déterminant d'une matrice de Vandermonde [93] sous la forme

$$W_{\sigma} = \mathcal{N} \prod_{i < j} \sin \left[\frac{\pi}{N} (j - i) \right]^{\frac{(2\sigma_i + 1)(2\sigma_j + 1)}{4}} \quad (2.29)$$

où \mathcal{N} est un facteur de normalisation. On reconnaît alors la forme d'un état 2LR-EPS (voir équation 2.2). Plus généralement, les états 2LR-EPS comprennent une large famille d'états tels que les états fondamentaux exacts de systèmes à une dimension de bosons ou fermions en présence d'un potentiel d'interaction en $\frac{1}{r^2}$ [94], ou encore les fonctions d'onde de Laughlin [23].

Finalement ce modèle de chaîne XX présente l'intérêt d'être à la fois résoluble exactement dont l'état fondamental est inclus dans l'*Ansatz* 2LR-EPS, tout en présentant des difficultés intrinsèques pour l'étude variationnelle, ce qui en fait un bon modèle pour tester l'efficacité de l'algorithme de minimisation sur notre *Ansatz*.

2.2.2 Fonctionnement de l'algorithme d'optimisation variationnelle

Dans cette partie, nous allons nous intéresser au fonctionnement de l'algorithme, discuter les différents paramètres de l'algorithme et leur impact sur la convergence.

Constantes régulant la convergence L'algorithme d'optimisation commence à partir d'un état quantique choisi aléatoirement parmi l'*Ansatz*. Il calcule ensuite l'énergie et le gradient de l'énergie par un échantillonnage (que l'on appelle aussi boucle) Monte Carlo. Et enfin, il calcule les nouvelles variables à partir de l'équation 2.22. On dit alors que l'algorithme d'optimisation a effectué une itération. Puis, il réitère la procédure. Il y a donc un certain nombre de constantes qui vont réguler la convergence de l'algorithme et définir ce que signifie que chaque boucle Monte Carlo et l'algorithme d'optimisation dans son ensemble aient convergé. Dans tous les cas, la procédure pour fixer la valeur de ces constantes est la même pour chacune des constantes : elle consiste, dès que l'on s'intéresse à un nouveau système physique, à trouver les valeurs permettant à l'algorithme d'optimisation de converger rapidement vers un état quantique étant la meilleure approximation possible au sein de l'*Ansatz* de l'état recherché.

Notre but étant de trouver la meilleure approximation de l'état fondamental du système par notre *Ansatz*, ie le minimum global de $E(\mathbf{C})$, une condition nécessaire est que cet état optimisé annule le gradient de l'énergie. On considère ainsi, bien que ce ne soit pas suffisant, que l'algorithme a trouvé la meilleure approximation de l'état fondamental lorsque la norme du gradient de l'énergie s'annule. Cependant dans le cas de notre algorithme, la notion d'annulation est plus complexe que dans le cas d'un algorithme de calcul exact. En effet, le gradient de l'énergie par rapport à chaque variable est calculé par un échantillonnage Monte Carlo, il y a donc une erreur associée au calcul de cette quantité (voir annexe A). Ainsi, lorsque la norme du gradient vaut zéro entre deux déviations standards, on considère que l'algorithme a convergé et on regarde les propriétés de l'état quantique qu'il nous renvoie.

Cependant, ce critère d'arrêt est souvent long à atteindre et les grandeurs physiques qui nous intéressent telles l'énergie, voir figure 2.3, ou les corrélations, voir figure 2.9, semblent avoir convergées avant que ce critère ne soit parfaitement atteint. Nous avons donc utilisé, dans ce chapitre, un autre critère de convergence pour garder un temps de convergence raisonnable même pour de grands systèmes : fixer un nombre d'itérations maximal t_{max} que l'algorithme d'optimisation ne peut dépasser, dans le cas de ce chapitre, cette quantité est de 500, quitte à poursuivre l'algorithme dans le cas où l'énergie n'a pas convergé dans la barre d'erreur.

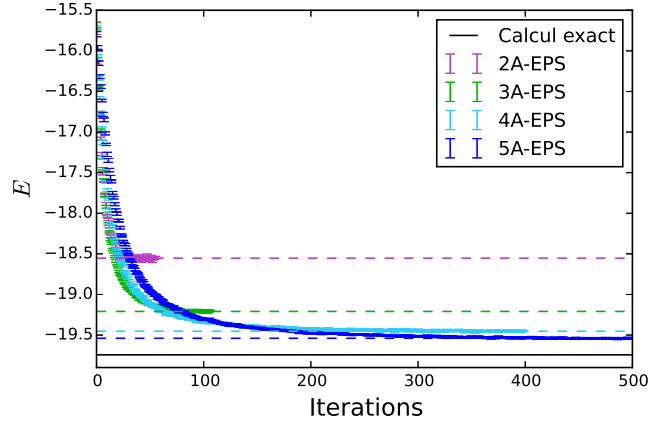


FIG. 2.3 Convergence de l'énergie en fonction du nombre de pas dans l'algorithme d'optimisation pour différents Ansätze A-EPS en vue d'approximer l'état fondamental d'une chaîne de taille $N = 62$ soumise à un Hamiltonien XX. On a représenté l'erreur à deux déviations standard.

Plus le nombre d'itérations maximales t_{max} est faible, plus l'algorithme risque de s'arrêter avant d'avoir convergé et à l'inverse plus cette quantité est élevée plus l'algorithme mettra de temps à converger.

Une autre constante régulant la convergence de l'algorithme d'optimisation est le pas de temps de l'algorithme : $d\tau$ qui apparaît dans la formule 2.22. Cette constante contrôle la vitesse de convergence : si les paramètres variationnels sont éloignés de l'optimum, augmenter la taille du pas de temps va accélérer la convergence, cependant, si l'on est proche de l'optimum et que cette constante est trop grande, l'algorithme risque d'osciller autour de l'optimum en peinant à le trouver, voire en s'en éloignant. En effet, l'hypothèse de linéarisation utilisée dans la formule 2.22 suppose un pas de temps suffisamment faible pour être vérifiée et de plus, un pas trop grand rend l'algorithme plus sensible aux erreurs de calcul du gradient, à plus forte raison si les quantités à calculer sont faibles, ce qui est le cas du gradient lorsque l'on approche de la convergence. Nous avons opté pour un pas constant dans nos algorithmes d'optimisation. L'ordre de grandeur que nous avons choisi dépend beaucoup des variables considérées et des systèmes étudiés, mais en général, il est de l'ordre de 10^{-2} .

Un point important à noter est que dans le cas de l'évolution en temps imaginaire, la norme de la matrice S évolue à chaque itération, contrairement à un algorithme du gradient classique, le terme S^{-1} permet d'optimiser la grandeur du pas dans chacune des directions du gradient. En effet l'évolution des incréments n'est pas la même pour toutes les composantes du gradient ; c'est un gros point fort de cette méthode par rapport à une méthode du gradient classique que d'optimiser la vitesse de convergence par l'intermédiaire de la matrice S de façon efficace sans avoir à fixer une décroissance arbitraire, mais autorisant au contraire une évolution plus complexe du pas temporel.

Comme nous en avons discuté précédemment dans la section 2.1.3, la matrice S n'est pas seulement issue du calcul variationnel, mais dépend aussi d'une constante λ . Cette constante permet de s'assurer que la matrice S est bien définie positive dans le cas de l'algorithme d'évolution en temps imaginaire et seulement dans ce cas ; en effet, l'utiliser dans le cas de l'évolution en temps réel fausserait le calcul de l'évolution temporelle de l'état quantique. Il est donc nécessaire que ce paramètre λ soit plus grand que l'erreur sur les valeurs propres de S , cependant, s'il est trop élevé, il prend le pas sur la matrice S et l'on se retrouve avec un algorithme du type *méthode du gradient classique*. Dans notre cas, nous avons repris la méthode de Carleo et Troyer [20] d'un paramètre $\lambda = \max(\lambda_n, \lambda_{min})$, où λ_n décroît en loi de puissance avec le nombre d'itération et λ_{min} une valeur minimale en-dessous de laquelle le paramètre ne peut pas descendre, en pratique, nous avons généralement pris $\lambda_{min} = 10^{-4}$.

Invariance par translation Un test physique de convergence de l'algorithme correspond à vérifier que l'état variationnel trouvé possède les mêmes symétries que le Hamiltonien. On peut en effet démontrer que de telles symétries sont bien une propriété de l'optimum variationnel, ie le minimum absolu de $E(\mathbf{C})$. En particulier, l'état fondamental de la chaîne XX doit être invariant par translation : si l'état quantique trouvé par l'algorithme ne vérifie pas cette propriété, cela serait une preuve que l'état trouvé par la minimisation variationnelle n'est pas un minimum absolu mais local, puisqu'un état non homogène aurait une énergie plus élevée qu'un état homogène. C'est ainsi un critère pour considérer la qualité de notre algorithme d'optimisation et de savoir si l'*Ansatz* possède des minima locaux ne vérifiant pas les propriétés de l'état fondamental de la chaîne XX.

La figure 2.4 montre la moyenne des variables $C_P^{\sigma_P}$, pour une même configuration σ_P , sur toutes les plaquettes P , on observe que l'écart type entre les variables d'une même sous-configuration est de l'ordre de 10^{-3} les barres d'erreur sont ainsi à peine visibles sur le graphe. Cette propriété d'invariance est donc vérifiée numériquement. Ce constat est d'autant plus intéressant qu'il peut permettre de raffiner le résultat obtenu précédemment. En effet, on peut à partir d'une certaine étape dans l'algorithme d'optimisation forcer l'*Ansatz* à posséder cette invariance par translation, en considérant l'*Ansatz* suivant

$$W(\sigma) = \prod_P C_P^{\sigma_P} \quad (2.30)$$

avec C^{σ_P} indépendant de P .

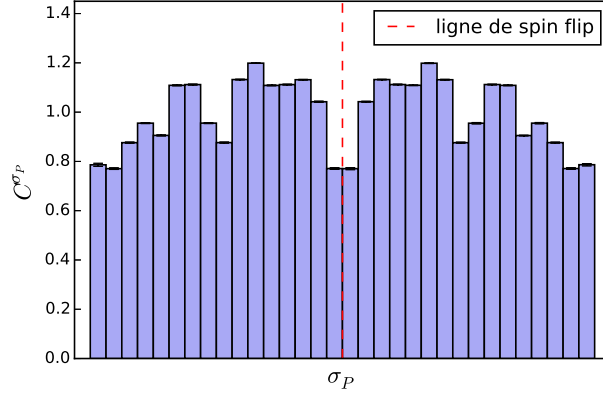


FIG. 2.4 Histogrammes des variables $C_P^{\sigma_P}$ obtenu en approximant l'état fondamental d'une chaîne XX de taille $N = 30$ au sein de l'*Ansatz* 5A-EPS, chaque colonne représente la valeur moyenne $C_P^{\sigma_P}$ obtenue en moyennant $C_P^{\sigma_P}$ pour une même configuration σ_P sur toutes les plaquettes P . On a représenté sur le graphe les barres d'erreur à deux écarts type. Si l'on *flip* tous les spins d'une configuration σ_P on trouve alors la configuration symétrique sur l'axe des abscisses par rapport à la ligne pointillée (rouge).

Lors de cette procédure, on symétrise les coefficients en prenant pour valeur initiale des coefficients C^{σ_P} la moyenne des coefficients $C_P^{\sigma_P}$ sur toutes les plaquettes pour chaque configuration σ_P , et on continue ensuite l'optimisation par rapport aux seules variables C^{σ_P} .

On obtient alors la figure 2.5, on voit que modifier l'*Ansatz* en prenant en compte les propriétés physiques du système nous permet d'obtenir une énergie plus proche de celle du fondamental dans le cas 5A-EPS par exemple.

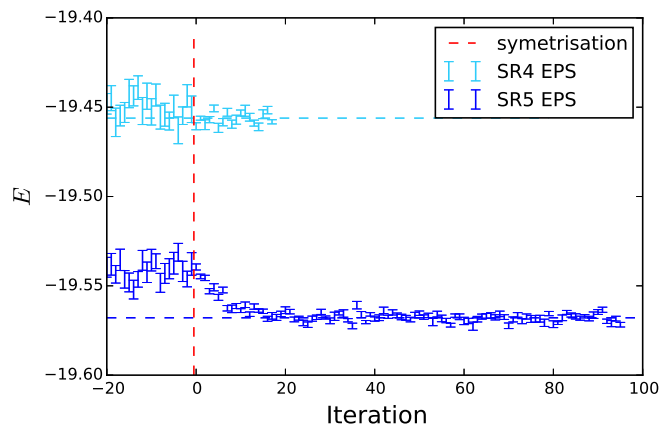


FIG. 2.5 Évolution de l'énergie suite à la symétrisation des variables de l'*Ansatz*. Les itérations comptées négativement sont les dernières itérations de l'algorithme sans symétries, on représente la symétrisation des coefficients par une ligne pointillée verticale.

2.2.3 Comparaison avec le résultat exact

Nous allons comparer dans cette sous-section les résultats obtenus par les différentes approches variationnelles que nous avons utilisées avec le résultat exact que nous avons présenté dans la sous-section 2.2.1

Énergie Il est important de noter que cette quantité est centrale pour évaluer la qualité de l'*Ansatz* à reproduire l'état fondamental. Plus l'énergie de l'état quantique obtenu au sein de l'*Ansatz* est faible, plus on considère que cet état quantique est 'proche' de l'état fondamental du Hamiltonien.

En ce sens, d'après la figure 2.6, on voit que pour les Ansätze A-EPS, plus la taille de la plaquette est grande, plus l'énergie de l'état quantique final trouvé est proche de l'énergie du fondamental. De plus l'algorithme 2LR-EPS fournit une énergie bien plus basse que celle obtenue par l'algorithme 5A-EPS.

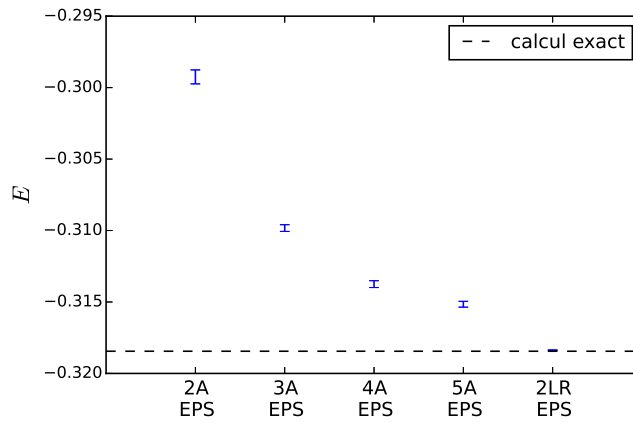


FIG. 2.6 Énergie par site de l'état fondamental d'une chaîne de taille $N = 62$ soumise à un Hamiltonien XX obtenu par optimisation d'Ansätze EPS.

Aimantation Pour discuter plus précisément de la qualité de l'état quantique obtenu au sein des Ansätze considérés, on peut regarder l'aimantation des états quantiques obtenus.

Si l'aimantation totale le long de z est bien constante égale à zéro, l'état fondamental possède une contrainte plus forte sur l'aimantation le long de z , en effet, l'aimantation moyenne locale en chaque site devrait être exactement nulle. Cette propriété n'est pas assurée par construction de l'algorithme, ou en tous les cas, tant que l'on ne symétrise pas les coefficients. Elle dériverait en effet de la condition $|C_P^{\sigma_P}| = |C_P^{-\sigma_P}|$ de symétrie du modèle des coefficients sous spin *flip*. Bien que cette symétrie ne soit pas imposée dans l'*Ansatz*, elle émerge naturellement au cours de l'optimisation, comme montré par la figure 2.4, où des configurations conjuguées par spin *flip* correspondent à deux barres symétriques par rapport au centre de l'histogramme. En pratique, l'absence

d'aimantation locale est correctement reproduite par nos algorithmes comme on pouvait s'y attendre puisque l'invariance par translation dans les coefficients impose l'annulation de l'aimantation sur chaque plaquette pour que l'aimantation totale soit nulle.

Les aimantations locales le long de x et y sont nulles exactement dans les Ansätze EPS, par construction. En effet, l'estimateur de ces aimantations est

$$\sum_{\sigma'} \frac{W(\sigma')}{W(\sigma)} \langle \sigma' | S_i^{x(y)} | \sigma \rangle . \quad (2.31)$$

Pour un échantillonnage restreint aux aimantations totales nulles suivant z , les éléments de matrice $\langle \sigma' | S^{x(y)} | \sigma \rangle$ sont tous nuls.

Corrélations Un aspect fondamental des états LR-EPS est leur habilité à représenter des corrélations à portée arbitraire. Ils sont donc spécifiquement adaptés au problème de la chaîne XX avec des corrélations critiques comme dans l'équation 2.27. Nous allons voir par contre que la longueur finie des plaquettes dans l'Ansatz A-EPS offre une limitation importante dans la reproduction des corrélations à longue portée.

Plus précisément, nous allons nous intéresser dans ce paragraphe à la quantité $\langle S_j^+ S_i^- + hc \rangle$ que nous comparerons aux résultats obtenus par la diagonalisation exacte du Hamiltonien d'une chaîne de fermions , voir annexe B.

L'estimateur de cette quantité est la somme sur toutes les configurations σ' de la quantité

$$\frac{W(\sigma')}{W(\sigma)} \langle \sigma' | (S_j^+ S_i^- + hc) | \sigma \rangle = \begin{cases} \frac{W(\sigma')}{W(\sigma)} & \text{si } \sigma_i \neq \sigma_j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.32)$$

Comme on peut le voir sur la figure 2.7, pour une distance courte entre les sites, on remarque que l'on reproduit bien, avec les Ansätze A-EPS, les corrélations entre les sites. Ce qui est cohérent avec le fait que l'on reproduit correctement l'énergie de l'état fondamental. Cependant après une distance de l'ordre de la taille des plaquettes utilisées dans l'Ansatz, les corrélations semblent saturer manifestant l'existence d'une longueur caractéristique de l'ordre de m .

Une stratégie possible pour contourner ce problème est alors celle d'une augmentation systématique de la taille des plaquettes à sites adjacents. Une telle stratégie a permis l'obtention de très bons résultats dans le cas de systèmes $2d$ [68][67][65][66] ; mais de manière générale, elle a le désavantage d'imposer un coût exponentiel $O(2^m)$ au calcul, ce qui limite en pratique la taille des plaquettes à un $\sim O(10)$.

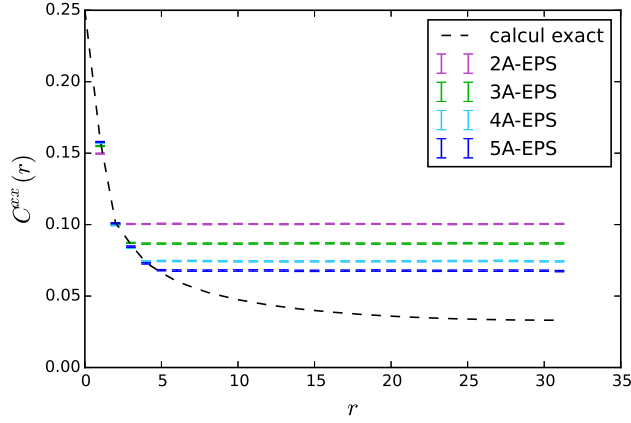


FIG. 2.7 Fonctions de corrélation spin-spin des approximations de l'état fondamental d'une chaîne de taille $N = 62$ soumise à un Hamiltonien XX, obtenus par optimisation d'Ansätze A-EPS.

Une stratégie alternative se propose alors naturellement : utiliser l'Ansatz 2LR-EPS, ce qui permet de s'intéresser directement aux propriétés de corrélation à longue distance.

Comme on peut le voir sur la figure 2.8, l'Ansatz 2LR-EPS réussit à reproduire les corrélations à longue distance, n'introduisant donc pas de longueur caractéristique dans les corrélations. La qualité de ces résultats, notamment la capacité du résultat variationnel à reproduire l'énergie du résultat exact dans la barre d'erreur du calcul Monte Carlo, avec une erreur relative de l'ordre de 10^{-9} , suggère que l'algorithme de minimisation est parvenu à retrouver l'état fondamental exact au sein de l'Ansatz.

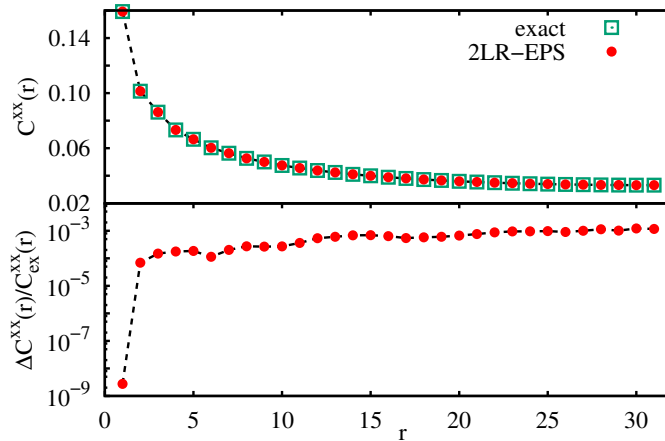


FIG. 2.8 Fonctions de corrélation spin-spin des approximations de l'état fondamental d'une chaîne de taille $N = 62$ soumise à un Hamiltonien XX, obtenus par optimisation d'Ansätze 2LR-EPS (case du haut). L'erreur relative entre le résultat variationnel et le résultat exact est tracée dans la case du bas. Les lignes sont des guides pour le regard.

Il est également intéressant de regarder comment les corrélations convergent vers leur valeur finale en fonction de la distance entre les sites. Sur la figure 2.9, on voit que plus les sites sont éloignés, plus la convergence de leur corrélation est lente. Il est

donc nécessaire de prêter une attention particulière à la convergence quand il s'agit de reproduire des propriétés à longue portée.

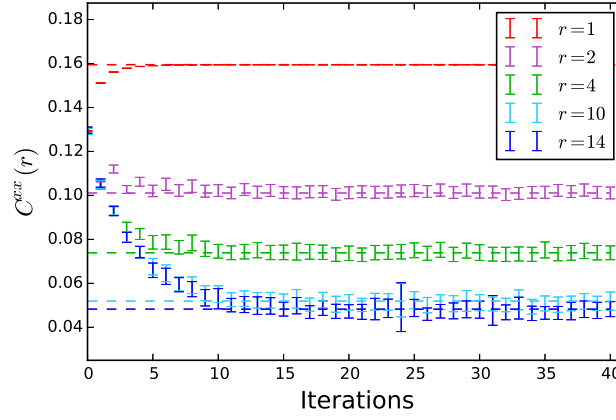


FIG. 2.9 Convergence des corrélations avec le nombre d'itérations de l'algorithme d'optimisation de l'Ansatz 2LR-EPS pour une chaîne de taille $N = 30$ soumise à un Hamiltonien XX. On moyenne ici les corrélations sur tous les sites i de la chaîne pour une distance r que l'on fait varier.

2.2.4 Contenance en information

Comme on a pu en discuter précédemment, une question importante pour comprendre l'efficacité de l'algorithme est de savoir à quel point il est capable de compresser efficacement l'information contenue dans un état quantique. Toute la difficulté est alors de quantifier la contenance en information de l'Ansatz variationnel, qui mesure sa capacité à représenter des états variés de l'espace de Hilbert.

Valeurs prises par les coefficients Une première approche que l'on a adoptée est de regarder les différentes valeurs que prennent les coefficients W_σ de l'état fondamental de la chaîne XX avec les différents Ansätze, et le comparer au résultat exact. En effet, plus l'Ansatz pourra décrire de valeurs différentes des coefficients, plus d'informations il pourra contenir. On voit dans le graphe 2.10 que les coefficients de l'état fondamental calculé exactement pour une chaîne de taille $N = 10$ peuvent prendre 13 valeurs différentes. Par contre l'Ansatz 2A-EPS ne parvient à en décrire que 5, et on voit qu'en augmentant la taille des plaquettes, le nombre de coefficients pouvant être décrits par l'Ansatz augmente, jusqu'à reproduire avec les Ansätze 5A-EPS et 2LR-EPS un graphe de répartition des coefficients de l'état approximant celui de l'état fondamental.

On remarquera que, l'état fondamental exact faisant parti de l'Ansatz 2LR-EPS, les coefficients W_σ devraient être les mêmes dans le cas exact et dans le cas 2LR-EPS, les différences entre les deux graphes, viennent donc de la capacité de l'algorithme de minimisation à retrouver l'état fondamental au sein de l'Ansatz.

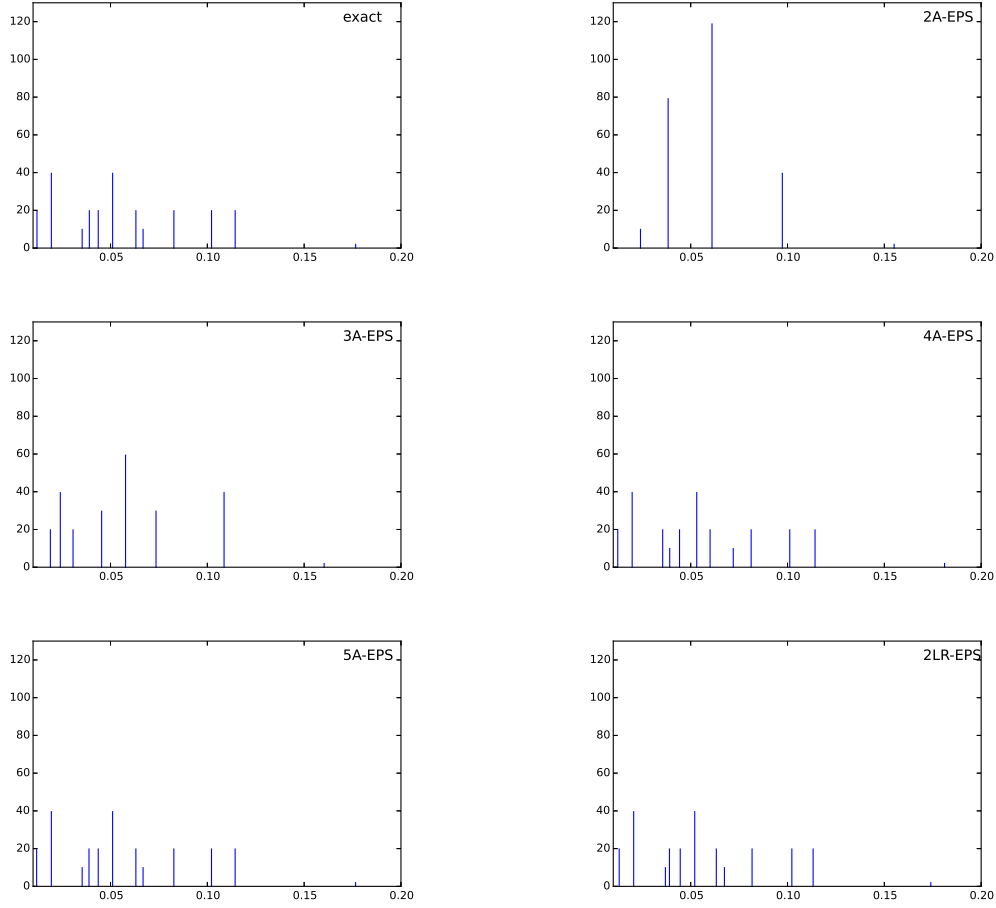


FIG. 2.10 Histogrammes des différentes valeurs que prennent les coefficients de l'état fondamental d'une chaîne XX de taille $N = 10$ obtenu par diagonalisation exacte et par différents Ansatz EPS.

Calcul de l'entropie par algorithme Metropolis Pour aller plus loin dans cette analyse et comme on l'a vu dans la partie 1.1.2, l'entropie d'intrication est une quantité centrale pour sonder la quantité d'information contenue dans l'Ansatz. On peut donc s'intéresser dans un premier temps à l'efficacité de notre algorithme à reproduire l'entropie d'intrication de l'état fondamental de la chaîne XX.

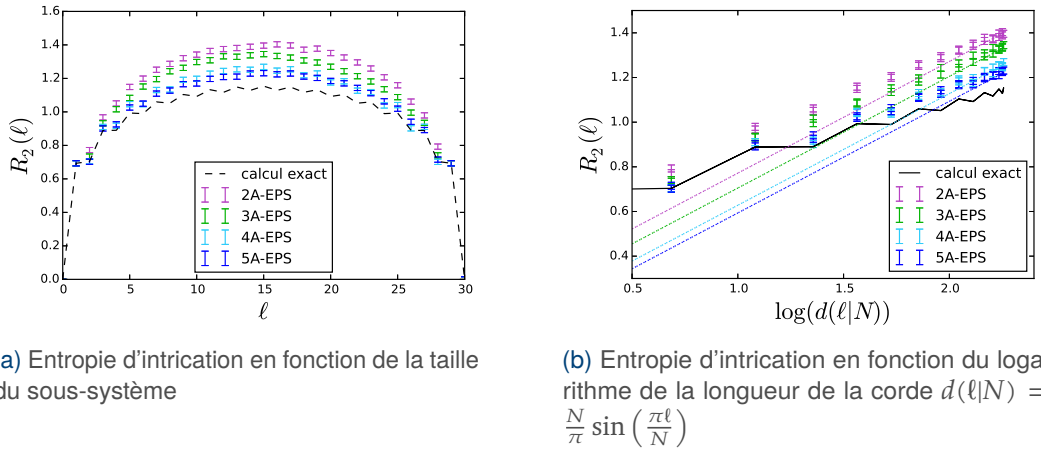
Le calcul par algorithme Metropolis de l'entropie d'intrication de Rényi d'ordre 2 $R_2(\rho_\ell) = -\log(\text{Tr}\rho_\ell^2)$ est un peu plus complexe que celui d'autres observables physiques, car on ne peut pas exhiber d'estimateurs comme dans le cas des corrélations par exemple. Cependant, il est possible d'exprimer la pureté $\text{Tr}\rho_\ell^2$ comme la valeur moyenne d'un opérateur de SWAP sur les configurations du sous-système A de taille ℓ sur deux échantillonnages Monte Carlo [52]. Si l'on note σ_A et σ_B les configurations des sous-systèmes A et de son complémentaire B dans l'état $|\sigma\rangle$, avec $\sigma = (\sigma_A, \sigma_B)$, de la base de calcul, on a

$$\text{Tr}\rho_A^2 = \langle \text{SWAP} \rangle_2 = \left\langle \frac{W(\sigma'_A, \sigma_B) W(\sigma_A, \sigma'_B)}{W(\sigma_A, \sigma_B) W(\sigma'_A, \sigma'_B)} \right\rangle_2 \quad (2.33)$$

où la moyenne statistique sur les deux échantillonnages $\langle \dots \rangle_2$ est définie par

$$\langle \dots \rangle_2 = \sum_{\sigma_A, \sigma_B} \sum_{\sigma'_A, \sigma'_B} |W(\sigma_A, \sigma_B)|^2 |W(\sigma'_A, \sigma'_B)|^2 (\dots) . \quad (2.34)$$

Résultats obtenus avec l'Ansatz EPS Nous avons reproduit les valeurs trouvées à partir de ces formules dans les graphes 2.11 et 2.12, on y voit alors que plus la taille des plaquettes est grande, mieux l'entropie d'intrication est décrite. Par contre, l'Ansatz 2LR-EPS décrit l'entropie d'intrication d'un sous-système avec une précision relative très haute ($\lesssim 10^{-4}$ quelle que soit la taille du sous-système).



(a) Entropie d'intrication en fonction de la taille du sous-système

(b) Entropie d'intrication en fonction du logarithme de la longueur de la corde $d(\ell|N) = \frac{N}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\ell}{N}\right)$

FIG. 2.11 Entropie d'intrication d'un sous-système de l'état fondamental d'une chaîne de taille $N = 30$ soumise à un Hamiltonien XX. Sur la figure de droite, on a représenté en pointillé l'entropie d'intrication correspondant à un condensat de Bose $R_2(\ell) \simeq \frac{1}{2} \log(\ell n_0) + C$, où l'on a mesuré la densité n_0 à partir des résultats de la figure 2.7 et calculé la constante C avec la courbe 2A-EPS et utilisé cette même valeur de la constante C pour tracer les courbes pour les autres Ansätze.

Un résultat étonnant est qu'avec les états m A-EPS l'on approche l'entropie d'intrication par dessus, ce qui pourrait mener à la conclusion que l'Ansatz 2A-EPS contient plus d'information que le 2LR-EPS. En fait, on remarque, sur la figure 2.7, que les états m A-EPS, vu comme états de bosons à cœur dur, décrivent un condensat de Bose, puisque la fonction de corrélation bosonique $\langle \tilde{b}_i^\dagger \tilde{b}_j \rangle = \langle S_i^+ S_j^- \rangle$ tend lorsque la distance $|i - j|$ augmente vers une constante n_0 finie. De plus, on sait que l'entropie de Rényi d'un condensat de Bose idéal en dimension $d = 1$ irait comme $R_2(\ell) \simeq \frac{1}{2} \log(\ell n_0) + C$ [28], tandis que pour la chaîne XX, on aurait $R_2(\ell) \simeq \frac{1}{4} \log(\ell)$. Plus précisément, dans le cas d'un système aux conditions au bord périodique, l'entropie s'exprime en fait en fonction de la longueur de la corde $d(\ell|N) = \frac{N}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\ell}{N}\right)$, en fonction de laquelle on a

tracé la figure 2.11b. Sur cette figure, on a ajusté la constante C pour que l'entropie d'un condensat de Bose puisse reproduire l'entropie d'intrication de l'état 2A-EPS pour les plus grandes tailles du sous-système. Même si l'accord entre prédiction théorique et données numériques n'est observée que pour $\ell \lesssim \frac{N}{2}$, on observe que, en variant n_0 suivant la valeur asymptotique de la fonction de corrélation montrée en figure 2.7, on reproduit aussi les comportements à $\ell \lesssim \frac{N}{2}$ pour les courbes d'entropies des Ansätze 3A-EPS, 4A-EPS et 5A-EPS, sans aucun paramètre ajustable. On conclut donc que la sur-estimation de l'entropie d'intrication par les Ansätze n A-EPS vient très probablement du fait qu'ils décrivent des condensats de Bose ou, de façon équivalente, de l'ordre magnétique à longue portée dans la description en terme de spins du modèle.

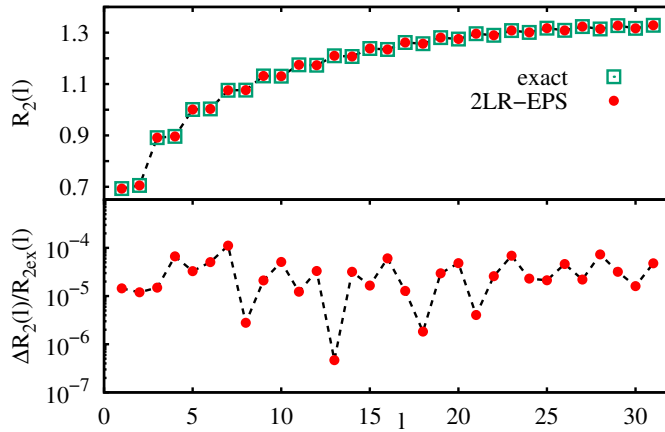


FIG. 2.12 Entropie d'intrication d'un sous-système de l'état fondamental d'une chaîne de taille $N = 62$ soumise à un Hamiltonien XX en fonction de la taille ℓ du sous-système (case du haut). L'erreur relative entre le résultat de l'Ansatz 2LR-EPS et le résultat exact est tracé dans la case du bas.

2.3 Entropie d'intrication d'un état LR-EPS aléatoire

Pour poursuivre cette étude sur la capacité de l'Ansatz 2LR-EPS à comprimer l'information contenu dans un état quantique, on peut considérer l'entropie d'un état aléatoire de l'Ansatz. Dans ce but, nous avons généré un grand nombre d'états 2LR-EPS (de l'ordre d'un millier) avec $2N(N - 1)$ coefficients complexes aléatoires, et étudié la distribution statistique de leur entropie d'intrication. On peut voir en figure 2.13 que l'entropie moyenne d'un état aléatoire 2LR-EPS ne reproduit pas l'entropie de Page, sans trop de surprise, un état typique de l'Ansatz contient donc moins d'information qu'un état typique de l'espace de Hilbert. Ce résultat était inévitable car l'Ansatz 2LR-EPS est décrit par bien moins de variables qu'un état aléatoire de l'espace de Hilbert. On peut cependant voir qu'il y a une forte dispersion des états quantiques 2LR-EPS aléatoires autour de la valeur moyenne de l'entropie et qu'on atteint des entropies nettement supérieures à leur valeur moyenne.

Plus précisément, notre *Ansatz* contient des états maximalelement intriqués, comme par exemple les états "arc-en-ciel" que nous avons présentés précédemment (figure 1.5). Si chaque paire de sites diamétralement opposés est mise par exemple dans un état de type $|\uparrow\downarrow\rangle + e^{i\phi}|\downarrow\uparrow\rangle$, ces états forment une infinité non dénombrable d'états $([-\pi, \pi]^{\frac{N}{2}})$ pour les $\frac{N}{2}$ phases ϕ) mais qui reste faible devant l'infinité d'états de l'*Ansatz* 2LR-EPS $([-\pi, \pi]^{\frac{N}{2}(N-1)})$ rien que pour le choix des variables de phase de chaque plaquette).

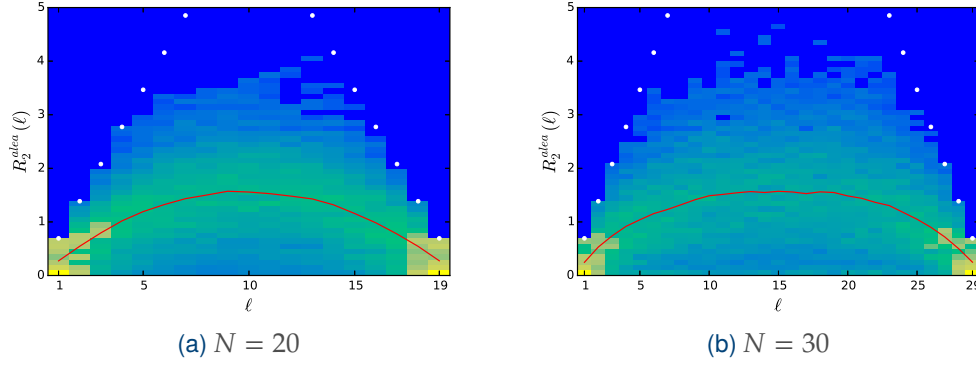


FIG. 2.13 Entropie d'intrication d'un état quantique aléatoire de l'*Ansatz* 2LR-EPS pour un système de taille N . On a tracé l'entropie moyenne en trait plein (rouge) et l'entropie de Page par des points (blanc). On a représenté le nombre d'états possédant une entropie donnée par un graphe en fausses couleurs, plus il y a d'état dont l'entropie vaut la valeur indiquée plus la case est claire, l'échelle des couleurs est la même sur les deux graphes.

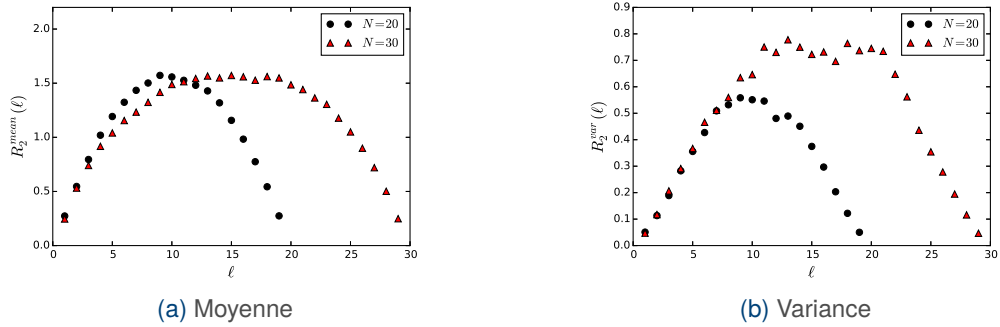


FIG. 2.14 Moyenne et variance de l'entropie d'intrication d'états quantiques aléatoires de l'*Ansatz* 2LR-EPS pour un système de taille $N = 20$ et $N = 30$.

En effet, comme on peut le voir sur la figure 2.14a, la valeur moyenne de l'entropie d'intrication d'un état aléatoire de l'*Ansatz* 2LR-EPS semble évoluer en loi d'aire, ainsi les états quantiques maximalelement intriqués, et plus généralement, les états dont l'entropie d'intrication évolue en loi de volume, semblent représenter une part assez faible de l'ensemble des états 2LR-EPS. Il est cependant important de noter que le fait que l'entropie d'intrication moyenne d'états aléatoire satisfait une loi de volume

n'est qu'une condition suffisante mais pas nécessaire pour que l'*Ansatz* soit capable de reproduire des états quantiques dont l'entropie d'intrication évolue en loi de volume.

De plus, si l'on regarde la variance de l'entropie d'intrication d'un état aléatoire de l'*Ansatz* 2LR-EPS, celle-ci augmente linéairement avec la taille du système, l'écart type augmente donc en racine carrée, voir figure 2.14b. La distribution des états aléatoires semble alors atypique, avec une moyenne constante et un écart type qui augmente avec la racine carrée de la taille du système ; les fluctuations de la distribution de l'entropie d'intrication des états aléatoires 2LR-EPS finit alors par dominer sur la moyenne qui devient assez peu efficace pour décrire cette distribution d'états. Il est donc difficile de conclure à partir de ces graphes de l'efficacité de notre *Ansatz* à reproduire des états fortement intriqués, et seule une étude directe des capacités de notre *Ansatz* à reproduire des états fortement intriqué permettra de répondre à cette question.

Système quantique frustré : cas de la chaîne $J_1 - J_2$

*Anavaṭ ̥hitacittassa saddhammaṃ avijānato
paripalavapasādassa paññā na paripūراتي.*

— Bouddha

Celui dont la pensée n'a pas de fixité, qui ignore la vraie Loi,
dont la sérénité est troublée, celui-là n'arrive pas à la
plénitude de la science.

Nous allons, dans ce chapitre, soumettre notre *Ansatz* variationnel à un test plus complexe en le confrontant à un système frustré magnétiquement ; cette propriété rend l'étude numérique ardue car elle la confronte au problème de reproduction d'une structure de signe non triviale. Nous commencerons par établir le diagramme de phase du système que nous allons étudier : la chaîne $J_1 - J_2$ antiferromagnétique frustrée, notamment en présentant sa transition de phase quantique entre un régime sans gap et une phase gappée avec dimérisation spontanée. Nous comparerons les résultats obtenus avec nos *Ansätze* sur des systèmes de taille intermédiaire dans le cas sans frustration (où l'on retrouve avec une excellente précision les résultats du QMC) et sur des systèmes de plus petites tailles avec frustration pour les comparer avec la diagonalisation exacte. Nous verrons enfin que l'*Ansatz* 2LR-EPS fait ressortir la physique du diagramme de phase sur des systèmes de grande taille ($N = 80$). La majeure partie des résultats que nous allons présenter font l'objet d'un article actuellement sur arxiv [96].

3.1 Chaîne $J_1 - J_2$	64
3.1.1 Cas classique $S = \infty$	64
3.1.2 Diagramme de phases quantique $S = \frac{1}{2}$	65
3.2 Approche EPS	67
3.2.1 Structure des coefficients de l' <i>Ansatz</i> 2LR-EPS	67
3.2.2 Reproduction de la structure du signe par l' <i>Ansatz</i> 2LR-EPS	68
3.2.3 Généralisation de l' <i>Ansatz</i> LR-EPS	69
3.3 Résultats	70
3.3.1 Validation de l' <i>Ansatz</i> : Comparaison avec le résultat exact	70
3.3.2 Reproduction des propriétés physiques sur des réseaux de plus grande taille	73

3.1 Chaîne $J_1 - J_2$

Dans ce chapitre, nous allons confronter notre approche à un test important, en l'utilisant pour approximer l'état fondamental de la chaîne antiferromagnétique frustrée $J_1 - J_2$ de Hamiltonien

$$\mathcal{H}_{J_1-J_2} = J_1 \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2} \quad (3.1)$$

où les constantes J_1 et J_2 sont positives. Le terme en J_1 tend à antialigner les plus proches voisins alors que le terme en J_2 tend à antialigner les seconds plus proches voisins, ces deux phénomènes opposés induisent de la frustration dans le système que l'on quantifie par le coefficient $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$. La chaîne $J_1 - J_2$ peut aussi être vue comme une échelle en zig-zag triangulaire, les couplages J_1 représentant les barreaux de l'échelle et les couplages J_2 représentant les montants, voir figure 3.1.

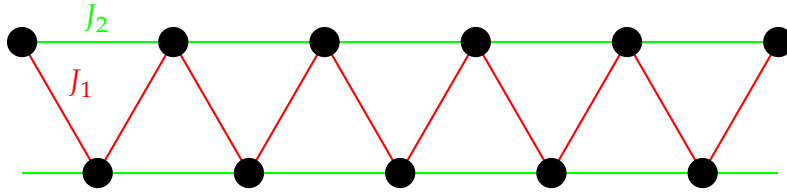


FIG. 3.1 Schéma de la chaîne $J_1 - J_2$

3.1.1 Cas classique $S = \infty$

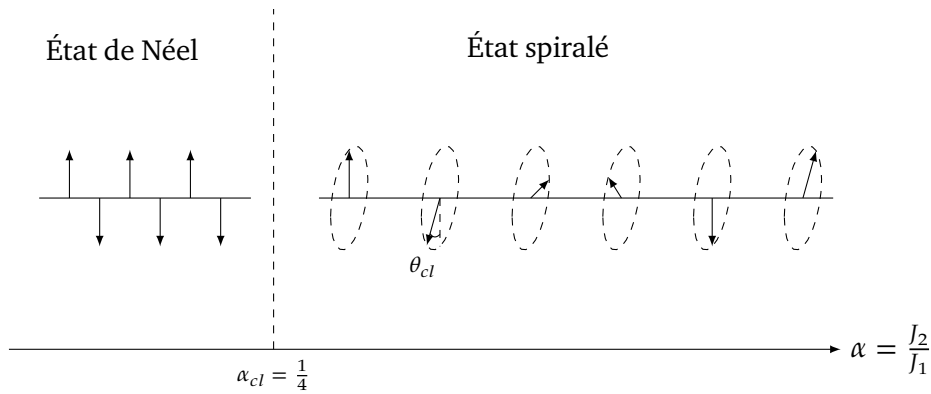


FIG. 3.2 Diagramme de phase de la chaîne $J_1 - J_2$ dans la limite classique

Dans la limite classique $S = \infty$, la chaîne $J_1 - J_2$ présente une transition entre deux phases différentes au point $\alpha_{cl} = \frac{1}{4}$. Pour $\alpha < \alpha_{cl}$, l'état fondamental est l'état de Néel de type $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots$. Pour $\alpha > \alpha_{cl}$, la frustration introduit un angle de torsion θ_{cl} entre deux spins successifs de l'état fondamental.

L'énergie par spin d'un état spiralé pour lequel l'angle entre deux spins successifs est de $\pi - \theta$ vaut

$$E_\theta = J_1(\alpha \cos(2\theta) - \cos\theta) \quad (3.2)$$

Ainsi, pour $\alpha < \alpha_{cl}$, cette énergie ne présente qu'un minimum $\theta = 0$ qui correspond à l'état de Néel. Alors que pour $\alpha > \alpha_{cl}$, l'énergie de cet état est maximal pour $\theta = 0$ et minimal pour l'angle $\theta_{cl} = \arccos\left(-\frac{\alpha_{cl}}{\alpha}\right)$ [45].

3.1.2 Diagramme de phases quantique $S = \frac{1}{2}$

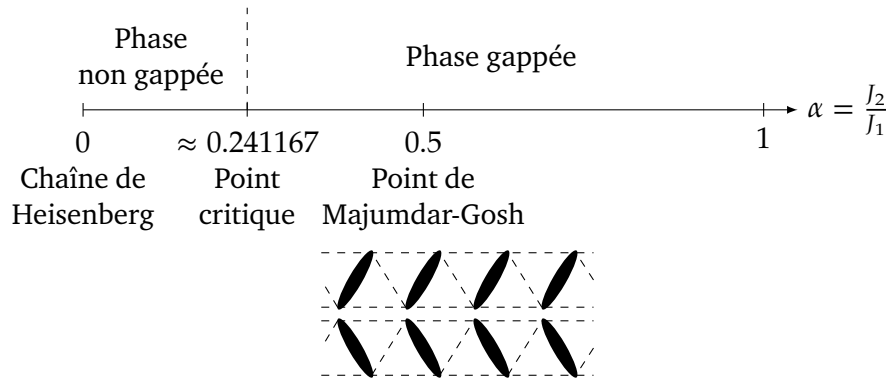


FIG. 3.3 Diagramme de phase de la chaîne $J_1 - J_2$

Phase non gappée Dans le cas $J_2 = 0$, on retrouve le cas de la chaîne de Heisenberg antiferromagnétique que nous avons discuté dans la section 1.2.1. L'état fondamental de ce système est alors un état sans gap dont les propriétés à longue distance sont décrites par une théorie de liquide de Luttinger, avec des corrélations à deux sites qui décroissent algébriquement en fonction de la distance r [63]. Plus précisément, par un mapping du système de spins sur une chaîne de bosons à cœur dur, on trouve, selon la théorie des liquides de Luttinger [21], que les corrélations diminuent à grande distance selon

$$\langle S_i^+ S_{i+r}^- \rangle \sim r^{-\frac{1}{2K}} \text{ et } \langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle \sim r^{-2K} \quad (3.3)$$

où K est l'exposant de Luttinger.

Dans le cas de la chaîne $J_1 - J_2$, le système présente une symétrie $SU(2)$, ce qui impose à l'exposant de Luttinger la valeur $K = \frac{1}{2}$ pour que toutes les corrélations décroissent de la même manière (ie en r^{-1}). Dans le cas d'un système de taille finie N avec conditions au bord périodiques, la décroissance algébrique des fonctions de corrélation s'exprime

en fait en fonction de la longueur de la corde $d(r|N) = \frac{N}{\pi} \sin\left(\frac{\pi r}{N}\right)$, que nous utiliserons donc pour représenter nos résultats numériques dans la suite.

Ce comportement persiste jusqu'à ce que la frustration α atteigne le point critique $\alpha_C \approx 0.241167$. [32] Lorsque la frustration atteint cette valeur, le système montre une transition de phase décrite par le modèle de Wess-Zumino-Witten (WZW) [2] vers un cristal de liens de valence (valence bond crystal - VBC) avec ouverture d'un gap dans le spectre et dimérisation spontanée.

Phase gappée À partir de cette transition, le système présente une longueur de corrélation ξ finie, le gap dans le spectre du système évolue en $\Delta \propto \xi^{-1}$ et la longueur de corrélation diverge exponentiellement vers le point critique selon

$$\xi \sim e^{\frac{A}{\alpha - \alpha_C}} \quad (3.4)$$

où A est une constante. Cette divergence exponentielle de la longueur de corrélation introduit des effets de taille finie significatifs dans la limite $\alpha \rightarrow \alpha_C^+$. [102]

La longueur de corrélation présente un minimum au point de Majumdar-Ghosh $\alpha_{MG} = 0.5$ [61]. L'état fondamental en ce point est exactement résoluble et doublement dégénéré : il s'agit d'états de dimères, voir figure 3.3.

Après le point de Majumdar-Ghosh, la longueur de corrélation augmente jusqu'à la limite $\alpha \rightarrow \infty$, où le système correspond à deux chaînes de Heisenberg antiferromagnétiques décorréliées, donc admettant une description en terme de liquide de Luttinger comme dans le cas $J_2 = 0$.

Un autre point important du diagramme de phase est le point de Lifshitz qui se situe juste après le point de Majumdar-Ghosh à une frustration $\alpha \simeq 0.52$. Avant ce point, le système présente un vecteur de torsion de π , et à partir du point de Lifshitz, les corrélations commencent à développer une structure incommensurable [17][27][59] avec un vecteur de torsion évoluant de π au point de Lifshitz à $\frac{\pi}{2}$ pour $\alpha \rightarrow \infty$.

Structure de signe Comme nous l'avons discuté dans la section 1.2.1, la structure du signe de l'état fondamental de la chaîne $J_1 - J_2$ dans le cas $J_2 = 0$ obéit à la règle de Marshall : le signe des coefficients de la décomposition de l'état fondamental selon le vecteur $|\sigma\rangle$ est $(-1)^{N_{\uparrow A}(\sigma)}$, où $N_{\uparrow A}$ est le nombre de spins \uparrow sur le sous-réseau A , avec une structure de sous-réseau $ABAB \dots$. Cette structure de signe de l'état fondamental reste vraie pour $\alpha \ll 1$.

Dans la limite opposée $\alpha \gg 1$, la chaîne $J_1 - J_2$ correspond à un réseau de deux chaînes de Heisenberg faiblement couplées. La structure de signe de l'état fondamental obéit alors à une règle de Marshall pour un réseau $ABBA \dots$.

Pour des valeurs intermédiaires $\alpha = O(1)$, nous n'avons pas de loi générale pour la structure de signe, celle-ci évoluera en fonction de α , comme montré par exemple dans [104].

Solution champ moyen À titre de comparaison, on peut considérer la solution champ moyen de la chaîne $J_1 - J_2$, qui correspond à assigner à chaque spin un état individuel dont le vecteur de Bloch est aligné avec la solution classique. Par exemple, on peut choisir la forme où les états sont coplanaires dans le plan xy :

$$|\psi_{MF}\rangle = \bigotimes_j \left(|\uparrow_j\rangle + e^{iQr_j} |\downarrow_j\rangle \right) \quad (3.5)$$

où $Q = \pi$ pour $\alpha < \frac{1}{4}$ et $Q = \arccos\left(-\frac{1}{4\alpha}\right)$ pour $\alpha > \frac{1}{4}$. Ainsi associé à un terme de corrélation (comme un terme de Jastrow à valeur réelle [75]), l'état champ moyen peut exhiber des corrélations incommensurables non triviales avec un vecteur d'onde associé $\frac{\pi}{2} \leq Q \leq \pi$. Cependant cette fonction d'onde est intrinsèquement complexe, ce qui est incompatible avec la nature réelle du Hamiltonien et sa symétrie par renversement du temps.

3.2 Approche EPS

Les résultats obtenus dans la majorité de ce chapitre ont été calculés avec l'approche 2LR-EPS. Cependant, étant donnée la physique du système, deux autres Ansätze sont intéressants à considérer.

3.2.1 Structure des coefficients de l'Ansatz 2LR-EPS

Dans le cas de l'Ansatz 2LR-EPS, nous avons considéré des variables sous la forme $C_{ij}^{\sigma_i \sigma_j} = A_{ij}^{\sigma_i \sigma_j} e^{i\theta_{ij}^{\sigma_i \sigma_j}}$, en séparant les variables à valeurs complexes en variables à valeur réelle de module $A_{ij}^{\sigma_i \sigma_j}$ et de phase $\theta_{ij}^{\sigma_i \sigma_j}$. Nous avons plus précisément paramétré spatialement les variables en fonction du premier site i et de la distance entre les sites $d = j - i$. Afin de réduire le nombre de paramètres variationnels, nous avons fixé la dépendance des paramètres variationnels en (i, d) comme étant périodique de période (p_i, p_d) .

Dans le cas des amplitudes, nous avons fixé cette périodicité à $(p_i, p_d) = (2, N)$, ce qui autorise l'Ansatz à reproduire les corrélations à distance quelconque, ainsi qu'une dimérisation spontanée du système.

Dans le cas des phases, nous avons au contraire fixé cette périodicité à $(p_i, p_d) = (N, 2)$, ce qui autorise l'Ansatz à reproduire des structures de signe remarquables avec un

nombre de paramètres linéaires en N , comme nous allons le discuter dans la section suivante.

3.2.2 Reproduction de la structure du signe par l'Ansatz 2LR-EPS

En effet, notre *Ansatz* est capable de reproduire une structure de signe obéissant à une règle de Marshall sur un réseau bipartite, que la structure soit de la forme $ABAB \dots$, $ABBA \dots$ ou de période plus grande, tant que la périodicité spatiale des coefficients LR-EPS est compatible avec cette structure.

Il existe en général de nombreuses façons pour l'Ansatz LR EPS de reproduire une structure de signe donnée. En effet, la phase d'un coefficient de la fonction d'onde de l'Ansatz est la somme des phases de plusieurs variables associées aux plaquettes, de la même façon que le flux d'un champ magnétique résulte de la somme de potentiels vecteurs. Ces différentes paramétrisations correspondant à la même structure de signe peuvent ainsi être interprétées comme un choix de jauge.

La façon la plus simple de reproduire une structure de signe obéissant à une règle de Marshall est de considérer une phase $\theta_{ij}^{\sigma_i \sigma_j}$ ne dépendant que du site i selon

$$\theta_{ij}^{\sigma_i \sigma_j} = \frac{\pi}{N_i} \frac{\sigma_i + 1}{2} \quad (3.6)$$

si i appartient au sous-réseau A et $\theta_{ij}^{\sigma_i \sigma_j} = 0$ sinon et où N_i est le nombre de plaquettes (ij) pour lesquelles i est choisi comme étant le site de référence.

Dans ce cas, on trouve en effet, que le signe d'une configuration σ est

$$\text{sgn}(W_\sigma) = \prod_{\substack{i < j \\ i \in A}} e^{i \frac{\pi}{N_i} \frac{\sigma_i + 1}{2}} = \prod_{i \in A} e^{i \pi \frac{\sigma_i + 1}{2}} = e^{i \pi N_{\uparrow A}}. \quad (3.7)$$

Ces phases $\theta_{ij}^{\sigma_i \sigma_j}$ sont réalisables avec la forme de l'Ansatz 2LR-EPS considérée précédemment, avec un nombre de variables de phases évoluant linéairement avec la taille du système.

Il est cependant possible d'écrire la règle de Marshall en l'imposant sur chaque plaquette, de la façon suivante

$$\theta_{ij}^{\sigma_i \sigma_j} = \pi N_{\uparrow A}^{(ij)} = \frac{\pi}{2} \left[(\sigma_i + 1) \delta_{i,A} + (\sigma_j + 1) \delta_{j,A} \right] \quad (3.8)$$

où $N_{\uparrow A}^{(ij)} = \frac{1}{2}[(\sigma_i + 1)\delta_{i,A} + (\sigma_j + 1)\delta_{j,A}]$ est le nombre de spins \uparrow sur la plaquette ij appartenant au sous-réseau A ($\delta_{i,A} = 1$ si i appartient au sous-réseau A et 0 sinon). On retrouve alors bien la règle de Marshall sur la fonction d'onde

$$\text{sgn}(W_{\sigma}) = e^{i\frac{\pi}{2} \sum_{i<j} (\sigma_i \delta_{i,A} + \sigma_j \delta_{j,A})} = e^{i\frac{\pi}{2} (N-1)(2N_A-N)} = e^{-i\pi N_{\uparrow A}} e^{i\pi \frac{N^2}{2}} \quad (3.9)$$

à un facteur de phase global $e^{i\pi \frac{N^2}{2}}$ près. La seule propriété que nous avons utilisée dans ce calcul est le fait que N est pair et qu'ainsi $\pi N_{\uparrow A} N$ est un multiple entier de 2π . Cependant, pour utiliser cette forme des variables de phases, il faut pouvoir distinguer trois cas : si les sites i et j sont tous les deux sur le sous-réseau A , tous les deux sur le sous-réseau B , ou l'un sur le sous-réseau A et l'autre sur le sous-réseau B (peu importe lequel). Pour une géométrie quelconque des sous-réseaux A et B , il faut connaître les positions des deux sites i et j sur la chaîne, ce qui nécessite un nombre de variables de l'ordre de $O(N^2)$. Par conséquent, ce n'est pas cette paramétrisation que nous avons utilisée pour étudier le système.

3.2.3 Généralisation de l'Ansatz LR-EPS

n LR-EPS Comme nous l'avons précisé dans la section précédente, l'état fondamental dimérise à partir du point critique α_C , les corrélations entre dimères jouent ainsi un rôle important dans la physique du système. Pour tenter de décrire ces corrélations au mieux dans notre *Ansatz*, nous avons considéré l'Ansatz n LR-EPS, avec $n = 2m$ pair, dont les variables sont définies comme dépendant de plaquettes dont les sites sont répartis en deux agrégats de m sites adjacents, qui peuvent être placés à des distances relatives arbitraires. Plus précisément, nous considérerons par la suite l'Ansatz 4LR-EPS décrit par des variables $C_P^{\sigma_P}$ où P est une plaquette de deux dimères, à distance quelconque l'un de l'autre et σ_P la sous-configuration sur la plaquette P , voir figure 3.4.

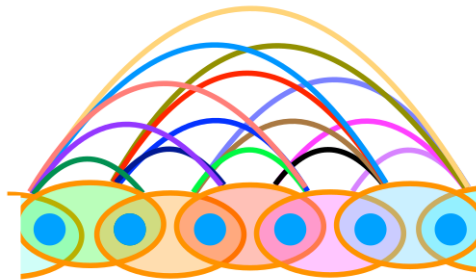


FIG. 3.4 Schéma de l'Ansatz 4LR-EPS

n LR- p A-EPS Un autre choix d'Ansatz pertinent afin d'améliorer la description de l'énergie est de combiner les Ansätze LR-EPS et A-EPS. En effet, comme nous en

avons discuté dans le chapitre 2, l'*Ansatz* LR-EPS est efficace pour reproduire les corrélations à longue portée entre deux sites, alors que l'*Ansatz* pA-EPS est approprié pour décrire des corrélations à p sites à courte portée, mais il induit une longueur caractéristique proportionnelle à p dans le système pour les corrélations à deux points à longue distance. Ainsi, en les combinant, on espère capturer les formes dominantes des corrélations (entre deux agrégats de taille m à distance quelconque et à p pour des distances courtes). L'*Ansatz* nLR-pA-EPS ainsi créé est décrit par des variables $C_P^{\sigma_P}$ où les plaquettes P sont soit des plaquettes de p sites adjacents, ou des plaquettes constituées de deux agrégats de $\frac{n}{2}$ sites adjacents, voir figure 3.5.

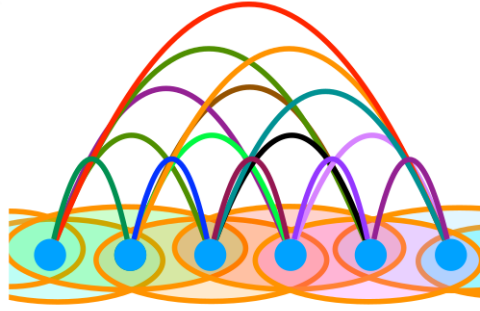


FIG. 3.5 Schéma de l'*Ansatz* 2LR-3A-EPS

3.3 Résultats

3.3.1 Validation de l'*Ansatz* : Comparaison avec le résultat exact

Dans cette sous-section, nous allons discuter la précision de nos résultats obtenus par nos approches variationnelles, en les comparant avec les énergies et fonctions de corrélation de l'état fondamental obtenues par un calcul exact, effectué avec un algorithme de Lanczos, ou par un algorithme QMC.

Cas non frustré $J_2 = 0$: la chaîne de Heisenberg Tout d'abord, nous avons utilisé l'approche 2LR-EPS pour étudier l'état fondamental dans le cas non frustré $J_2 = 0$. On part d'un état initial avec des coefficients aléatoires de norme 1 : $C_P^{\sigma_P} = e^{i\theta_P^{\sigma_P}}$, où $\theta_P^{\sigma_P}$ est une phase aléatoire entre 0 et 2π . L'algorithme d'optimisation réussit à trouver efficacement la structure du signe de Marshall, comme on peut le voir par le fait que le résultat obtenu par notre approche reproduit exactement le signe de la fonction de corrélation : $C(r) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+r} \rangle$ (voir figure 3.6) qui pour des corrélations hors-diagonales $\langle S_r^x S_{i+r}^x + S_i^y S_{i+r}^y \rangle$ reflète directement le signe de Marshall des coefficients. Cela confirme donc que l'optimisation variationnelle de la structure de signe que nous effectuons est bien efficace lorsque la structure de signe recherchée est compatible avec l'*Ansatz* LR-EPS. En plus les valeurs absolues de la fonction de corrélation sont en très

bon accord avec celles du calcul QMC, obtenu à l'aide de l'approche de développement en série stochastique de [86].

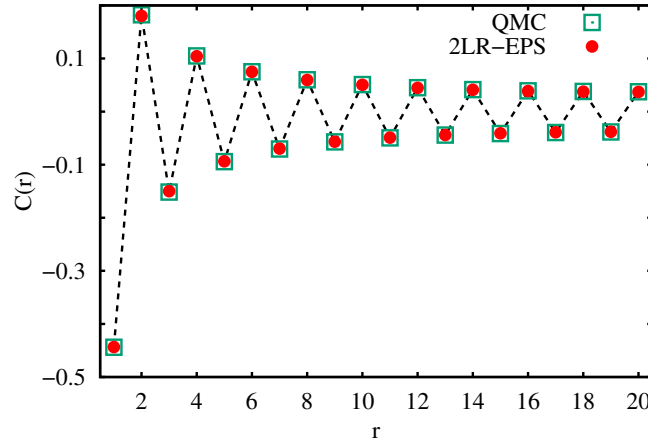


FIG. 3.6 Fonction de corrélation spin-spin $C(r)$ de l'état fondamental en fonction de la distance r entre les sites d'une chaîne de taille $N = 40$ soumise à un Hamiltonien $J_1 - J_2$ dans le cas non frustré $J_2 = 0$. La ligne en pointillé est un guide pour le regard.

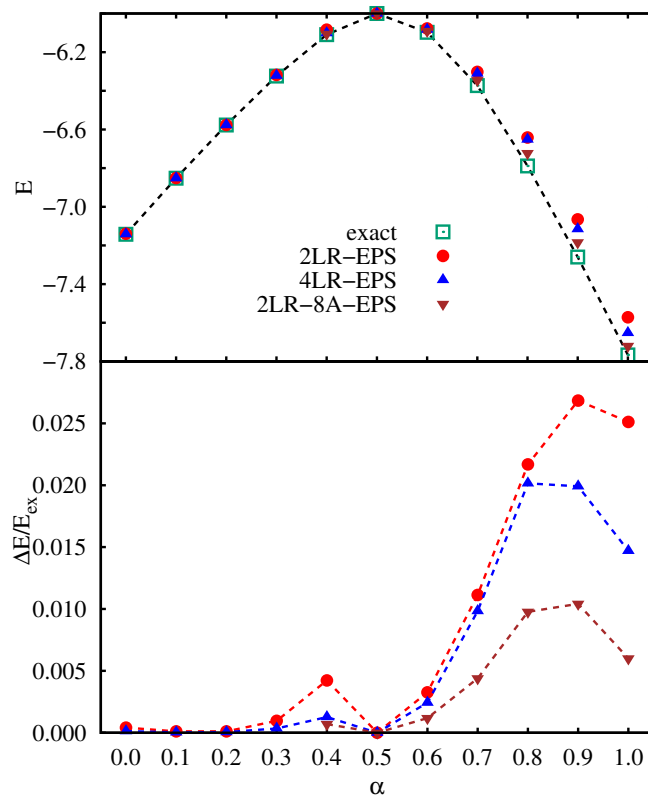


FIG. 3.7 Énergie de l'état fondamental approximé par plusieurs Ansätze EPS (graphe du dessus) et les erreurs relatives par rapport à l'état fondamental (graphe du bas) en fonction de la frustration α . La chaîne est de taille $N = 16$. Les lignes sont des guides pour le regard.

Énergie dans le cas frustré Dans le cas à frustration finie ($\alpha \neq 0$), il n'est plus possible de comparer nos résultats avec une approche QMC, car le problème du signe

la met en échec ; nous avons donc comparé nos résultats sur des systèmes de plus petite taille avec les résultats obtenus par un algorithme de diagonalisation exacte, que nous avons adapté à partir de l'algorithme [1] de résolution par méthode de Lanczos d'une chaîne de Heisenberg. Dans cette comparaison, nous avons utilisé les trois Ansätze 2LR-EPS, 4LR-EPS et 2LR-8A-EPS sans invoquer aucune symétrie afin de contraindre au minimum la minimisation (figure 3.7). On remarque que l'Ansatz 2LR-EPS fournit une énergie très précise (l'erreur relative est bien inférieure à 1%) jusqu'à $\alpha \approx 0.5$. Pour de plus grandes valeurs de la frustration α , la précision du 2LR-EPS se dégrade, avec une erreur relative dépassant les 1%, mais elle peut être améliorée en passant à un Ansatz à plaquettes dimérisées 4LR-EPS ou en associant les Ansätze LR-EPS et A-EPS.

Fonction de corrélation dans le cas frustré Pour aller plus loin dans la discussion de la qualité de notre approche variationnelle, nous nous sommes intéressés à la fonction de corrélation de l'état fondamental. Sur la figure 3.8, on voit que, bien que la précision sur l'énergie soit moins bonne à partir de $\alpha \approx 0.5$, l'Ansatz 2LR-EPS est capable de reproduire les signes non triviaux des corrélations qui varient pourtant énormément en fonction de α . Ce résultat est un bon indice que notre approche est capable de reproduire la physique de l'état fondamental sans avoir besoin d'enrichir l'Ansatz.

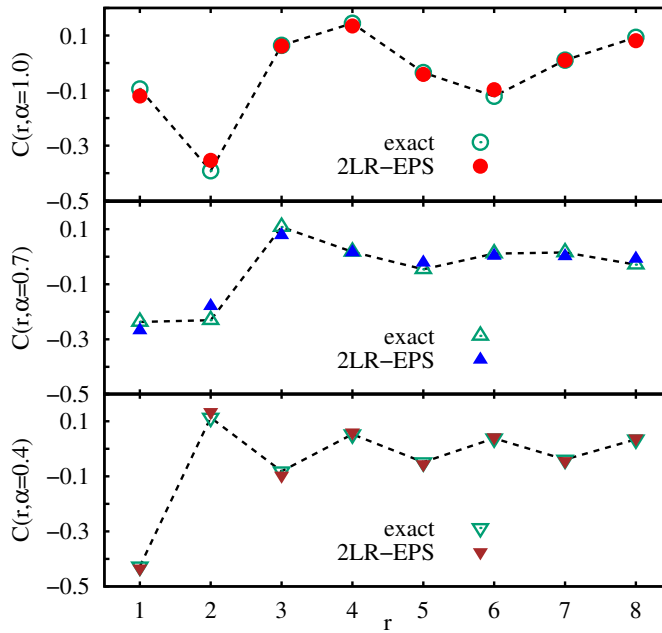


FIG. 3.8 Fonction de corrélation spin-spin de l'état fondamental d'une chaîne de taille $N = 16$ soumise à un Hamiltonien $J_1 - J_2$ pour différentes valeurs de la frustration α . Les lignes sont des guides pour le regard.

Valeur réelle des coefficients Un dernier critère pour tester l'efficacité de l'Ansatz 2LR-EPS à reproduire la structure de signe de l'état fondamental est de regarder le rapport entre les coefficients $\frac{w_\sigma}{w_{\sigma'}}$ pour toutes les paires de configurations σ et σ' . En

effet, dans le cas de la chaîne $J_1 - J_2$, ces coefficients sont réels avec une structure de signe non triviale. Ainsi, même si un coefficient W_σ de l'*Ansatz* peut acquérir une phase, celle-ci doit revenir à un facteur de phase global sur la fonction d'onde 2LR-EPS, et dans ce cas, le rapport doit être réel. L'approximation de l'état fondamental que l'on obtient avec notre approche variationnelle vérifie ce test, ce qui est un bon argument en faveur du fait que l'optimisation variationnelle d'une fonction d'onde à coefficients complexes est capable de produire une fonction d'onde réelle avec une structure du signe non triviale.

3.3.2 Reproduction des propriétés physiques sur des réseaux de plus grande taille

Maintenant que l'on a validé la capacité de notre approche à reproduire l'état fondamental d'une chaîne $J_1 - J_2$ de petite taille, nous allons étudier la physique de réseaux de plus grande taille ($N = 80$) afin d'étudier les propriétés à longue distance dans la phase sans gap, ainsi que l'apparition d'incommensurabilité dans la phase gappée. Nous allons voir que l'*Ansatz* 2LR-EPS permet de mettre en évidence des propriétés caractéristiques des corrélations et de l'intrication de l'état fondamental de ce système. Pour effectuer cette étude, nous avons introduit des périodicités dans l'*Ansatz* comme nous en avons discuté dans la sous-section 3.2.1.

Décroissance des corrélations dans le cas $\alpha \leq \alpha_C$ Comme nous l'avons vu précédemment, les corrélations décroissent en fonction de la distance r selon une loi de puissance pour $\alpha \leq \alpha_C$ dont l'exposant est fonction de l'exposant de Luttinger $K = \frac{1}{2}$, voir équation 3.3. Comme on peut le voir sur la figure 3.9, ce comportement est correctement reproduit par notre approche. Plus précisément, on trouve, par une régression linéaire dans le cas $\alpha = \alpha_C$, un exposant de Luttinger $K = 0.497(5)$.

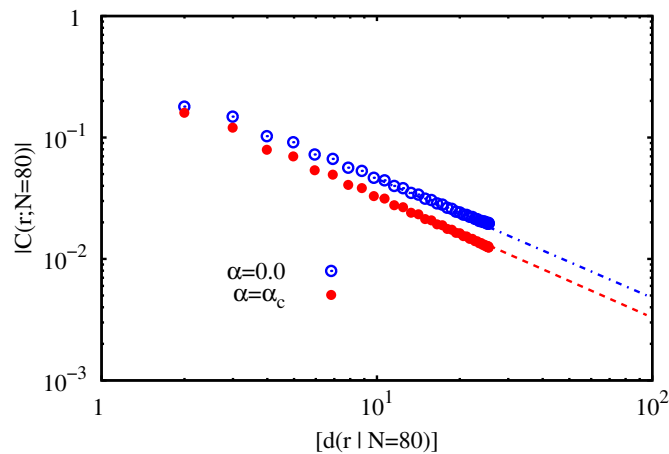


FIG. 3.9 Valeur absolue de la fonction de corrélation spin-spin de l'état fondamental d'une chaîne de taille $N = 80$ soumise à un Hamiltonien $J_1 - J_2$ en fonction de l'inverse de la longueur de la corde. Les lignes sont les régressions linéaires correspondant aux données numériques.

En réalité, la dépendance spatiale de la fonction de corrélation contient une correction logarithmique $C(r) \sim \frac{1}{r} \sqrt{\ln\left(\frac{r}{r_0}\right)} \lambda_0$ [32] qui est aussi visible dans nos résultats, voir figure 3.10. On peut voir en particulier que, dans le cas $\alpha = \alpha_C$, la correction logarithmique disparaît (ie $r_0 \rightarrow 0$ et $\lambda_0 \rightarrow 0$ avec $-\lambda_0 \ln r_0 \rightarrow 1$) ; ce dernier aspect est utilisé en référence [32] pour estimer la position de la transition avec une grande précision.

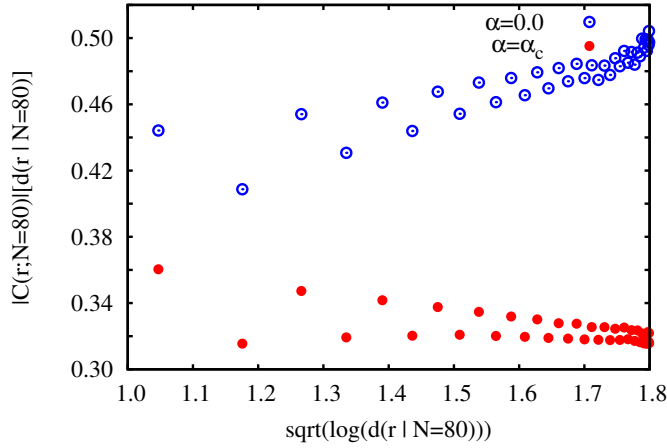


FIG. 3.10 Fonction de corrélation multipliée par la longueur de la corde, faisant apparaître les corrections logarithmiques dans le cas sans frustration $\alpha = 0$ qui disparaît lorsque la frustration approche du point critique $\alpha = \alpha_C$.

Incommensurabilité des corrélations Pour quantifier l'incommensurabilité des corrélations qui se développe à partir du point de Lifshitz, nous allons considérer le facteur de structure

$$S(k) = \sum_{\beta} S^{\beta\beta}(k) \quad (3.10)$$

où le facteur de structure pour la composante β des spins β est $S^{\beta\beta}(k) = \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle S_i^{\beta} S_j^{\beta} e^{ik(i-j)} \rangle$.

Sur la figure 3.11, on voit un pic à π caractéristique des corrélations de type Néel qui dominant jusqu'à $\alpha = \frac{1}{2}$. À partir du point de Lifshitz, le pic central se sépare en deux pics symétriques par rapport au point $k = \pi$, qui se déplacent continument vers $\frac{\pi}{2}$ et $\frac{3\pi}{2}$ lorsque α augmente.

L'habilité à décrire le développement d'héliomagnétisme incommensurable à courte portée est une grande réussite de notre *Ansatz*, étant donné le fait qu'il n'est pas accompagné d'une brisure de l'invariance temporelle.

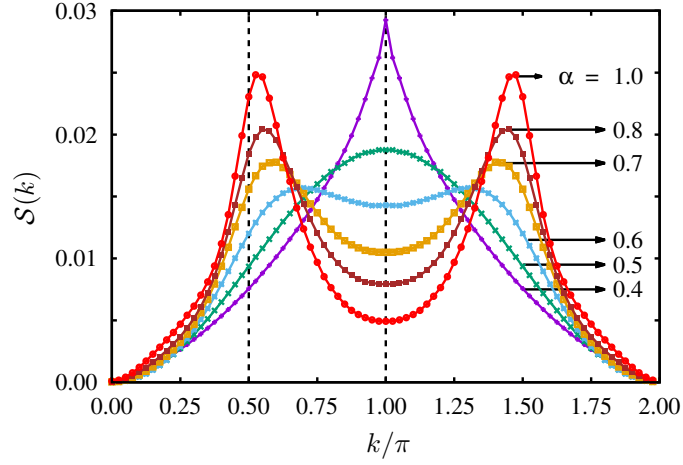


FIG. 3.11 Facteur de structure de l'état fondamental d'une chaîne de taille $N = 80$ soumise à un Hamiltonien $J_1 - J_2$. Les lignes sont des guides pour le regard.

On a également représenté l'évolution du vecteur de torsion ϕ (ie la position du pic de gauche dans la figure 3.11) en fonction de la frustration α sur la figure 3.12. En comparant les vecteurs obtenus avec ceux obtenus par DMRG dans les références [45] et [102], on trouve un bon accord entre les résultats, étant donné que les résultats DMRG ont été obtenus pour des systèmes à conditions ouvertes au bord et de taille différente par rapport à la notre.

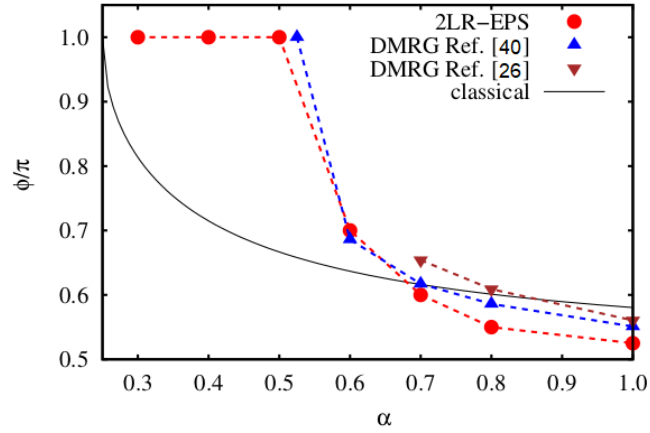


FIG. 3.12 Vecteur de torsion des corrélations d'une chaîne de taille $N = 80$ soumise à un Hamiltonien $J_1 - J_2$ en fonction de la frustration α . Les résultats sont comparés à ceux obtenus par algorithme DMRG dans les références [26] et [40].

Structure de signe Vérifier que les phases de tous les coefficients de l'état quantique trouvé par l'optimisation variationnelle sont alignées (modulo π) et fournissent une fonction d'onde à coefficients réels (à un facteur de phase globale près) serait bien trop coûteux numériquement pour un système de si grande taille. Il ne sera donc pas possible d'effectuer cette vérification comme nous l'avons fait dans la section précédente, cependant on peut considérer un autre test à partir du courant de spin

$\mathcal{J}_{ij} = i(S_i^+ S_j^- - S_i^- S_j^+)$. La valeur moyenne de cette quantité devrait être égale à zéro pour une fonction d'onde invariante par inversion temporelle et finie sinon. L'état quantique trouvé par l'optimisation variationnelle donne un courant de spin nul exactement dans la barre d'erreur statistique pour toutes les valeurs de la frustration α , ce qui suggère fortement que la fonction d'onde est à valeur réelle pour tous les coefficients à une phase globale près. Il faut noter que ce test est non trivial étant donné le fait que l'optimisation variationnelle exploite la nature complexe des coefficients de l'*Ansatz* pour introduire des corrélations incommensurables. À titre de comparaison, l'*Ansatz* champ moyen doublé d'un terme de Jastrow à valeur réelle développe des corrélations incommensurables au prix d'un courant de spin fini dû à la nature complexe de ses coefficients, comme mentionné en section 3.1.2.

Dimérisation À partir de $\alpha > \alpha_C$, le système développe une ordre VBC. Pour quantifier cette dimérisation du système, une quantité importante à considérer sont les corrélations à quatre sites de type dimère-dimère

$$D(r) = \frac{1}{N} \sum_i [\langle (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})(\mathbf{S}_{i+r} \cdot \mathbf{S}_{i+r+1}) \rangle - \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle^2]. \quad (3.11)$$

Plus précisément, par la suite, comme dans [86], nous utiliserons le paramètre d'ordre dimérisé

$$\mathcal{D}_N = \frac{D(\frac{N}{2}) - D(\frac{N}{2} - 1)}{2} \quad (3.12)$$

pour quantifier la dimérisation du système.

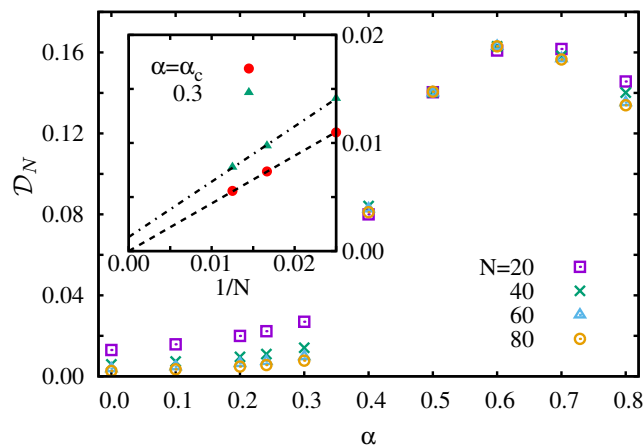


FIG. 3.13 Paramètre d'ordre dimérisé de l'état fondamental pour des chaînes de différentes tailles soumise à un Hamiltonien $J_1 - J_2$ en fonction de la frustration α . Le graphe intérieur représentant la même quantité en fonction de l'inverse de la taille du système pour $\alpha = \alpha_C$ et $\alpha = 0.3$. Les lignes sont les régressions linéaires correspondant aux données numériques.

Puisque les corrélations dimère-dimère montrent une décroissance en $D(r) \sim r^{-1}$, le paramètre évolue en $\mathcal{D}_N \sim N^{-1}$ pour $\alpha = \alpha_C$. On retrouve ce comportement linéaire sur la figure 3.13. Par contre, pour $\alpha > \alpha_C$, le paramètre d'ordre tend vers une valeur finie pour $N \rightarrow \infty$ et montre un maximum autour d'une frustration $\alpha \simeq 0.6$.

Entropie d'intrication Dans la phase non gappée $\alpha < \alpha_C$, l'entropie d'intrication de Rényi d'ordre 2 pour un sous-système de taille ℓ vaut

$$R_2(\ell, N) = \frac{c}{4} \log d(\ell|N) + c_1 + \dots \quad (3.13)$$

où $c = 1$ est la charge centrale, universelle dans toute la phase sans gap, et c_1 est une constante qui prend en compte les effets de taille finie [19]. De l'autre côté du point critique, l'entropie d'intrication sature à une constante, valant $\frac{c}{4} \log \xi$ proche du point critique α_C , elle évolue donc en loi d'aire. En particulier, la longueur de corrélation est minimale au point de Majumdar-Ghosh où l'intrication se concentre sur les sites à plus proche voisins et l'entropie d'intrication tend vers $S_2(\ell) \rightarrow \log 2$. Sur la figure 3.14, on peut voir que ces comportements sont correctement reproduits par l'Ansatz 2LR-EPS et en particulier, l'universalité de la charge centrale c dans le cas de la phase sans gap est bien retranscrite.

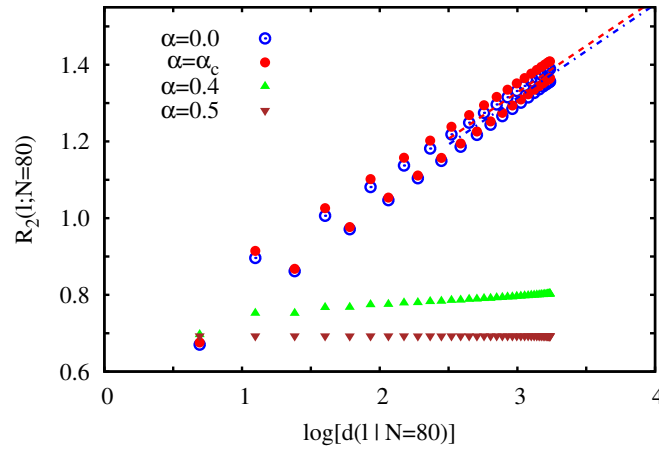


FIG. 3.14 Entropie de Rényi d'ordre 2 d'un sous-système de taille ℓ de l'état fondamental d'une chaîne de taille $N = 80$ soumise à un Hamiltonien $J_1 - J_2$ en fonction de la longueur de la corde $d(\ell|N)$ pour différentes valeurs de la frustration α . La ligne tirée (resp. pointillée-tirée) sont des régressions linéaires des données numériques pour $\alpha = \alpha_C$ (resp. $\alpha = 0$).

Pour poursuivre cette illustration du changement de comportement de l'intrication de chaque côté du point critique, on considère la différence $S_2^{N'-N} = S_2\left(\frac{N'}{2}\right) - S_2\left(\frac{N}{2}\right) \approx \frac{c}{4} \log\left(\frac{N'}{N}\right)$, ce qui permet d'obtenir un estimateur de taille fini pour la charge centrale par la quantité

$$c_{N,N'} = \frac{4S_2^{N'-N}}{\log\left(\frac{N'}{N}\right)} \quad (3.14)$$

dans laquelle les corrections du type c_1 sont éliminées par construction. On a représenté la quantité $c_{40,80}$ en fonction de la frustration α sur la figure 3.15. On voit alors clairement la transition entre la phase sans gap et la phase gappée par la chute de la quantité $c_{40,80}$ d'une valeur de ~ 1 à une valeur proche de 0. Après le point de Majumdar-Ghosh, pour un système de taille suffisamment grande devant la longueur de corrélation, la charge c doit rester proche de 0. Cependant, la longueur de corrélation augmentant avec α , pour $\alpha > 0.5$, on voit apparaître un effet de taille finie dans nos résultats qui explique l'augmentation de la quantité $c_{80,40}$ après le point de Majumdar-Ghosh.

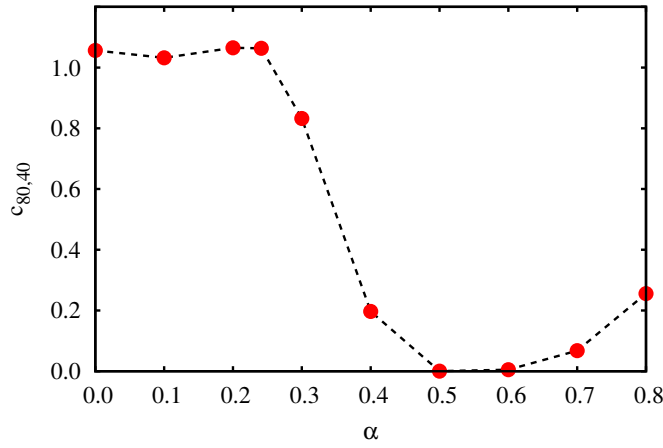


FIG. 3.15 Différence entre les entropies définies dans le texte entre des systèmes de taille $N = 80$ et $N = 40$ de l'état fondamental d'un système soumis à un Hamiltonien $J_1 - J_2$ en fonction de la frustration α .

Évolution temporelle suite à un *quench*

А ведь, голубчик : нет сильнее тех
двух воинов, терпение и время.

— L.Tolstoï

Mais crois moi, mon cher garçon, il n'y a rien de plus fort que
ces deux guerriers : la patience et le temps.

Nous allons nous intéresser ici à l'évolution temporelle d'un état quantique paramétré par l'*Ansatz* EPS. Pour ce faire, nous nous sommes concentrés sur un modèle dont l'évolution en temps réel est exactement soluble : la chaîne XX en présence d'un champ magnétique alterné. Nous verrons que par sa structure, notre *Ansatz* est un bon candidat pour décrire l'évolution temporelle d'un tel système se mappant sur des fermions libres. Nous avons considéré l'évolution temporelle à partir d'un même état quantique soumis à un Hamiltonien XX pour différentes valeurs du champ magnétique externe, de sorte à contrôler l'énergie de l'état initial par rapport à celle de l'état fondamental du Hamiltonien.

4.1	Évolution d'un système suite à un <i>quench</i>	80
4.1.1	Modèle XX en champ alterné et <i>quench</i> à partir d'un état de Néel	80
4.1.2	Relaxation vers l'équilibre : Ensemble de Gibbs standard/généralisé	81
4.2	Approche EPS	85
4.2.1	Choix des variables	85
4.2.2	Conservation de l'énergie	87
4.2.3	Reproduction de la fonction d'onde fermionique	87
4.3	Évolution temporelle des états EPS	90
4.3.1	Corrélations fermioniques	90
4.3.2	Aimantation uniforme et alternée	92
4.3.3	Fonctions de corrélation	94
4.3.4	Entropie d'intrication	97
4.4	Variation du champ magnétique	98

4.1 Évolution d'un système suite à un *quench*

4.1.1 Modèle XX en champ alterné et *quench* à partir d'un état de Néel

Par la suite, nous allons considérer un *quench*, qui consiste à préparer le système dans un état quantique donné et à le laisser évoluer selon un Hamiltonien dont il n'est pas état propre. On s'intéresse alors à l'évolution des corrélations et à la croissance de l'intrication au cours du temps.

Plus précisément, nous étudierons un *quench* d'un état de Néel $|\psi_0\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\ldots\rangle$ soumis au Hamiltonien \mathcal{H}_h^{XX} suivant

$$\mathcal{H}_h^{XX} = -J \sum_i (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) - h \sum_i (-1)^i S_i^z \quad (4.1)$$

Ce Hamiltonien est celui de la chaîne XX que nous avons considérée au chapitre 2 auquel nous avons ajouté un terme de couplage à un champ magnétique alterné h . Nous étudierons différents *quenches* en faisant varier le champ magnétique h . On remarque que pour un champ magnétique infini, l'état de Néel pris comme état initial est état fondamental du Hamiltonien \mathcal{H}_∞^{XX} . Pour caractériser le *quench*, une grandeur intéressante à considérer est l'énergie du *quench*, ie l'écart entre l'énergie initiale $E_0 = \frac{\langle\psi_0|\mathcal{H}_h^{XX}|\psi_0\rangle}{\langle\psi_0|\psi_0\rangle} = -h\frac{N}{2}$ et l'énergie fondamentale du système : cette grandeur permet de rendre compte à quel point l'état initial est énergétique pour le Hamiltonien considéré. Ainsi, comme on peut le voir sur la figure 4.1, plus le champ magnétique alterné h est faible, plus l'énergie du *quench* est élevée.

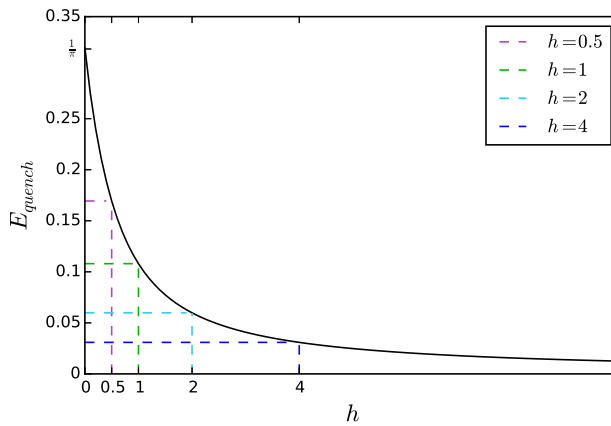


FIG. 4.1 Énergie par spin du *quench* d'un état de Néel soumis au Hamiltonien \mathcal{H}_h^{XX} en fonction du champ magnétique h . On a dessiné en pointillé les énergies relatives aux différents *quenches* que nous avons considérées dans ce chapitre.

Ainsi, plus \hbar est faible, plus l'état initial est éloigné de l'état fondamental et plus on s'attend à ce que la dynamique du *quench* soit difficile à reproduire. En effet, comme nous allons le quantifier dans la section 4.1.2, cet éloignement du fondamental va se traduire par une entropie d'intrication plus élevée et donc par un test numérique plus ardu pour notre *Ansatz*.

4.1.2 Relaxation vers l'équilibre : Ensemble de Gibbs standard/généralisé

Thermalisation des systèmes quantiques Considérons un système dans un état quantique $|\psi_0\rangle$ soumis à un Hamiltonien \mathcal{H} évoluant selon l'équation de Schrödinger. À l'instant t , l'état $|\psi(t)\rangle$ du système s'écrit donc

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}|\psi_0\rangle. \quad (4.2)$$

Considérons $|E_\alpha\rangle$ une base d'états propres du Hamiltonien \mathcal{H} associés aux valeurs propres E_α et une décomposition de l'état initial $|\psi_0\rangle = \sum_\alpha C_\alpha |E_\alpha\rangle$. Supposons que l'état initial n'est pas concentré sur l'un des états propres du Hamiltonien, on a donc $C_\alpha \sim O(2^{-\frac{N}{2}})$, puisque $\sum_\alpha |C_\alpha|^2 = 1$ pour une somme se faisant sur les 2^N états propres du Hamiltonien.

À l'instant t , une observable physique O du système vaut alors

$$\langle O \rangle_t = \langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle = \langle O \rangle_{DE} + \sum_{\alpha \neq \beta} e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)t} C_\alpha^* C_\beta \langle E_\alpha | O | E_\beta \rangle \quad (4.3)$$

où $\langle O \rangle_{DE} = \sum_\alpha |C_\alpha|^2 \langle E_\alpha | O | E_\alpha \rangle$ est appelée la moyenne de l'observable sur l'ensemble diagonal.

Cependant, si l'on considère une observable O extensive, on a $\langle E_\alpha | O^2 | E_\alpha \rangle = O(N^2)$ et, par la relation de clôture $\langle E_\alpha | O^2 | E_\alpha \rangle = \sum_\beta |\langle E_\alpha | O | E_\beta \rangle|^2$. La somme sur β se faisant sur les 2^N éléments de la base, on trouve qu'en moyenne

$$|\langle E_\alpha | O | E_\beta \rangle| \sim O(2^{-\frac{N}{2}} N). \quad (4.4)$$

De plus, pour un temps long t et un Hamiltonien possédant un grand nombre d'états propres non dégénérés, les phases $e^{\frac{i}{\hbar}E_\alpha t}$ se comportent comme des variables aléatoires indépendantes. Le terme $\sum_{\alpha \neq \beta} e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)t} C_\alpha^* C_\beta \langle E_\alpha | O | E_\beta \rangle$ se moyenne donc à zéro et on peut le voir comme somme de $O(2^{2N})$ termes aléatoires, on peut donc lui appliquer le théorème central limite. On trouve ainsi que

$$\sum_{\alpha \neq \beta} e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)t} C_\alpha^* C_\beta \langle E_\alpha | O | E_\beta \rangle = O(2^{-\frac{N}{2}} N) . \quad (4.5)$$

L'observable O , en équation 4.3, va donc thermaliser aux temps longs vers la valeur $\langle O \rangle_{DE}$.

Ensemble de Gibbs L'état stationnaire de l'évolution temporelle d'un système quantique est décrit pour un système générique par l'hypothèse de thermalisation des états propres (Eigenstate Thermalization Hypothesis - ETH) [25]. Cette théorie se base sur l'observation que pour, pour un état initial générique, l'énergie moyenne $\langle \psi_0 | \mathcal{H} | \psi_0 \rangle = E$ est déterminée avec une incertitude relative d'ordre $O(N^{-\frac{1}{2}})$ (pour des Hamiltoniens locaux) ; et sur l'hypothèse que la valeur moyenne de toute observable locale (ie qui est somme de termes locaux) O sur les états propres du Hamiltonien $\langle E_\alpha | O | E_\alpha \rangle$ est une fonction continue de l'énergie propre, $O(E_\alpha)$. Sous cette hypothèse, le comportement aux temps longs d'un système étant à la limite thermodynamique est donné par les valeurs moyennes de l'ensemble diagonal qui vont alors coïncider avec celles de l'ensemble microcanonique à énergie E , ou encore (pour $N \gg 1$) avec celle de l'ensemble canonique avec température T telle que $E = \langle \mathcal{H} \rangle_T$, où on a défini la moyenne thermique $\langle A \rangle_T = \text{Tr} (A \rho_{GE})$ avec

$$\rho_{GE} = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}}}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}} \quad (4.6)$$

la matrice densité de l'ensemble de Gibbs [47].

Cependant, cette description n'est valable que dans le cas où la seule quantité locale conservée est l'énergie, dans le cas contraire, les hypothèses de l'ETH ne sont plus vérifiées et il faut avoir recours à une autre théorie pour décrire l'état thermalisé.

Ensembles de Gibbs généralisés La dynamique d'un certain nombre de systèmes, particulièrement en 1D, n'obéit donc pas à l'ETH du fait des intégrales du mouvement qui contraignent l'évolution temporelle : c'est le cas des systèmes intégrables. Plus précisément, un système est dit intégrable s'il possède un nombre extensif d'opérateurs I_k sommes d'opérateurs locaux qui commutent avec le Hamiltonien et entre eux.

Les *quenches* que nous avons étudiés par la suite appartiennent à cette classe des systèmes intégrables. Une façon d'estimer la qualité de notre approche est alors de vérifier qu'au long de la dynamique temporelle, les quantités $\frac{\langle \psi(t) | I_k | \psi(t) \rangle}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle}$ restent constantes.

Une première de ces observables est le Hamiltonien \mathcal{H} lui même et la quantité constante qui lui est reliée est l'énergie du système. Une autre observable à laquelle il est facile d'accéder est l'aimantation totale sur la chaîne $\sum_i S_i^z$, qui reste donc elle aussi constante

tout le long de l'évolution du système. Plus généralement, avec le mapping que nous avons présenté dans le chapitre 2 et dans le cas d'un *quench* à $h = 0$, toutes les fonctions de corrélations fermioniques à deux sites $C_{ferm} = \sum_i (a_i^\dagger a_{i+r} + hc)$, pour une distance r fixée entre les sites, sont des intégrales du mouvement.

Pouvoir reproduire ces intégrales du mouvement est primordial pour reproduire la thermalisation des systèmes intégrables. En effet, il est possible de généraliser la description de l'état thermalisé fourni par l'ensemble de Gibbs en considérant l'ensemble de Gibbs généralisé (GGE) [25][85] caractérisé par les matrices densité

$$\rho_{GGE} = \frac{e^{-\sum_k \lambda_k I_k}}{\text{Tr} \left(e^{-\sum_k \lambda_k I_k} \right)} \quad (4.7)$$

où les λ_k sont des multiplicateurs de Lagrange (ou les températures inverses généralisées) obtenus en fixant les conditions initiales de chaque observable I_k , $\langle I_k \rangle_{GGE} = \langle \psi_0 | I_k | \psi_0 \rangle$.

Cet ensemble de Gibbs généralisé décrit les propriétés statistiques de l'état quantique aux temps longs. Contrairement à la description par l'ensemble de Gibbs, où l'état stationnaire ne dépend que de l'énergie de l'état initial, il y a donc une mémoire assez forte de l'état initial dans l'état final à travers des valeurs moyennes des opérateurs I_k .

Calcul de la valeur d'équilibre de l'entropie d'intrication Dans ce paragraphe, nous allons nous intéresser spécifiquement au cas d'un *quench* d'un état $|\psi(0)\rangle$ soumis à un Hamiltonien de chaîne XX en présence d'un champ magnétique alterné h . Le système se mappe alors comme nous l'avons vu précédemment sur un système de fermions libres ; le Hamiltonien fermionique se diagonalise alors sous la forme

$$\mathcal{H} = \sum_k \epsilon_k f_k^\dagger f_k. \quad (4.8)$$

Dans ce cas, les intégrales du mouvement sont $I_k = f_k^\dagger f_k$, et la valeur de ces observables est conservée au cours de l'évolution temporelle :

$$I_k^{(0)} = \langle \psi_0 | I_k | \psi_0 \rangle. \quad (4.9)$$

La matrice densité décrivant l'état thermalisé est alors la matrice ρ_{GGE} définie précédemment par l'équation 4.7 avec des coefficients λ_k définis par les conditions initiales de l'équation 4.9.

Cette relation peut s'écrire explicitement : les modes k sont des modes fermioniques indépendants de température inverse λ_k , ainsi, la valeur moyenne des intégrales du mouvement I_k suit la distribution de Fermi

$$I_k^{(0)} = \text{Tr}(\rho_{\text{GGE}} I_k) = \frac{1}{e^{\lambda_k} + 1} . \quad (4.10)$$

On trouve alors la valeur suivante des températures inverses

$$\lambda_k = \log \left(\frac{1}{I_k^{(0)}} - 1 \right) . \quad (4.11)$$

On peut ainsi exprimer explicitement l'ensemble stationnaire en fonction des conditions initiales $I_k^{(0)}$. Pour un sous-système de taille suffisamment grande, on peut exprimer la densité d'entropie d'intrication d'un sous-système ayant relaxé sous la forme de l'entropie thermodynamique d'un gaz de Fermi avec des populations $I_k^{(0)}$

$$s_{vN}^{\text{GGE}} = -\frac{1}{N} \sum_k \left[I_k^{(0)} \log I_k^{(0)} + (1 - I_k^{(0)}) \log(1 - I_k^{(0)}) \right] \quad (4.12)$$

dans le cas de l'entropie de von Neumann. Si l'on considère l'entropie de Renyi d'ordre n , on a

$$r_n^{\text{GGE}} = \frac{1}{N(1-n)} \sum_k \log \left[(I_k^{(0)})^n + (1 - I_k^{(0)})^n \right] . \quad (4.13)$$

Dans le cas d'un *quench* depuis l'état de Néel $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots\rangle = |1010\dots\rangle$, les intégrales du mouvement $I_k^{(0)}$ se mettent sous la forme

$$\begin{aligned} I_k^{(0)} &= \langle 1010\dots | f_k^\dagger f_k | 1010\dots \rangle = \sum_{ij} \psi_{i,k} \psi_{j,k}^* \langle 1010\dots | f_i^\dagger f_j | 1010\dots \rangle \\ &= \sum_i \frac{(1 - (-1)^i)}{2} |\psi_{i,k}|^2 \end{aligned} \quad (4.14)$$

où $\psi_{i,k}$ est la fonction d'onde du k^e état propre du Hamiltonien à une particule

$$H = -\frac{J}{2} \sum_i (|i\rangle\langle i+1| + \text{h.c.}) - h \sum_i (-1)^i |i\rangle\langle i| . \quad (4.15)$$

Ainsi, ces intégrales du mouvements sont reliées aux densités alternées des états propres du Hamiltonien. Dans le cas d'un champ magnétique alterné $h = \infty$, les états

propres sont exactement localisés sur des sites, ainsi, les intégrales du mouvement $I_k^{(0)}$ ne peuvent prendre que les valeurs 0 ou 1 et l'entropie tend vers 0.

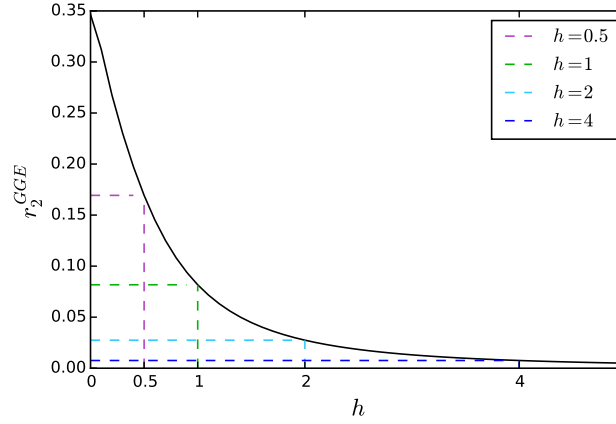


FIG. 4.2 Densité d'entropie du GGE pour un système initialement dans l'état de Néel et soumis à une évolution dirigée par le Hamiltonien \mathcal{H}_h^{XX} en fonction du champ magnétique h . On a dessiné en pointillé les entropies relatives aux différents *quenches* que nous avons considérés dans ce chapitre.

Puisque l'intrication est une quantité difficile à reproduire numériquement, on peut s'attendre à une nette amélioration de notre *Ansatz* à reproduire l'évolution temporelle entre le cas $h = 0$ et le cas h fini.

4.2 Approche EPS

Pour étudier l'évolution temporelle de ces systèmes suite à un *quench*, nous avons utilisé l'*Ansatz* 2LR-EPS pour reproduire au mieux l'évolution des corrélations au cours du temps. Nous avons cependant effectué quelques adaptations à l'*Ansatz* par rapport à celui que nous avons présenté précédemment. Nous allons les décrire dans cette section.

4.2.1 Choix des variables

La paramétrisation de l'état initial (état de Néel suivant z) en terme des variables associées aux plaquettes $C_P^{\sigma_P}$ pose un problème : l'annulation de tous les coefficients incompatibles avec cet état initial. Par exemple, dans le cas de la plaquette constituée du premier et du deuxième site, on a $C_{12}^{\uparrow\downarrow} = 1$ et $C_{12}^{\uparrow\uparrow} = C_{12}^{\downarrow\downarrow} = C_{12}^{\downarrow\uparrow} = 0$.

Un tel état initial rend impossible l'utilisation de l'évolution basée sur le TDVP car le gradient de l'énergie par rapport aux coefficients qui s'annulent est mal défini (comme résultant d'une forme indéterminée $\frac{0}{0}$, voir section 2.1.2), ainsi que la matrice S qui présente la même singularité.

Nous avons donc effectué une rotation des axes utilisés pour définir le système. Nous avons considéré comme état initial un état de Néel orienté le long de y selon

$$|\psi_0\rangle = \bigotimes_j \frac{|\uparrow_z\rangle + i(-1)^j |\downarrow_z\rangle}{\sqrt{2}} \quad (4.16)$$

et le Hamiltonien du système se réécrit le long de z et x avec un champ magnétique alterné le long de y

$$\mathcal{H}_h^{XX} = -J \sum_i (S_i^z S_{i+1}^z + S_i^x S_{i+1}^x) - h \sum_i S_i^y. \quad (4.17)$$

Cette rotation des axes rend tous les coefficients $C_P^{\sigma_P}$ non nuls, si on garde l'expression des configurations σ_P selon z .

Cependant, l'expression de la matrice S dans cette nouvelle configuration des axes est d'un rang assez faible, du fait des redondances dans le choix des variables décrivant l'*Ansatz*, ce qui complique l'inversion de la matrice S nécessaire dans l'évolution temporelle résultant de l'utilisation du TDVP. Pour éliminer de la redondance dans le choix des paramètres variationnels, nous avons choisi de reparamétriser les coefficients $W_{\sigma}(t)$ de la décomposition de l'état quantique $|\psi(t)\rangle = \sum_{\sigma} W_{\sigma}(t) |\sigma\rangle$ sous la forme

$$W_{\sigma}(t) = \prod_{i < j} e^{i(a_{1ij}(t)\sigma_i + a_{2ij}(t)\sigma_j + b_{ij}(t)\sigma_i\sigma_j)} \quad (4.18)$$

où les variables a_{1ij} , a_{2ij} et b_{ij} sont à valeur complexe. Le nombre de variables décrivant l'*Ansatz* est alors réduit, passant de $2N(N-1)$ à $\frac{3}{2}N(N-1)$ variables.

Les coefficients de l'état initial s'écrivent alors

$$\begin{aligned} a_{1ij}(0) &= \frac{i\pi + \frac{\pi}{2}}{N-1} \\ a_{2ij}(0) &= \frac{j\pi + \frac{\pi}{2}}{N-1} \\ b_{ij}(0) &= 0. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Cette reparamétrisation ne garantit cependant pas l'inversibilité de la matrice S , notamment pour l'état initial. Il est important de noter que dans ce cas, on n'est pas autorisé à ajouter un terme diagonal à la matrice S (comme nous l'avons fait dans le cas de l'étude de l'évolution en temps imaginaire) puisque maintenant l'évolution

doit être menée avec la forme exacte de la matrice S issue du TDVP afin d'approximer au mieux l'évolution exacte à chaque étape. Ainsi, suivant [20], nous avons utilisé la pseudo-inverse de Moore-Penrose [29][76] qui consiste à trouver une solution du système linéaire

$$i S \dot{\mathbf{C}} = \vec{\nabla}_{\mathbf{C}^*} E. \quad (4.20)$$

Cette stratégie permet de produire une évolution de l'Ansatz, $\mathbf{C} = \mathbf{C}(t)$, qui vérifie le TDVP comme nous l'avons discuté dans la sous-section 2.1.3.

4.2.2 Conservation de l'énergie

Il est important de noter que l'équation 4.20 d'évolution temporelle dérivée du TDVP possède une propriété fondamentale de l'évolution temporelle exacte : la conservation de l'énergie.

Pour montrer que la conservation de l'énergie est bien garantie par l'équation 4.20, considérons les variations temporelles de $E(\mathbf{C}, \mathbf{C}^*) = \frac{\langle \psi(\mathbf{C}) | \mathcal{H} | \psi(\mathbf{C}) \rangle}{\langle \psi(\mathbf{C}) | \psi(\mathbf{C}) \rangle}$,

$$\partial_t E = \sum_k (\dot{C}_k \partial_{C_k} E + \dot{C}_k^* \partial_{C_k^*} E). \quad (4.21)$$

Or puisque le Hamiltonien est hermitien, $E \in \mathbb{R}$, on peut appliquer l'équation 4.20 aux deux dérivées par la relation $\partial_{C_k} E = (\partial_{C_k^*} E)^*$:

$$\partial_t E = i \sum_{kj} (-\dot{C}_j S_{jk}^* \dot{C}_k^* + \dot{C}_k^* S_{kj} \dot{C}_j). \quad (4.22)$$

Par construction, la matrice S étant hermitienne, on trouve que $S_{kj} = S_{jk}^*$, et on obtient donc la conservation de l'énergie comme découlant de l'équation 4.20.

Ainsi, tant que la linéarisation de la relation 4.20 est vérifiée, ie tant que l'on considère des pas de temps suffisamment réduits, la conservation de l'énergie est assurée.

4.2.3 Reproduction de la fonction d'onde fermionique

Le but de notre étude est de reproduire l'évolution temporelle d'un système qui se mappe sur un système de fermions libres, tel que la chaîne XX. Nous allons donc dans ce paragraphe nous intéresser à la structure d'une fonction d'onde de fermions libres quelconque afin de la comparer à la structure de l'Ansatz 2LR-EPS.

Considérons un système de $\frac{N}{2}$ fermions décrits par un état quantique $|\psi\rangle$, qui se décompose selon les opérateurs de création fermioniques en chaque site f_i^\dagger selon la formule

$$|\psi\rangle = \prod_{n=1}^{\frac{N}{2}} \left(\sum_{i=1}^N \psi_i^{(n)} f_i^\dagger \right) |0\rangle \quad (4.23)$$

Or les opérateurs de création fermioniques anticommulent : on peut alors sommer sur les états de Fock fermioniques $|\mathbf{n}\rangle$, et on trouve une expression en fonctions de déterminants de Slater [90] de $\frac{N}{2}$ fermions

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\left(\frac{N}{2}\right)!} \sum_{\substack{\mathbf{n} \\ \|\mathbf{n}\| = \frac{N}{2}}} \sum_{\chi} \epsilon(\chi) \psi_{\chi(1)}^1 \dots \psi_{\chi(\frac{N}{2})}^{\frac{N}{2}} |\mathbf{n}\rangle \quad (4.24)$$

la première somme se faisant sur tous les états de Fock $|\mathbf{n}\rangle$ à $\frac{N}{2}$ fermions et la deuxième somme sur toutes les permutations χ de $\llbracket 1, \frac{N}{2} \rrbracket$ dans l'ensemble des sites occupés par un fermion dans la configuration \mathbf{n} . On a posé $\epsilon(\chi)$ la signature de la permutation χ .

Les coefficients $W_{\mathbf{n}}^{exa}$ de l'état quantique $|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{n}} W_{\mathbf{n}}^{exa} |\mathbf{n}\rangle$ dans la base de Fock, prennent une forme bien particulière

$$W_{\mathbf{n}}^{exa} = \sum_{\chi} \epsilon(\chi) \prod_{i=1}^N g_i^{\chi}(n_i) \quad (4.25)$$

i étant un site du système et g_i^{χ} qui sont des fonctions ne dépendant que du site i et pas des autres sites. On remarque que la structure du signe ainsi produite dépend seulement des sites et des permutations χ .

En parallèle, les coefficients W_{σ}^{LR2} d'un état quelconque de l'Ansatz LR2 s'écrivent sous la forme 4.18. Cependant, puisque $\sigma_i = \pm 1$, $\sigma_i^2 = 1$, on a alors

$$e^{ib_{ij}\sigma_i\sigma_j} = \cosh b_{ij} + \sigma_i\sigma_j \sinh b_{ij} \quad (4.26)$$

Les coefficients W_{σ}^{LR2} se réécrivent alors

$$W_{\sigma}^{LR2} = \prod_{i < j} \left((e^{ia_{1ij}\sigma_i})(e^{ia_{2ij}\sigma_j}) \cosh b_{ij} + (\sigma_i e^{ia_{1ij}\sigma_i})(\sigma_j e^{ia_{2ij}\sigma_j}) \sinh b_{ij} \right) \quad (4.27)$$

On peut ainsi les mettre sous la forme

$$\begin{aligned} W_{\sigma}^{LR2} &= \prod_{i < j} \left(\varphi_{ij}^{(1)}(\sigma_i) \varphi_{ij}^{(1)}(\sigma_j) + \varphi_{ij}^{(2)}(\sigma_i) \varphi_{ij}^{(2)}(\sigma_j) \right) \\ &= \sum_{\{c_{ij}\}} \prod_{i < j} \varphi_{ij}^{(c_{ij})}(\sigma_i) \varphi_{ij}^{(c_{ij})}(\sigma_j) \end{aligned} \quad (4.28)$$

où $\varphi_{ij}^{(1)}(\sigma_{i(j)}) = e^{ia_{1(2)ij}\sigma_{i(j)}} \sqrt{\cosh b_{ij}}$, $\varphi_{ij}^{(2)}(\sigma_{i(j)}) = \sigma_{i(j)} e^{ia_{1(2)ij}\sigma_{i(j)}} \sqrt{\sinh b_{ij}}$, et où la somme s'effectue sur tous les vecteurs de choix $\{c_{ij}\}$ avec $c_{ij} = 1$ ou 2 pour chaque paire ij .

Cette somme contient donc $2^{\frac{N}{2}(N-1)}$ termes. Alors que la somme 4.25 sur les permutations χ contient $\left(\frac{N}{2}\right)! \sim \sqrt{\pi N} \left(\frac{N}{2e}\right)^{\frac{N}{2}}$ termes. Les coefficients W_{σ}^{LR2} contiennent donc plus de termes en forme de produit de fonctions à un site que les coefficients W_{σ}^{exa} .

On remarquera également qu'une permutation χ de sites fermioniques peut se mettre sous la forme d'un choix de couples ij avec $i \leq \frac{N}{2}$ et j un site fermionique occupé. En effet, une permutation χ est uniquement déterminée par l'image de l'élément i , il est donc possible d'associer aux valeurs $\varphi^{(1)}$ les valeurs des coefficients de la décomposition 4.25 en chacun des sites et aux valeurs $\varphi^{(2)}$ simplement la valeur 1. À l'inverse, un vecteur de choix \mathbf{c} ne représente pas forcément une permutation mais est un ensemble bien plus large. Il est donc possible de reproduire la somme sur χ avec la somme sur $\{c_{ij}\}$.

De plus, il est possible de reproduire le produit sur tous les sites i , $\prod_{i=1}^N g_i^{\chi}(n_i)$, à partir du produit $\prod_{i < j} \varphi_{ij}^{c_{ij}}(\sigma_i) \varphi_{ij}^{c_{ij}}(\sigma_j)$ qui se fait sur nettement plus d'éléments.

Il ne reste alors plus qu'à savoir si l'Ansatz 2LR-EPS est capable de reproduire la signature de la permutation $\epsilon(\chi)$. Fixons une permutation χ et une décomposition de cette permutation en transposition de deux sites $\chi = \tau_{\alpha_1 \beta_1} \circ \dots \circ \tau_{\alpha_M \beta_M}$. On notera que cette décomposition n'est pas forcément unique. Cependant, la signature de cette permutation s'écrit alors $\epsilon(\chi) = \prod_{m=1}^M \epsilon(\tau_{\alpha_m \beta_m})$. On peut alors associer à la paire (α_m, β_m) le signe associé à la transposition $\tau_{\alpha_m \beta_m}$ dans la décomposition, chaque transposition pouvant apparaître plusieurs fois dans la décomposition. Il est alors possible d'associer ce signe au coefficient $\varphi_{\alpha_m \beta_m}^{c_{\alpha_m \beta_m}}$ et de faire apparaître un signe $\epsilon(\chi)$ devant le produit $\prod_{i < j} \varphi_{ij}^{c_{ij}}(\sigma_i) \varphi_{ij}^{c_{ij}}(\sigma_j)$, pour le vecteur de choix c_{ij} associé à la permutation χ .

Cependant, même si on peut reproduire le signe sur chaque permutation indépendamment, rien ne nous garantit que l'*Ansatz* puisse contenir le signe de toutes les permutations en même temps. En effet, du fait de la complexité de la décomposition d'une permutation en produit de transpositions, il est difficile de garantir que l'on puisse choisir la bonne correspondance entre le vecteur de choix \mathbf{c} et la permutation χ et les bons signes pour tous les coefficients φ de sorte à reproduire la structure de signe $\epsilon(\chi)$ sur tous les coefficients.

Par conséquent, seule la comparaison directe entre les résultats exacts et les résultats variationnels peut permettre de conclure quant à la capacité des états 2LR-EPS à reproduire des états de fermions libres.

4.3 Évolution temporelle des états EPS

Nous discuterons dans cette section des premiers résultats que nous avons obtenus pour l'étude de la dynamique temporelle. Nous nous intéresserons donc à un *quench* d'un état de Néel $|\psi_0\rangle$ qui évolue suivant un Hamiltonien de chaîne XX en l'absence de champ magnétique. Comme nous l'avons vu précédemment, il s'agit a priori du cas le plus difficile à reproduire parmi les *quenches* que nous allons considérer, car l'entropie d'intrication attendue dans l'état stationnaire est maximale, voir figure 4.2.

Comme dans le chapitre 2, nous avons utilisé le mapping sur les fermions libres pour décrire exactement l'évolution temporelle et comparer les résultats de l'*Ansatz* 2LR-EPS avec des résultats exacts. La seule différence majeure avec la méthode de résolution exacte que nous avons utilisée précédemment étant qu'au lieu de considérer un état de mer de Fermi, on considère un état de Néel que l'on décompose dans la base des états propres du Hamiltonien avant de faire évoluer chacune des composantes par un terme de phase dépendant du temps. On peut alors appliquer les algorithmes présentés dans les annexes B et C pour calculer les valeurs des observables physiques décrivant le système.

Nous présenterons les résultats dans le même système d'axes que dans les chapitres précédents, ie nous considérerons un Hamiltonien XX selon les directions x et y et un état de Néel selon l'axe z .

4.3.1 Corrélations fermioniques

Une première façon d'évaluer la qualité de notre approche à reproduire la dynamique temporelle est d'analyser sa capacité à reproduire les intégrales du mouvement. Comme nous l'avons vu précédemment, dans le cas de ce *quench*, les fonctions de corrélation fermioniques à deux sites à distance d donnée sont des intégrales du mou-

vement, avec le cas particulier $d = 1$ où cette fonction de corrélation n'est rien d'autre que l'énergie du système avec un champ magnétique nul.

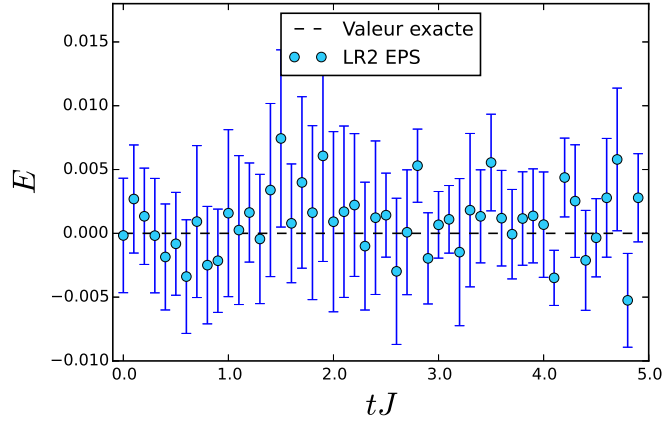


FIG. 4.3 Évolution temporelle de l'énergie par sites suite à un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX pour une chaîne de taille $N = 40$. On a représenté par la ligne centrale (en noir) la valeur exacte $E = 0$. On a tracé les barres d'erreur à deux écarts types

On a ainsi représenté sur la figure 4.3 l'évolution de l'énergie. On peut remarquer que la plupart des énergies calculées sont bien en accord avec le résultat exacte dans la barre d'erreur. Cependant, quelques points s'éloignent de la valeur exacte au delà de 2 écarts types, il faut noter que cela ne signifie pas forcément que la fonction d'onde de l'*Ansatz* reproduit mal le résultat exact. En effet la déviation de l'énergie par rapport à la valeur initiale n'a pas de comportement systématique, mais elle fluctue d'une façon symétrique entre valeurs positives et négatives.

Pour aller plus loin dans notre étude des intégrales du mouvement, on peut considérer les corrélations fermioniques à plus grande distance

$$C_{ferm} = \left\langle S_{i+r}^{\dagger} e^{-i\pi \sum_{k=i+1}^{i+r-1} (S_k^z + \frac{1}{2})} S_i^{-} \right\rangle + hc. \quad (4.29)$$

Comme on peut le voir sur la figure 4.4, les corrélations fermioniques restent sous les barres d'erreur, à part pour quelques points, ce qui comme précédemment ne remet pas forcément en cause la qualité de la fonction d'onde trouvée par l'algorithme.

Finalement, l'*Ansatz* 2LR-EPS semble permettre de reproduire la conservation de toutes les intégrales du mouvement avec une excellente précision. Ainsi, puisque ces intégrales du mouvements permettent de décrire exactement l'état quantique thermalisé, on s'attend à ce que notre *Ansatz* reproduise correctement l'évolution temporelle suite au *quench* aux temps longs.

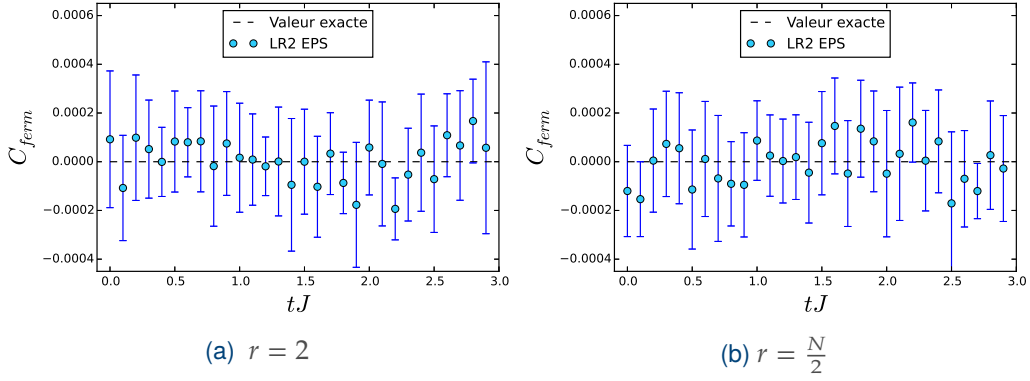


FIG. 4.4 Évolution des corrélations fermioniques C_{ferm} entre deux sites distants d'une distance r par sites suite à un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX pour une chaîne de taille $N = 40$. On a représenté par la ligne centrale (en noir) la valeur exacte $C_{ferm} = 0$. On a tracé les barres d'erreur à deux écarts types.

4.3.2 Aimantation uniforme et alternée

Une autre intégrale du mouvement est l'aimantation totale le long de la chaîne dans la direction de l'axe z , $M_{tot} = \frac{1}{N} \sum_i S_i^z$, en effet, bien que l'aimantation en chacun des sites ne soit pas conservée, l'aimantation totale, qui dans le mapping sur le modèle de fermions libres est le nombre de fermions, commute avec le Hamiltonien de chaîne XX et reste constante au cours de l'évolution temporelle. Cette absence d'évolution est particulièrement bien reproduite par notre approche dans les barres d'erreur statistiques, comme on peut le voir sur la figure 4.5. On remarque que les barres d'erreur augmentent sur les 100 premières itérations de l'algorithme avant de stagner, correspondant au moment où les fluctuations de l'aimantation totale augmentent.

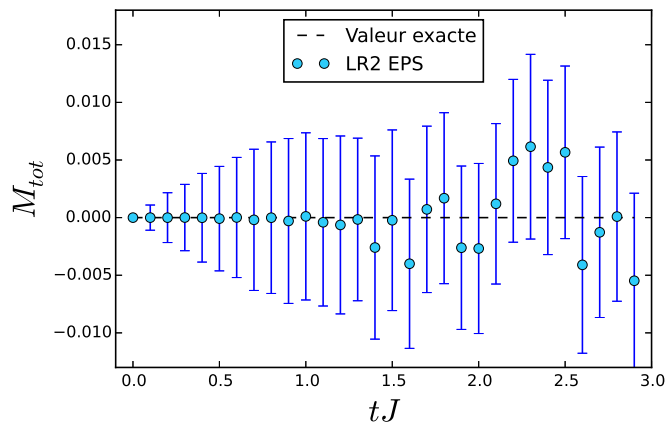


FIG. 4.5 Évolution de l'aimantation totale par sites le long de l'axe z suite à un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX pour une chaîne de taille $N = 40$. On a représenté par la ligne centrale (en noir) la valeur exacte $M_{tot} = 0$. On a tracé les barres d'erreur à deux écarts types.

Pour aller plus loin, on peut s'intéresser à l'aimantation alternée $M_{st} = \sum_i (-1)^i S_i^z$ pour voir la qualité de notre *Ansatz* à reproduire l'évolution temporelle suite à un *quench*. Comme on peut le voir dans la figure 4.6, notre approche reproduit exactement l'aimantation alternée jusqu'à un temps $tJ \sim 1$ avant de s'éloigner du résultat exact tout en reproduisant l'allure de la courbe.

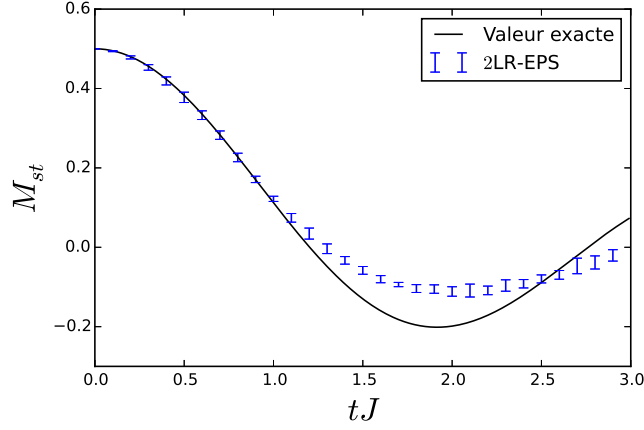
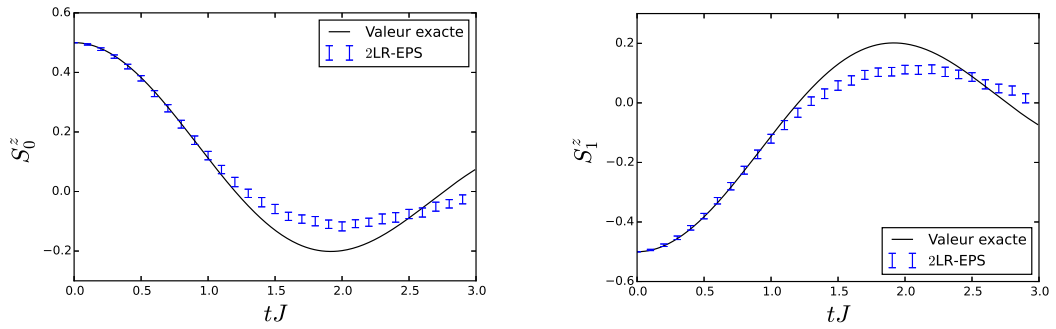


FIG. 4.6 Évolution de l'aimantation alternée le long de l'axe z d'un système quantique suite à un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX pour une chaîne de taille $N = 40$. La valeur exacte est obtenue par mapping sur un système de fermions libres.

On remarque, sur la figure 4.7, que notre approche reproduit la symétrie des aimantations locales qui sont exactement les mêmes (à la barre d'erreur près) pour deux sites de même parité sur la chaîne, et exactement opposés pour deux sites de parité différente. Les courbes 4.6 et 4.7 se superposent ainsi parfaitement, dans les barres d'erreur.



(a) Aimantation locale en un site pair le long de l'axe z

(b) Aimantation locale en un site impair le long de l'axe z

FIG. 4.7 Évolution d'un système quantique suite à un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX pour une chaîne de taille $N = 40$. La valeur exacte est obtenue par mapping sur un système de fermions libres.

4.3.3 Fonctions de corrélation

Pour poursuivre notre étude, nous avons ensuite étudié l'évolution des corrélations au cours du temps.

Corrélation des composantes x et y des spins Commençons par nous intéresser aux corrélations le long des axes x et y

$$C^{xx}(r) = \sum_i (S_i^x S_{i+r}^x + S_i^y S_{i+r}^y) \quad (4.30)$$

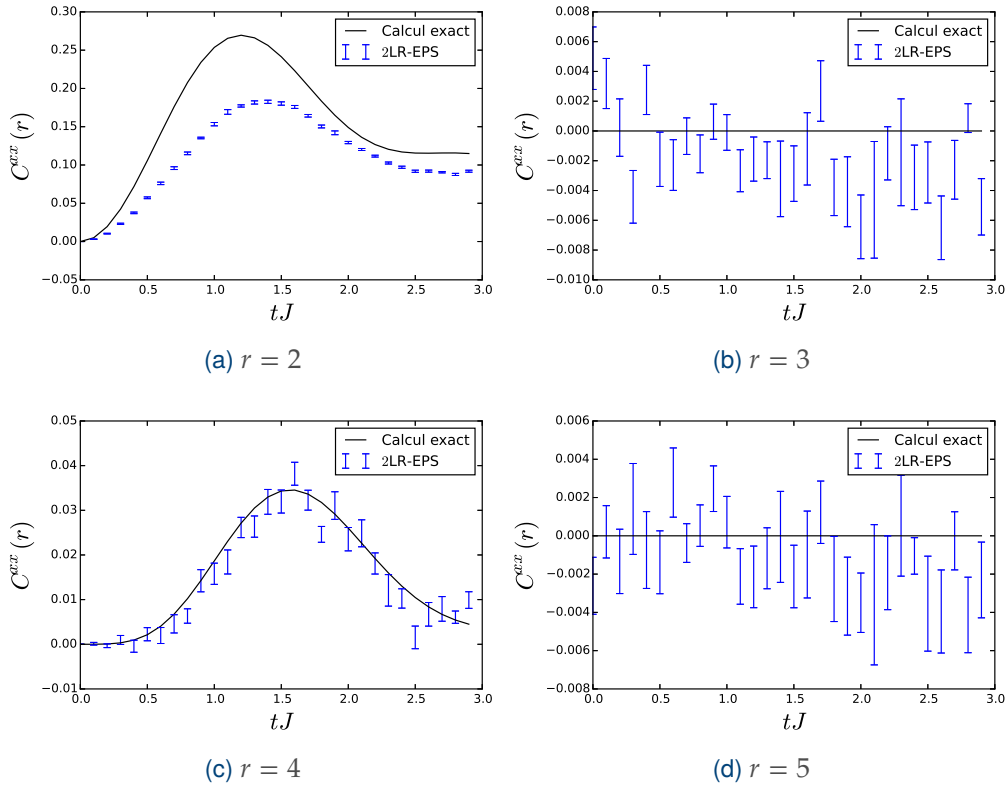


FIG. 4.8 Évolution des corrélations entre deux sites séparés d'une distance r le long des axes x et y suite à un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX pour une chaîne de taille $N = 40$. On compare le résultat obtenu par l'approche 2LR-EPS et le résultat exact obtenu par mapping sur un système de fermions libres. Les barres d'erreur représentent une déviation standard sur l'algorithme Monte Carlo.

Pour une distance entre sites $r = 1$, les corrélations $C^{xx}(1)$ correspondent à l'énergie du système et n'évoluent donc pas, comme on l'a discuté à propos de la figure 4.3. À distance plus élevée, on trouve la figure 4.8. Les corrélations à distance impaire de sites, figures 4.8b et 4.8d, sont exactement nulles et notre *Ansatz* reproduit correctement cette valeur à l'erreur statistique près. Les corrélations à distance $r = 4$, figure 4.8c, sont aussi correctement reproduites à l'erreur statistique près. Par contre, la corrélation à

distance $r = 2$, figure 4.8a, est sous-estimée par l'approche 2LR-EPS, cependant l'allure de la courbe est correctement reproduite. À distance supérieure, les corrélations sont exactement nulles (pour les distances impaires) ou très faibles (pour les distances paires), et l'Ansatz 2LR-EPS reproduit alors les corrélations à l'erreur statistique près.

Corrélation des composantes z des spins Considérons maintenant les corrélations entre les composantes z des spins

$$C^{zz}(r) = \sum_i S_i^z S_{i+r}^z \quad (4.31)$$

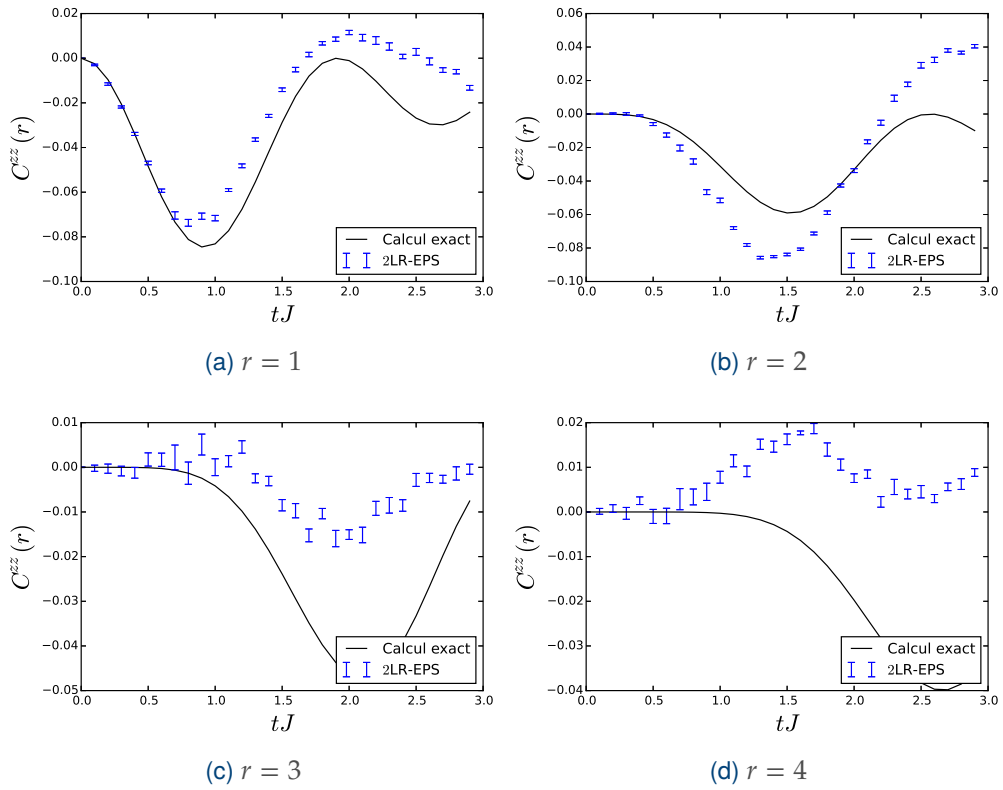


FIG. 4.9 Évolution des corrélations entre deux sites séparés d'une distance r le long de l'axe z suite à un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX pour une chaîne de taille $N = 40$. On compare le résultat obtenu par l'approche 2LR-EPS et le résultat exact obtenu par mapping sur un système de fermions libres. Les barres d'erreur représentent une déviation standard sur l'algorithme Monte Carlo.

L'Ansatz 2LR-EPS permet de reproduire l'allure des courbes des corrélations, comme montré sur la figure 4.9. On remarque de plus, figure 4.9a, que les corrélations selon z à distance $r = 1$ sont particulièrement bien reproduites pour les premières itérations, avant de s'éloigner légèrement tout en reproduisant l'allure de la courbe. Par contre à plus grande distance, $r = 3$ et $r = 4$, l'approche peine à reproduire l'amplitude des corrélations et surtout leur signe, cependant elle réussit à situer la position du

minimum des corrélations de façon fidèle et permet de reproduire ainsi la propagation des corrélations dans le système, comme nous allons en discuter dans le prochain paragraphe.

Cône de lumière On peut donc reproduire la propagation des corrélations au cours du temps. Comme on peut le voir sur les figures 4.10 et 4.11, cette propagation des corrélations s'effectue le long d'un cône causal (ou cône de lumière) dont la forme est dictée par la propagation des excitations élémentaires de vitesse de groupe maximale. Dans le cas que nous étudions, les excitations ont une nature de quasi-particules fermioniques avec relation de dispersion $\epsilon_k = -J \cos(k)$ et donc une vitesse de groupe maximale $v_g = J$. Le cône de lumière est alors défini par la relation temps-espace $t = \frac{r}{2J}$, qui est bien reproduite par nos données.

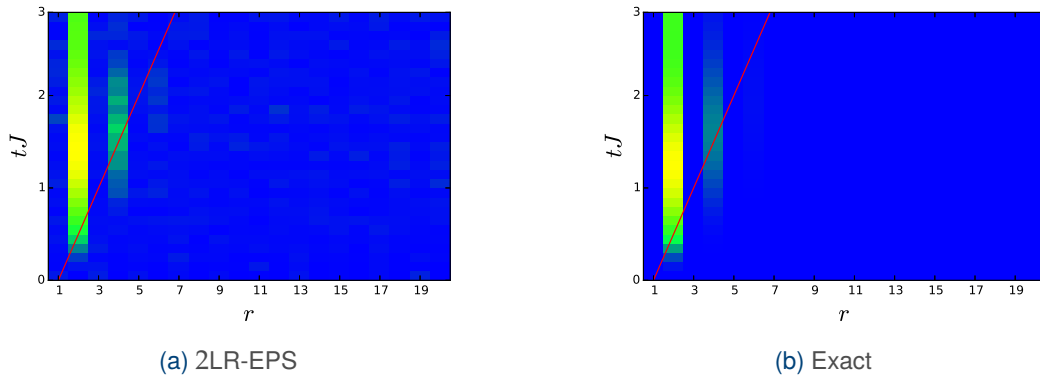


FIG. 4.10 Propagation des corrélations le long de la composante x entre deux sites séparés d'une distance r suite à un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX pour une chaîne de taille $N = 40$. On a représenté par la ligne pleine (rouge) le cône de lumière.

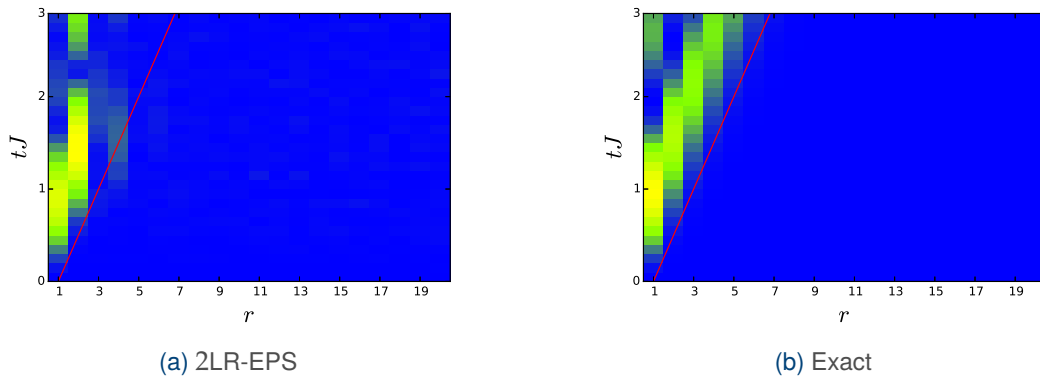


FIG. 4.11 Propagation des corrélations le long de la composante z de spin entre deux sites séparés d'une distance r suite à un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX pour une chaîne de taille $N = 40$. On a représenté par la ligne pleine (rouge) le cône de lumière.

4.3.4 Entropie d'intrication

Une quantité importante à reproduire pour connaître les limites de notre approche est l'entropie d'intrication. La figure 4.12 montre l'évolution temporelle de l'entropie de Renyi d'ordre 2 pour des sous-systèmes de taille variable. L'entropie augmente linéairement avec le temps comme on peut le voir dans le cas $\ell = \frac{N}{2}$, notre approche est alors capable de reproduire particulièrement bien l'évolution de l'entropie d'intrication au cours du temps jusqu'à une valeur $tJ \sim 3$ avant de s'établir vers une valeur constante.

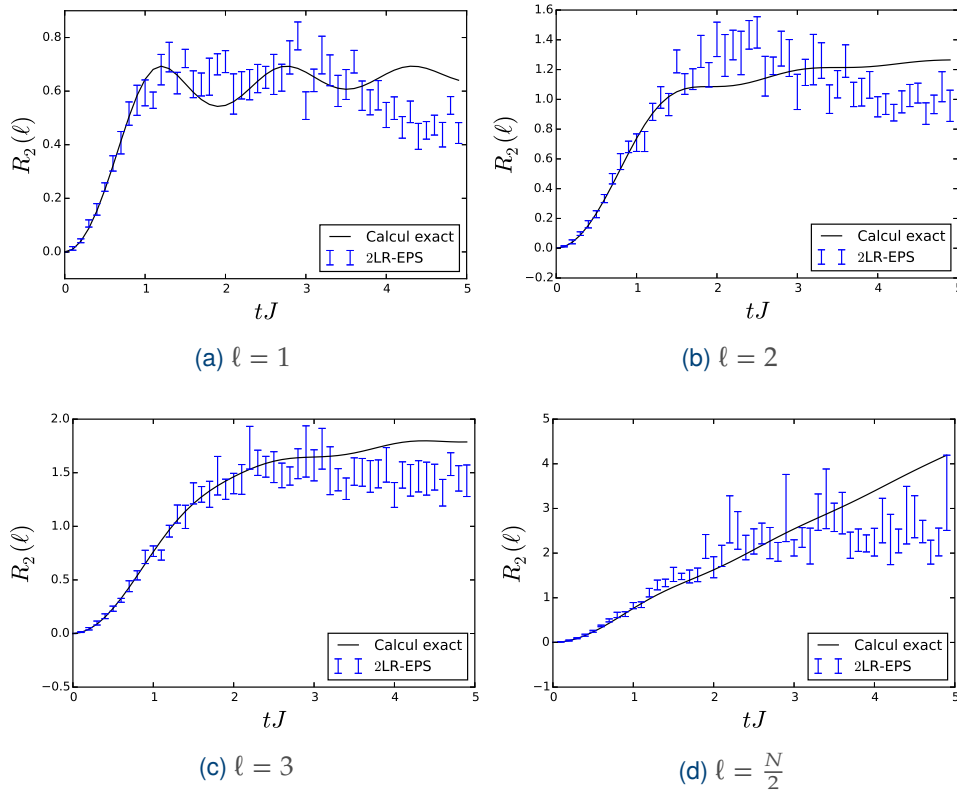


FIG. 4.12 Évolution de l'entropie d'intrication d'un sous-système de taille ℓ à partir d'un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX pour un système de taille $N = 40$. On compare le résultat obtenu par l'approche LR2 EPS et le résultat exact obtenu par mapping sur un système de fermions libres. Les barres d'erreur représentent deux écarts types sur l'algorithme Monte Carlo.

On peut plus globalement regarder l'augmentation de l'intrication au cours du temps sur la figure 4.13. On peut y voir l'augmentation puis la stagnation, vers $tJ \sim 3$, de l'entropie d'intrication reproduite par l'*Ansatz* EPS.

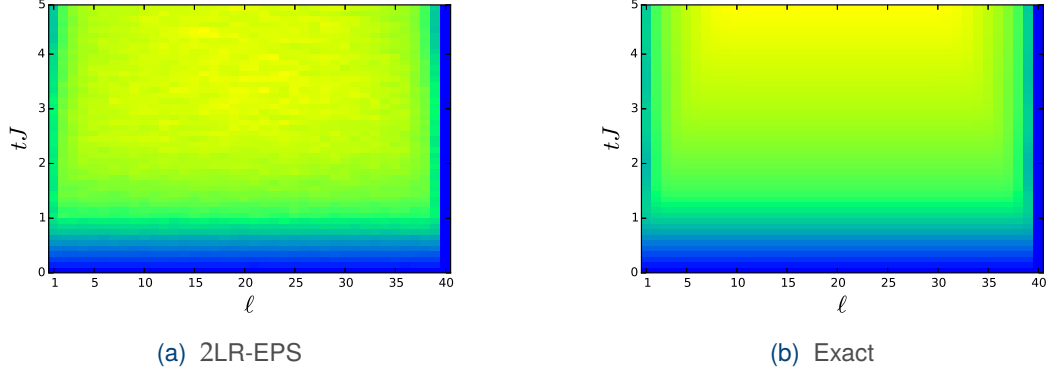


FIG. 4.13 Évolution de l'entropie d'intrication d'un sous-système de taille ℓ à partir d'un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX pour un système de taille $N = 40$

4.4 Variation du champ magnétique

Dans cette dernière section nous allons considérer un champ magnétique dans le Hamiltonien d'évolution ce qui permet de contrôler l'énergie injectée par le *quench* et l'intrication qui se développe dans le système aux temps longs. Nous allons ici comparer les résultats en se contentant d'analyser quelques quantités physiques remarquables pour éviter un catalogue de résultats. Plus de résultats sont à retrouver dans les annexes D, E et F.

Il est également important de noter que plus h est élevé plus l'aimantation alternée va osciller rapidement, il a alors été nécessaire de réduire le pas temporel pour pouvoir décrire correctement l'évolution du système.

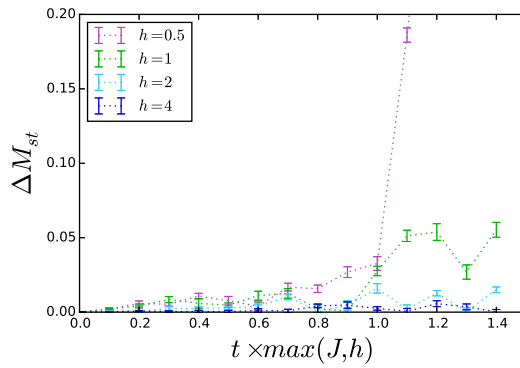


FIG. 4.14 Évolution de l'erreur relative sur l'aimantation alternée à partir de différents *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX et à un champ magnétique alterné h pour un système de taille $N = 20$. Les barres d'erreur représentent une déviation standard sur l'algorithme Monte Carlo.

Aimantation alternée Pour comparer les résultats, une quantité intéressante est l'aimantation alternée $M_{st} = \frac{1}{N} \sum_i (-1)^i S_i^z$. Cette quantité est centrale dans notre

étude, en effet nous avons couplé un champ magnétique alterné h au Hamiltonien de la chaîne XX, l'état initial étant un état de Néel est donc l'état fondamental dans le cas $h = \infty$. Ainsi, plus h est élevé plus l'état de Néel va être proche de l'état fondamental du système et plus la composante M_{st} va être importante dans la dynamique du système.

Nous avons donc tracé en figure 4.14 l'erreur relative sur l'aimantation alternée en fonction du champ magnétique h , les résultats trouvés indépendamment pour chaque champ magnétique sont représentés en annexe D. On retrouve bien le fait que plus le champ magnétique est élevé, mieux l'aimantation alternée M_{st} est reproduite. Ce qui est en effet le résultat auquel on s'attendait, du fait de l'entropie plus élevée pour des champs magnétiques plus faibles.

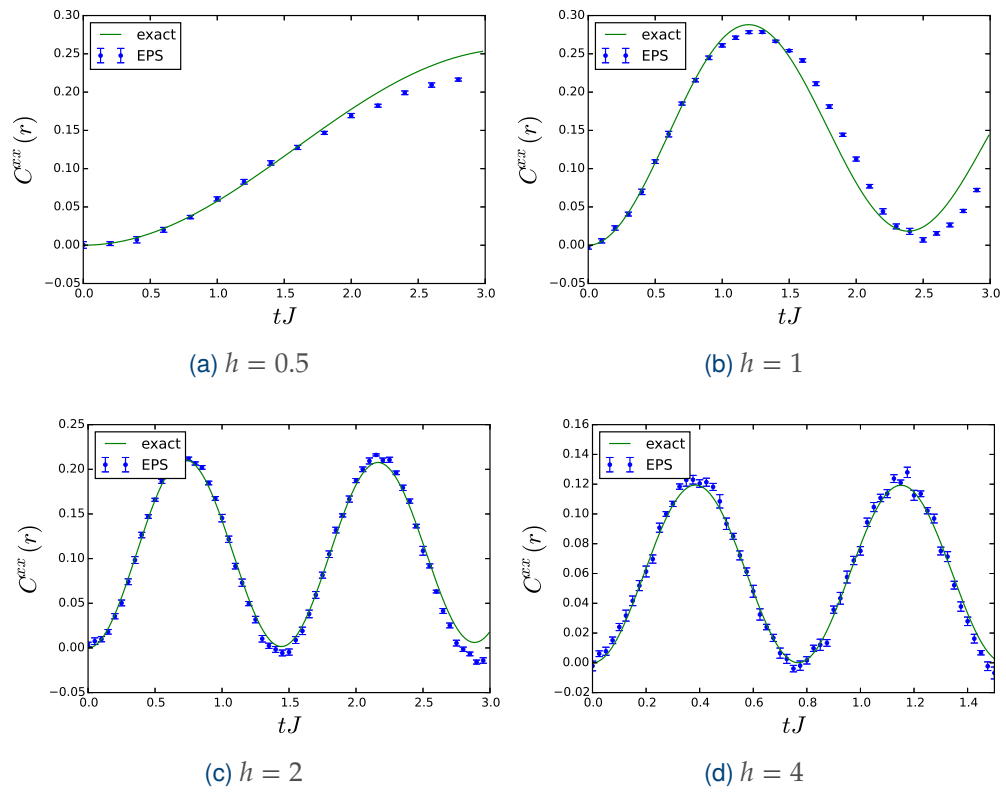


FIG. 4.15 Évolution temporelle des corrélations entre deux sites séparés d'une distance $r = 1$ le long de l'axe x suite à un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX couplé à un champ magnétique alterné h pour une chaîne de taille $N = 20$. On compare le résultat obtenu par l'approche 2LR-EPS et le résultat exact obtenu par mapping sur un système de fermions libres. Les barres d'erreur représentent une déviation standard sur l'algorithme Monte Carlo.

Fonctions de corrélations Il est plus complexe de considérer l'erreur relative sur les fonctions de corrélation, celles-ci étant assez faibles, l'erreur statistique commence à jouer un rôle important dans l'erreur relative entre les valeurs obtenues par minimisation variationnelle de l'*Ansatz* 2LR-EPS et le résultat exact. Nous allons donc présenter un graphe de corrélation des composantes x et y de spins, voir figure 4.15, se référer à

l'annexe E pour les corrélations à distances plus grandes et selon la composante z de spin.

Les graphes 4.15 montrent ainsi que plus le champ magnétique alterné h augmente, mieux les corrélations sont reproduites, et surtout meilleure est la reproduction de la fréquence des oscillations des corrélations, avec un résultat essentiellement exact dans la barre d'erreur pour $h > 1$.

Entropie d'intrication L'entropie d'intrication était bien reproduite aux temps courts dans le cas $h = 0$, on peut s'attendre à ce que cela soit toujours le cas pour h plus élevé. À titre d'exemple, on a tracé le graphe de l'entropie d'intrication d'un sous-système de taille $\ell = 1$ et $\ell = \frac{N}{2}$ dans le cas $h = 1$, voir figure 4.16, les graphes pour d'autres valeurs du champ magnétique h sont tracés dans l'annexe F.

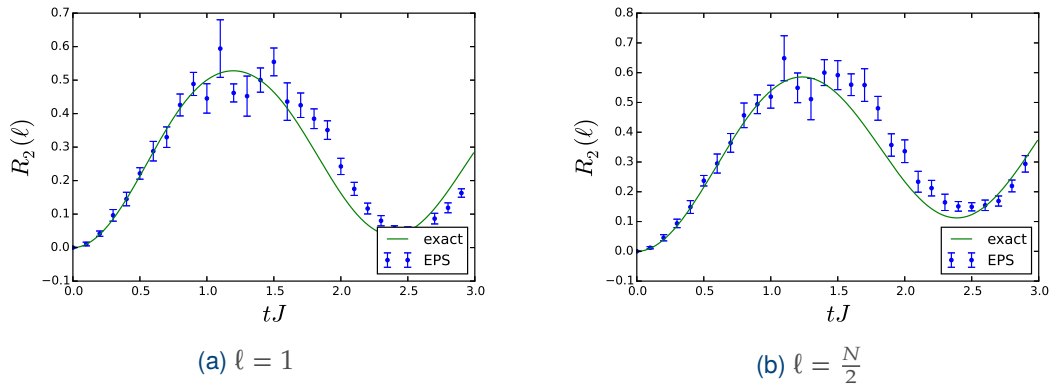


FIG. 4.16 Évolution de l'entropie d'intrication d'un sous-système de taille ℓ à partir d'un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX couplé à un champ magnétique alterné $h = 1$ pour un système de taille $N = 20$. On compare le résultat obtenu par l'approche 2LR-EPS et le résultat exact obtenu par mapping sur un système de fermions libres. Les barres d'erreur représentent une déviation standard sur l'algorithme Monte Carlo

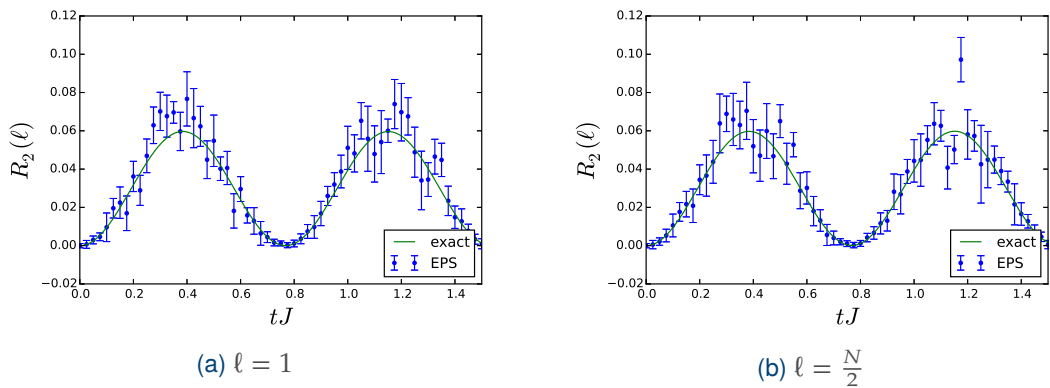


FIG. 4.17 Évolution de l'entropie d'intrication d'un sous-système de taille ℓ à partir d'un *quench* d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX couplé à un champ magnétique alterné $h = 4$ pour un système de taille $N = 20$. On compare le résultat obtenu par l'approche 2LR-EPS et le résultat exact obtenu par mapping sur un système de fermions libres. Les barres d'erreur représentent une déviation standard sur l'algorithme Monte Carlo

Ainsi, comme on le voit sur la figure 4.16, l'évolution de l'entropie d'intrication est reproduite exactement, dans la barre d'erreur, avant de dévier légèrement vers $tJ \sim 1.50$, tout en reproduisant l'allure de la courbe. De plus, comme on peut le voir sur la courbe 4.17, pour un champ magnétique plus élevé, l'entropie d'intrication est mieux reproduite.

Conclusion et perspectives

*Now this is not the end. It is not even the
beginning of the end. But it is, perhaps, the end
of the beginning.*

— **W.Churchill**

Ce n'est pas la fin. Ce n'est même pas le commencement de la
fin. Mais, c'est peut-être la fin du commencement.

Nous avons pu mettre en avant au cours de ce manuscrit deux difficultés majeures dans l'étude d'états fondamentaux de systèmes à N corps et de l'évolution temporelle de ces quantiques suite à un quench : la reproduction de la structure de signe et de l'intrication d'un état quantique.

Nous avons présenté, dans le chapitre 2, l'approche que nous avons développée pour réussir à reproduire ces propriétés. Celle-ci se base sur l'Ansatz des états aux plaquettes intriquées (EPS), sur un calcul des grandeurs physiques par échantillonnage Monte Carlo et une optimisation variationnelle élaborée à partir d'un principe variationnel. Nous avons ensuite appliqué notre approche à l'étude de l'état fondamental de la chaîne XX : cet état critique, présentant des corrélations décroissantes en loi de puissance et de l'intrication à longue portée, s'avère particulièrement difficile à reproduire. L'optimisation variationnelle sur l'Ansatz EPS à plaquettes à longue portée de taille 2 (2LR-EPS) permet cependant de reproduire avec une très bonne précision les propriétés physiques décrivant le système : l'énergie (avec une précision de 10^{-8}), les corrélations à deux sites (avec une précision de 10^{-3}) et l'intrication (avec une précision d'au moins 10^{-4}). Nous avons également pu voir que l'Ansatz 2LR-EPS est capable de reproduire des états quantiques fortement intriqués, ce qui est prometteur pour qu'il soit capable de reproduire des états quantique dont l'entropie d'intrication évolue en loi de volume.

Nous avons par la suite, dans le chapitre 3, confronté notre Ansatz à un test difficile : l'étude de l'état fondamental de la chaîne $J_1 - J_2$. Ce système est complexe à étudier car la frustration magnétique qu'il présente induit une structure de signe de l'état fondamental non trivial et fait apparaître le problème du signe dans le cas des approches Monte Carlo. Nous avons ainsi pu voir que l'optimisation variationnelle de notre Ansatz n'est pas soumise au problème du signe et parvient à reproduire avec une excellente

précision les corrélations et l'énergie dans le cas d'une frustration $\alpha < 0.5$. Dans la partie du diagramme de phase où la frustration est plus élevée, qui est connue pour être particulièrement complexe à étudier, l'énergie est bien reproduite, ainsi que le signe des corrélations, bien que non trivial. Ces résultats suggèrent que notre stratégie variationnelle, basée sur l'optimisation d'un état à coefficients complexes, parvient à reproduire des structures de signe non triviales qui s'approchent de celle de l'état exact. De plus, dans le cas de grands systèmes ($N = 80$), où le calcul exact n'est plus possible, notre approche permet de mettre en évidence les propriétés physiques du diagramme de phase tels l'exposant de Luttinger paramétrant la décroissance des corrélations dans la phase sans gap, l'incommensurabilité des corrélations et la dimérisation de l'état fondamental dans la phase gappée, ainsi que l'évolution du comportement de l'entropie d'intrication en fonction de la frustration.

Pour finir, dans le chapitre 4, nous avons commencé l'exploration des capacités de notre approche à reproduire l'évolution temporelle d'un état quantique suite à un quench. Nous avons discuté la capacité de notre Ansatz à reproduire la structure de signe d'un état de fermions libres s'exprimant ainsi sous la forme de déterminants de Slater. Nous avons ainsi pu mettre en évidence sa capacité et ses limites à reproduire la propagation des corrélations et analyser sa capacité à reproduire l'augmentation de l'intrication au sein du système.

Les résultats que nous avons obtenus suggèrent la capacité de notre Ansatz (et de la méthode variationnelle en général) à s'attaquer à des problèmes considérés comme particulièrement difficiles : les systèmes de spins magnétiquement frustrés. Dans la suite des pistes que nous avons étudiées jusqu'à maintenant, il serait pertinent d'utiliser notre approche pour s'intéresser à des liquides de spins en dimension 2 tels le réseau triangulaire anisotrope, le réseau carré $J_1 - J_2$ ou encore le réseau kagomé qui, de part la frustration magnétique présente dans ces systèmes, résistent aux approches Monte Carlo et présentent une intrication rendant le système difficile à étudier avec des approches variationnelles de type MPS. L'approche que nous avons développée est ainsi prometteuse pour améliorer notre compréhension de ces systèmes.

Enfin, nous aimerions poursuivre l'étude de la capacité de notre Ansatz à reproduire l'évolution temporelle d'un état quantique suite à un quench. Il nous semble important de mieux comprendre l'évolution de la reproduction de l'entropie en fonction de la taille du système et ses conséquences sur la capacité de notre approche à reproduire l'évolution des quantités décrivant le système. Une évolution intéressante de l'Ansatz afin de renforcer ses aptitudes à décrire la dynamique temporelle, serait de considérer des coefficients matriciels pour l'Ansatz, au lieu des coefficients scalaires que nous utilisons actuellement. On introduirait alors un paramètre variationnel, la dimension de ces matrices, qui permettrait d'augmenter l'efficacité de notre approche en augmentant seulement polynomialement son coût numérique ; et qui, à l'inverse de l'Ansatz MPS, aurait une entropie d'intrication moyenne des états de l'Ansatz qui puisse évoluer en loi

de volume avec la taille du système. De manière générale, il serait pertinent d'utiliser notre approche variationnelle pour s'attaquer à des problèmes d'évolution temporelle plus complexes, tels que la transition vers la localisation à N corps dans les systèmes fortement désordonnés ; l'évolution d'un système soumis à un forçage périodique ; ou encore la dynamique dissipative dans le cas d'un système couplé à un environnement. Dans tous ces problèmes, les Ansätze de type EPS et leurs généralisations possibles pourraient s'avérer d'une grande efficacité par leur habilité à reproduire l'évolution de l'intrication sans nécessité d'une augmentation exponentielle du nombre de variables avec la taille du système.

Bibliographie

- [1] URL : https://github.com/alexwie/ed_basics.
- [2] I AFFLECK. *Fields, Strings and Critical Phenomena*. E.Brezin et J.Zinn-Justin, 1989.
- [3] M. H. ANDERSON et al. "Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor". In : *Science* 269.5221 (1995), p. 198-201. ISSN : 0036-8075. DOI : [10.1126/science.269.5221.198](https://doi.org/10.1126/science.269.5221.198). eprint : <https://science.sciencemag.org/content/269/5221/198.full.pdf>. URL : <https://science.sciencemag.org/content/269/5221/198>.
- [4] P. W. ANDERSON. "The Resonating Valence Bond State in La₂CuO₄ and Superconductivity". In : *Science* 235.4793 (1987), p. 1196-1198. ISSN : 0036-8075. DOI : [10.1126/science.235.4793.1196](https://doi.org/10.1126/science.235.4793.1196). eprint : <http://science.sciencemag.org/content/235/4793/1196.full.pdf>. URL : <http://science.sciencemag.org/content/235/4793/1196>.
- [5] Alain ASPECT, Philippe GRANGIER et Gérard ROGER. "Experimental Tests of Realistic Local Theories via Bell's Theorem". In : *Phys. Rev. Lett.* 47 (7 août 1981), p. 460-463. DOI : [10.1103/PhysRevLett.47.460](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.47.460). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.47.460>.
- [6] S AL-ASSAM, RA WILLIAMS et CJ FOOT. "Ultracold atoms in an optical lattice with dynamically variable periodicity". In : *Physical Review A* 82.2 (2010), p. 021604.
- [7] Assa AUERBACH. *Interacting electrons and quantum magnetism*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [8] J. BARDEEN, L. N. COOPER et J. R. SCHRIEFFER. "Theory of Superconductivity". In : *Phys. Rev.* 108 (5 déc. 1957), p. 1175-1204. DOI : [10.1103/PhysRev.108.1175](https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1175). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.108.1175>.
- [9] J. BARDEEN, L. N. COOPER et J. R. SCHRIEFFER. "Theory of Superconductivity". In : *Phys. Rev.* 108 (5 déc. 1957), p. 1175-1204. DOI : [10.1103/PhysRev.108.1175](https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1175). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.108.1175>.

- [10] J. S. BELL. “On the Einstein Podolsky Rosen paradox”. In : *Physics Physique Fizika* 1 (3 nov. 1964), p. 195-200. DOI : [10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.1.195](https://doi.org/10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.1.195). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.1.195>.
- [11] Charles H. BENNETT et al. “Concentrating partial entanglement by local operations”. In : *Phys. Rev. A* 53 (4 avr. 1996), p. 2046-2052. DOI : [10.1103/PhysRevA.53.2046](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.53.2046). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.53.2046>.
- [12] Felix BLOCH. “Zur theorie des ferromagnetismus”. In : *Zeitschrift für Physik* 61.3-4 (1930), p. 206-219.
- [13] Immanuel BLOCH, Jean DALIBARD et Wilhelm ZWGERGER. “Many-body physics with ultracold gases”. In : *Reviews of modern physics* 80.3 (2008), p. 885.
- [14] Nikolay Nikolaevich BOGOLYUBOV. “On the theory of superfluidity”. In : *Izv. Akad. Nauk Ser. Fiz.* 11 (1947), p. 23-32.
- [15] D BOHM et Yakir AHARONOV. “Discussion of Experimental Proof for the Paradox of Einstein, Rosen, and Podolsky”. In : *Physical Review - PHYS REV X* 108 (nov. 1957), p. 1070-1076. DOI : [10.1103/PhysRev.108.1070](https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1070).
- [16] Max BORN. “Zur Quantenmechanik der Stoßvorgänge”. In : *Zeitschrift für Physik* 37.12 (déc. 1926), p. 863-867. ISSN : 0044-3328. DOI : [10.1007/BF01397477](https://doi.org/10.1007/BF01397477). URL : <https://doi.org/10.1007/BF01397477>.
- [17] R BURSILL et al. “Numerical and approximate analytical results for the frustrated spin- 1/2 quantum spin chain”. In : *Journal of Physics : Condensed Matter* 7.45 (nov. 1995), p. 8605-8618. DOI : [10.1088/0953-8984/7/45/016](https://doi.org/10.1088/0953-8984/7/45/016). URL : <https://doi.org/10.1088/0953-8984/7/45/016>.
- [18] Pasquale CALABRESE et John CARDY. “Entanglement entropy and quantum field theory”. In : *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment* 2004.06 (juin 2004), P06002. DOI : [10.1088/1742-5468/2004/06/p06002](https://doi.org/10.1088/1742-5468/2004/06/p06002). URL : <https://doi.org/10.1088/1742-5468/2004/06/p06002>.
- [19] Pasquale CALABRESE et John CARDY. “Entanglement entropy and quantum field theory”. In : *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment* 2004.06 (2004), P06002.
- [20] Giuseppe CARLEO et Matthias TROYER. “Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks”. In : *Science* 355.6325 (2017), p. 602-606. ISSN : 0036-8075. DOI : [10.1126/science.aag2302](https://doi.org/10.1126/science.aag2302). eprint : <http://science.sciencemag.org/content/355/6325/602.full.pdf>. URL : <http://science.sciencemag.org/content/355/6325/602>.
- [21] MA CAZALILLA. “Bosonizing one-dimensional cold atomic gases”. In : *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* 37.7 (2004), S1.

- [22] Shailesh CHANDRASEKHARAN et Uwe-Jens WIESE. “Meron-Cluster Solution of Fermion Sign Problems”. In : *Phys. Rev. Lett.* 83 (16 oct. 1999), p. 3116-3119. DOI : [10.1103/PhysRevLett.83.3116](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.83.3116). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.83.3116>.
- [23] Hitesh J CHANGLANI et al. “Approximating strongly correlated wave functions with correlator product states”. In : *Physical Review B* 80.24 (2009), p. 245116.
- [24] Piers COLEMAN. *Introduction to many-body physics*. Cambridge University Press, 2015.
- [25] Luca D’ALESSIO et al. “From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics”. In : *Advances in Physics* 65.3 (2016), p. 239-362. DOI : [10.1080/00018732.2016.1198134](https://doi.org/10.1080/00018732.2016.1198134). eprint : <https://doi.org/10.1080/00018732.2016.1198134>. URL : <https://doi.org/10.1080/00018732.2016.1198134>.
- [26] Andreas DESCHNER et Erik S SØRENSEN. “Incommensurability effects in odd length J_1 - J_2 quantum spin chains : On-site magnetization and entanglement”. In : *Physical Review B* 87.9 (2013), p. 094415.
- [27] Andreas DESCHNER et Erik S. SØRENSEN. “Incommensurability effects in odd length J_1 - J_2 quantum spin chains : On-site magnetization and entanglement”. In : *Phys. Rev. B* 87 (9 mar. 2013), p. 094415. DOI : [10.1103/PhysRevB.87.094415](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.094415). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.094415>.
- [28] Wenxin DING et Kun YANG. “Entanglement entropy and mutual information in Bose-Einstein condensates”. In : *Phys. Rev. A* 80 (1 juil. 2009), p. 012329. DOI : [10.1103/PhysRevA.80.012329](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.80.012329). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.80.012329>.
- [29] Arnold DRESDEN. “The fourteenth western meeting of the American Mathematical Society”. In : *Bull. Amer. Math. Soc.* 26.9 (juin 1920), p. 385-396. URL : <https://projecteuclid.org:443/euclid.bams/1183425340>.
- [30] J DUKELSKY et al. “Equivalence of the variational matrix product method and the density matrix renormalization group applied to spin chains”. In : *Europhysics Letters (EPL)* 43.4 (août 1998), p. 457-462. DOI : [10.1209/epl/i1998-00381-x](https://doi.org/10.1209/epl/i1998-00381-x). URL : <https://doi.org/10.1209/epl/i1998-00381-x>.
- [31] Tanja ĐURIĆ et al. “Pfaffian-like ground states for bosonic atoms and molecules in one-dimensional optical lattices”. In : *Physical Review B* 93.8 (2016), p. 085143.
- [32] Sebastian EGGERT. “Numerical evidence for multiplicative logarithmic corrections from marginal operators”. In : *Physical Review B* 54.14 (1996), R9612.

- [33] A EINSTEIN. “Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. Zweite Abhandlung”. In : t. 23. Août 2006, p. 245-257. ISBN : 9783527608959. DOI : [10.1002/3527608958.ch28](https://doi.org/10.1002/3527608958.ch28).
- [34] A. EINSTEIN. “Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt”. In : *Annalen der Physik* 322 (1905), p. 132-148. DOI : [10.1002/andp.19053220607](https://doi.org/10.1002/andp.19053220607).
- [35] A. EINSTEIN, B. PODOLSKY et N. ROSEN. “Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete ?” In : *Phys. Rev.* 47 (10 mai 1935), p. 777-780. DOI : [10.1103/PhysRev.47.777](https://doi.org/10.1103/PhysRev.47.777). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.47.777>.
- [36] J. EISERT, M. CRAMER et M. B. PLENIO. “Colloquium : Area laws for the entanglement entropy”. In : *Rev. Mod. Phys.* 82 (1 fév. 2010), p. 277-306. DOI : [10.1103/RevModPhys.82.277](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.277). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.277>.
- [37] S. Sorella F. BECCA. *Quantum Monte Carlo Approches for Correlated Systems*. Cambridge University Press, 2017.
- [38] Maurizio FAGOTTI et Fabian H. L. ESSLER. “Reduced density matrix after a quantum quench”. In : *Phys. Rev. B* 87 (24 juin 2013), p. 245107. DOI : [10.1103/PhysRevB.87.245107](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.245107). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.245107>.
- [39] P. FAZEKAS et P. W. ANDERSON. “On the ground state properties of the anisotropic triangular antiferromagnet”. In : *The Philosophical Magazine : A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* 30.2 (1974), p. 423-440. DOI : [10.1080/14786439808206568](https://doi.org/10.1080/14786439808206568). eprint : <https://doi.org/10.1080/14786439808206568>. URL : <https://doi.org/10.1080/14786439808206568>.
- [40] Francesco FERRARI et al. “Dynamical structure factor of the $J_1 - J_2$ Heisenberg model in one dimension : The variational Monte Carlo approach”. In : *Phys. Rev. B* 97 (23 juin 2018), p. 235103. DOI : [10.1103/PhysRevB.97.235103](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.235103). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.235103>.
- [41] R. FEYNMAN. *Statistical Mechanics : A set of lectures*. 1972.
- [42] Richard P FEYNMAN. “Simulating physics with computers”. In : *International journal of theoretical physics* 21.6 (1982), p. 467-488.
- [43] Matthew P. A. FISHER et al. “Boson localization and the superfluid-insulator transition”. In : *Phys. Rev. B* 40 (1 juil. 1989), p. 546-570. DOI : [10.1103/PhysRevB.40.546](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.546). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.40.546>.
- [44] Feliks Ruvimovič GANTMACHER et Joel Lee BRENNER. *Applications of the Theory of Matrices*. Courier Corporation, 2005.

- [45] G.A. GEHRING, J. BURSILL et T. XIANG. In : *Acta Physica Polonica A* 91 (1997), p. 105-119.
- [46] Thierry GIAMARCHI. *Quantum physics in one dimension*. T. 121. Clarendon press, 2003.
- [47] Josiah Willard GIBBS. *Elementary principles in statistical mechanics : developed with special reference to the rational foundation of thermodynamics*. Dover Publications, 1902.
- [48] E. P. GROSS. "Structure of a quantized vortex in boson systems". In : *Il Nuovo Cimento (1955-1965)* 20.3 (mai 1961), p. 454-477. DOI : [10.1007/BF02731494](https://doi.org/10.1007/BF02731494). URL : <https://doi.org/10.1007/BF02731494>.
- [49] Tarun GROVER et Matthew P A FISHER. "Quantum disentangled liquids". In : *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment* 2014.10 (oct. 2014), P10010. DOI : [10.1088/1742-5468/2014/10/p10010](https://doi.org/10.1088/1742-5468/2014/10/p10010). URL : <https://doi.org/10.1088/1742-5468/2014/10/p10010>.
- [50] Tarun GROVER et Matthew P. A. FISHER. "Entanglement and the sign structure of quantum states". In : *Phys. Rev. A* 92 (4 oct. 2015), p. 042308. DOI : [10.1103/PhysRevA.92.042308](https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.92.042308). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.92.042308>.
- [51] Karen A. HALLBERG. "Density-matrix algorithm for the calculation of dynamical properties of low-dimensional systems". In : *Phys. Rev. B* 52 (14 oct. 1995), R9827-R9830. DOI : [10.1103/PhysRevB.52.R9827](https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.52.R9827). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.52.R9827>.
- [52] Matthew B HASTINGS et al. "Measuring Renyi entanglement entropy in quantum Monte Carlo simulations". In : *Physical review letters* 104.15 (2010), p. 157201.
- [53] W. HEISENBERG. "Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen." In : *Zeitschrift für Physik* 33.1 (déc. 1925), p. 879-893. ISSN : 0044-3328. DOI : [10.1007/BF01328377](https://doi.org/10.1007/BF01328377). URL : <https://doi.org/10.1007/BF01328377>.
- [54] W. HEITLER et F. LONDON. "Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik". In : *Zeitschrift für Physik* 44 (6-7 1927), p. 455-472. DOI : [10.1007/BF01397394](https://doi.org/10.1007/BF01397394). URL : <https://doi.org/10.1007/BF01397394>.
- [55] L. PAULING. *The Nature of the Chemical Bond*. Cornell University Press, 1960.
- [56] Claudine LACROIX, Philippe MENDELS et Frédéric MILA. *Introduction to frustrated magnetism : materials, experiments, theory*. T. 164. Springer Science & Business Media, 2011.
- [57] C. LANCZOS. In : *J. Res. Nat. Bur. Stand.* 45 (1950), p. 255.

- [58] Lev Davidovich LANDAU. *Collected papers of LD Landau*. Pergamon, 1965.
- [59] Arthur LAVARÉLO et Guillaume ROUX. “Spinon excitation spectra of the J1-J2 chain from analytical calculations in the dimer basis and exact diagonalization”. In : *The European Physical Journal B* 87.10 (oct. 2014), p. 229. ISSN : 1434-6036. DOI : [10.1140/epjb/e2014-50472-x](https://doi.org/10.1140/epjb/e2014-50472-x). URL : <https://doi.org/10.1140/epjb/e2014-50472-x>.
- [60] E. LEVIATAN et al. “Quantum thermalization dynamics with Matrix-Product States”. In : (2017). URL : <https://arxiv.org/abs/1702.08894v2>.
- [61] Chanchal K MAJUMDAR et Dipan K GHOSH. “On Next-Nearest-Neighbor Interaction in Linear Chain. I”. In : *Journal of Mathematical Physics* 10.8 (1969), p. 1388-1398.
- [62] Marshall W.W. MARSHALL et F. R. S. PEIERLS RUDOLF ERNST R. E. PEIERLS. “Antiferromagnetism”. In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 232 (1955). URL : <http://doi.org/10.1098/rspa.1955.0200>.
- [63] Daniel Charles MATTIS. *The many-body problem : an encyclopedia of exactly solved models in one dimension*. World Scientific, 1994.
- [64] Nicholas METROPOLIS et S. ULAM. “The Monte Carlo Method”. In : *Journal of the American Statistical Association* 44.247 (1949). PMID : 18139350, p. 335-341. DOI : [10.1080/01621459.1949.10483310](https://doi.org/10.1080/01621459.1949.10483310). eprint : <https://www.tandfonline.com/doi/pdf/10.1080/01621459.1949.10483310>. URL : <https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/01621459.1949.10483310>.
- [65] Fabio MEZZACAPO. “Ground-state phase diagram of the quantum J 1- J 2 model on the square lattice”. In : *Physical Review B* 86.4 (2012), p. 045115.
- [66] Fabio MEZZACAPO et Massimo BONINSEGNI. “Ground-state phase diagram of the quantum J 1- J 2 model on the honeycomb lattice”. In : *Physical Review B* 85.6 (2012), p. 060402.
- [67] Fabio MEZZACAPO et J Ignacio CIRAC. “Ground-state properties of the spin-antiferromagnetic Heisenberg model on the triangular lattice : a variational study based on entangled-plaquette states”. In : *New Journal of Physics* 12.10 (2010), p. 103039.
- [68] F MEZZACAPO et al. “Ground-state properties of quantum many-body systems : entangled-plaquette states and variational Monte Carlo”. In : *New Journal of Physics* 11.8 (août 2009), p. 083026. DOI : [10.1088/1367-2630/11/8/083026](https://doi.org/10.1088/1367-2630/11/8/083026). URL : <https://doi.org/10.1088/1367-2630/11/8/083026>.

- [69] Rahul NANDKISHORE et David A. HUSE. “Many-Body Localization and Thermalization in Quantum Statistical Mechanics”. In : *Annual Review of Condensed Matter Physics* 6.1 (2015), p. 15-38. DOI : [10.1146/annurev-conmatphys-031214-014726](https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031214-014726).
- [70] M.E.J. NEWMAN et G.T. BARKEMA. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, 1999.
- [71] R. ORÚS. “A practical introduction to tensor networks : Matrix product states and projected entangled pair states”. In : *Annals of Physics* 349 (2014), p. 117-158. DOI : [10.1016/j.aop.2014.06.013](https://doi.org/10.1016/j.aop.2014.06.013). URL : <https://doi.org/10.1016/j.aop.2014.06.013>.
- [72] Stellan ÖSTLUND et Stefan ROMMER. “Thermodynamic Limit of Density Matrix Renormalization”. In : *Phys. Rev. Lett.* 75 (19 nov. 1995), p. 3537-3540. DOI : [10.1103/PhysRevLett.75.3537](https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.3537). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.3537>.
- [73] P.KRAMER et M. SARACENO. *Geometry of the Time-Dependent Variational Principle in Quantum Mechanics*. Springer, 1981.
- [74] Don N. PAGE. “Average entropy of a subsystem”. In : *Phys. Rev. Lett.* 71 (9 août 1993), p. 1291-1294. DOI : [10.1103/PhysRevLett.71.1291](https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.71.1291). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.71.1291>.
- [75] Tao PANG. “Spin Jastrow state”. In : *Phys. Rev. B* 43 (4 fév. 1991), p. 3362-3365. DOI : [10.1103/PhysRevB.43.3362](https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.43.3362). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.43.3362>.
- [76] R. PENROSE. “A generalized inverse for matrices”. In : *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 51.3 (1955), p. 406-413. DOI : [10.1017/S0305004100030401](https://doi.org/10.1017/S0305004100030401).
- [77] Oskar PERRON. “Zur Theorie der Matrices”. In : *Mathematische Annalen* 64.2 (juin 1907), p. 248-263. ISSN : 1432-1807. DOI : [10.1007/BF01449896](https://doi.org/10.1007/BF01449896). URL : <https://doi.org/10.1007/BF01449896>.
- [78] Ingo PESCHEL. “On the reduced density matrix for a chain of free electrons”. In : *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment* 2004.06 (juin 2004), P06004. DOI : [10.1088/1742-5468/2004/06/p06004](https://doi.org/10.1088/1742-5468/2004/06/p06004). URL : <https://doi.org/10.1088/1742-5468/2004/06/p06004>.
- [79] Ingo PESCHEL. “Special Review : Entanglement in Solvable Many-Particle Models”. In : *Brazilian Journal of Physics* 42.3 (août 2012), p. 267-291. DOI : [10.1007/s13538-012-0074-1](https://doi.org/10.1007/s13538-012-0074-1).

- [80] N. Bohr Dr. PHIL. "I. On the constitution of atoms and molecules". In : *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 26.151 (1913), p. 1-25. DOI : [10.1080/14786441308634955](https://doi.org/10.1080/14786441308634955). eprint : <https://doi.org/10.1080/14786441308634955>. URL : <https://doi.org/10.1080/14786441308634955>.
- [81] LP PITAEVSKII. "Vortex lines in an imperfect Bose gas". In : *Sov. Phys. JETP* 13.2 (1961), p. 451-454.
- [82] S. POPESCU, A.J. SHORT et A. WINTER. "Entanglement and the foundations of statistical mechanics". In : *Nat. Phys.* 2 (2006), p. 754-758. DOI : [10.1038/nphys444](https://doi.org/10.1038/nphys444).
- [83] P. PRELOVŠEK et J. BONČA. "Ground State and Finite Temperature Lanczos Methods". In : *Strongly Correlated Systems Springer Series in Solid-State Sciences* 176 (2013), p. 1-30. DOI : [10.1007/978-3-642-35106-8](https://doi.org/10.1007/978-3-642-35106-8). URL : <https://arxiv.org/abs/1111.5931>.
- [84] Marcos RIGOL et Alejandro MURAMATSU. "Universal properties of hard-core bosons confined on one-dimensional lattices". In : *Physical Review A* 70.3 (2004), p. 031603.
- [85] Marcos RIGOL et al. "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". In : *Phys. Rev. Lett.* 98 (5 fév. 2007), p. 050405. DOI : [10.1103/PhysRevLett.98.050405](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.050405). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.050405>.
- [86] A. W. SANDVIK. In : *AIP Conf.Proc.* 135 (2010), p. 1297. DOI : [10.1063/1.3518900](https://doi.org/10.1063/1.3518900).
- [87] U. SCHOLLWÖCK. "The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states". In : *Ann. Phys.* 326 (1 jan. 2011), p. 96-192. DOI : [10.1016/j.aop.2010.09.012](https://doi.org/10.1016/j.aop.2010.09.012).
- [88] P. SINDZINGRE, P. LECHÉMINANT et C. LHUILLIER. "Investigation of different classes of variational functions for the triangular and kagome' spin-1/2 Heisenberg antiferromagnets". In : *Phys. Rev. B* 50 (5 août 1994), p. 3108-3113. DOI : [10.1103/PhysRevB.50.3108](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.3108). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.3108>.
- [89] Jesko SIRKER et Andreas KLÜMPER. "Real-time dynamics at finite temperature by the density-matrix renormalization group : A path-integral approach". In : *Phys. Rev. B* 71 (24 juin 2005), p. 241101. DOI : [10.1103/PhysRevB.71.241101](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.241101). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.241101>.

- [90] J. C. SLATER. “The Theory of Complex Spectra”. In : *Phys. Rev.* 34 (10 nov. 1929), p. 1293-1322. DOI : [10.1103/PhysRev.34.1293](https://doi.org/10.1103/PhysRev.34.1293). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.34.1293>.
- [91] A. SOKAL. “Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics : Foundations and New Algorithms”. In : *Functional Integration : Basics and Applications*. Sous la dir. de Cecile DEWITT-MORETTE, Pierre CARTIER et Antoine FOLACCI. Boston, MA : Springer US, 1997, p. 131-192. DOI : [10.1007/978-1-4899-0319-8_6](https://doi.org/10.1007/978-1-4899-0319-8_6). URL : https://doi.org/10.1007/978-1-4899-0319-8_6.
- [92] E.M. STOUDENMIRE et Steven R. WHITE. “Studying Two-Dimensional Systems with the Density Matrix Renormalization Group”. In : *Annual Review of Condensed Matter Physics* 3.1 (2012), p. 111-128. DOI : [10.1146/annurev-conmatphys-020911-125018](https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-020911-125018).
- [93] Bill SUTHERLAND. *Beautiful models : 70 years of exactly solved quantum many-body problems*. World Scientific Publishing Company, 2004.
- [94] Bill SUTHERLAND. “Exact Results for a Quantum Many-Body Problem in One Dimension”. In : *Phys. Rev. A* 4 (5 nov. 1971), p. 2019-2021. DOI : [10.1103/PhysRevA.4.2019](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.4.2019). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.4.2019>.
- [95] M. TAKAHASHI. *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models*. Cambridge University Press, 1999.
- [96] Jérôme THIBAUT, Tommaso ROSCILDE et Fabio MEZZACAPO. “Long-Range Entangled-Plaquette States for Critical and Frustrated Quantum Systems on a Lattice”. In : *arXiv e-prints*, arXiv :1904.11406 (avr. 2019), arXiv :1904.11406. arXiv : [1904.11406 \[cond-mat.str-el\]](https://arxiv.org/abs/1904.11406).
- [97] F. VERSTRAETE, V. MURG et J.I. CIRAC. “Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems”. In : *Advances in Physics* 57.2 (2008), p. 143-224. DOI : [10.1080/14789940801912366](https://doi.org/10.1080/14789940801912366). eprint : <https://doi.org/10.1080/14789940801912366>. URL : <https://doi.org/10.1080/14789940801912366>.
- [98] G. VIDAL et al. “Entanglement in Quantum Critical Phenomena”. In : *Phys. Rev. Lett.* 90 (22 juin 2003), p. 227902. DOI : [10.1103/PhysRevLett.90.227902](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.227902). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.227902>.
- [99] L. VIDMAR et al. In : *PRL* (2017), p. 119. DOI : [10.1103/PhysRevLett.119.020601](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.020601).
- [100] Steven R. WHITE. “Density matrix formulation for quantum renormalization groups”. In : *Phys. Rev. Lett.* 69 (19 nov. 1992), p. 2863-2866. DOI : [10.1103/PhysRevLett.69.2863](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.69.2863). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.69.2863>.

- [101] Steven R. WHITE. “Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups”. In : *Phys. Rev. B* 48 (14 oct. 1993), p. 10345-10356. DOI : [10.1103/PhysRevB.48.10345](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.48.10345). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.10345>.
- [102] Steven R. WHITE et Ian AFFLECK. “Dimerization and incommensurate spiral spin correlations in the zigzag spin chain : Analogies to the Kondo lattice”. In : *Phys. Rev. B* 54 (14 oct. 1996), p. 9862-9869. DOI : [10.1103/PhysRevB.54.9862](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.9862). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.54.9862>.
- [103] Steven R. WHITE et Adrian E. FEIGUIN. “Real-Time Evolution Using the Density Matrix Renormalization Group”. In : *Phys. Rev. Lett.* 93 (7 août 2004), p. 076401. DOI : [10.1103/PhysRevLett.93.076401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.076401). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.076401>.
- [104] Chen ZENG et J. B. PARKINSON. “Spatial periodicity of the spin-1/2 Heisenberg antiferromagnetic chain with competing interactions”. In : *Phys. Rev. B* 51 (17 mai 1995), p. 11609-11615. DOI : [10.1103/PhysRevB.51.11609](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.51.11609). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.51.11609>.

Calcul de l'erreur

Nous allons nous intéresser ici au calcul de l'erreur dans l'algorithme Monte Carlo [70][91]. Le calcul de l'erreur est au centre de l'algorithme, car c'est lui qui conditionne les arrêts des différentes boucles de l'algorithme. En effet, le calcul de l'énergie et du gradient par méthode Monte Carlo à chaque étape de l'algorithme du gradient s'arrête lorsque l'erreur sur le gradient passe en dessous d'un certain seuil ou s'itère plus d'un nombre fixé de fois. L'algorithme du gradient quant à lui s'arrête lorsque l'erreur sur le gradient devient supérieure à la valeur de la norme du gradient, nous considérons alors que nous avons atteint le minimum recherché.

De plus à chaque pas de l'algorithme du gradient, afin de trouver la meilleure taille du pas, nous testons plusieurs pas pour lesquels nous calculons l'énergie de l'état obtenu et nous sélectionnons le plus grand pas satisfaisant la linéarisation de l'énergie $E_{n+1} - E_n - \rho \sum_p \left(\frac{\partial \langle E_n \rangle}{\partial C_p(\partial_p)} \right)^2 = 0$ à l'erreur sur cette quantité près en supposant que l'erreur sur E_{n+1} est proche de celle sur E_n , avec E_n l'énergie calculée à l'étape n .

Le calcul de l'erreur est donc central dans l'algorithme de minimisation. Puisque les valeurs calculées à chaque pas Monte Carlo ne sont pas totalement décorrélées, on ne peut pas se contenter de calculer la variance de l'estimateur pour en déduire l'erreur. En réalité, les valeurs de l'estimateur, que nous allons appeler A , sont corrélées sur une échelle de pas caractéristique τ_A appelée temps d'autocorrélation. Une valeur de A est alors corrélée aux τ_A valeurs précédentes et aux τ_A valeurs suivantes, ainsi pour N_{MC} pas Monte Carlo au total, on obtient finalement $\frac{N_{MC}}{2\tau_A}$ variables décorrélées.

Pour calculer le temps d'autocorrélation, nous avons utilisé une méthode par blocs. Nous avons fixé une taille N_b pour les blocs assez grand pour pouvoir supposer $N_b \gg \tau_A$, dans notre algorithme nous avons fixé $\frac{N_{MC}}{N_b} = 10$ donc N_b de quelques centaines de pas, τ_A étant de l'ordre de quelques pas, on a bien $N_b \gg \tau_A$. On introduit alors des variables de blocs \bar{A}_k qui sont la moyenne de l'estimateur A sur le k^e bloc,

$$\bar{A}_k = \frac{1}{N_b} \sum_{i=(k-1)N_b+1}^{kN_b} A_i \quad (\text{A.1})$$

avec A_i la valeur de l'estimateur A au i^e pas Monte Carlo.

Si les A_i étaient décorrélés, pour σ_A^2 la variance de A et $\bar{\sigma}_A^2$ la variance de \bar{A} on aurait $\bar{\sigma}_A^2 = \frac{\sigma_A^2}{N_b}$. Cependant, dans un bloc, il n'y a que $\frac{N_b}{2\tau_A}$ variables décorrélées, on a par extrapolation $\bar{\sigma}_A^2 = \frac{\sigma_A^2}{\frac{N_b}{2\tau_A}}$. D'où

$$\tau_A = \frac{N_b}{2} \frac{\bar{\sigma}_A^2}{\sigma_A^2}. \quad (\text{A.2})$$

On peut alors calculer l'erreur ΔA faite sur le calcul de la moyenne de l'estimateur $\langle A \rangle$. On aurait $\Delta A = \sqrt{\frac{\sigma_A^2}{N_{MC}}}$ si les A_i étaient décorrélés, mais seulement $\frac{N_{MC}}{2\tau_A}$ variables étant décorrélées, on obtient

$$\Delta A = \sqrt{2\tau_A \frac{\sigma_A^2}{N_{MC}}}. \quad (\text{A.3})$$

Calcul de la fonction de corrélation de la chaîne XX

Nous allons ici calculer la fonction de corrélation que nous avons comparée aux résultats trouvés numériquement par l'Ansatz EPS. Ces calculs théoriques sont basés sur [84]. Nous allons supposer dans ces calculs que le nombre de particules $\frac{N}{2}$ est impair. Considérons donc un Hamiltonien d'une chaîne de fermions à conditions au bord périodiques :

$$H = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2} & 0 & \dots & 0 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \ddots & \ddots & \ddots & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 0 & \dots & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

En diagonalisant ce Hamiltonien, on obtient les valeurs propres et vecteurs propres :

$$H|\psi^{(m)}\rangle = E_m|\psi^{(m)}\rangle, \text{ avec } E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_N, \quad (\text{B.1})$$

qui sont les ondes planes avec relation de dispersion $E_k = -J \cos\left(2\pi \frac{\tau(k)}{N}\right)$ avec τ une permutation de $\llbracket 0, N-1 \rrbracket$.

$$\text{Posons } N_{\uparrow} = \frac{N}{2}, P = \begin{pmatrix} \psi_1^{(1)} & \dots & \psi_1^{(N_{\uparrow})} \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_N^{(1)} & \dots & \psi_N^{(N_{\uparrow})} \end{pmatrix} \text{ et } f_m^{\dagger} = \sum_{k=1}^N P_{km} a_k^{\dagger}.$$

Alors l'état fondamental $|\psi_0\rangle$ se réécrit

$$|\psi_0\rangle = f_n^{\dagger} \dots f_1^{\dagger} |0\rangle \quad (\text{B.2})$$

$$= \prod_{m=1}^{N_{\uparrow}} \sum_{k=1}^N P_{km} a_k^{\dagger} |0\rangle. \quad (\text{B.3})$$

On peut alors considérer la fonction de corrélation entre deux sites distincts i et j

$$\langle S_j^+ S_i^- \rangle = \langle S_i^- S_j^+ \rangle \quad (\text{B.4})$$

$$= \langle \psi_0 | e^{i\pi \sum_{k<i} a_k^\dagger a_k} a_i a_j^\dagger e^{i\pi \sum_{k<j} a_k^\dagger a_k} | \psi_0 \rangle. \quad (\text{B.5})$$

On a

$$e^{i\pi \sum_{k<j} a_k^\dagger a_k} | \psi_0 \rangle = \prod_{m=1}^{N_\uparrow} \sum_{l=1}^N P_{lm}^{(j)} a_l^\dagger | 0 \rangle, \text{ avec } P^{(j)} = \begin{pmatrix} -\psi_1^{(1)} & \dots & -\psi_1^{(N_\uparrow)} \\ \vdots & & \vdots \\ -\psi_{j-1}^{(1)} & \dots & -\psi_{j-1}^{(N_\uparrow)} \\ \psi_j^{(1)} & \dots & \psi_j^{(N_\uparrow)} \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_N^{(1)} & \dots & \psi_N^{(N_\uparrow)} \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

$$a_j^\dagger e^{i\pi \sum_{k<j} a_k^\dagger a_k} | \psi_0 \rangle = \prod_{m=1}^{N_\uparrow} \sum_{l=1}^N \tilde{P}_{lm}^{(j)} a_l^\dagger | 0 \rangle, \text{ avec } \tilde{P}^{(j)} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ P^{(j)} & \leftarrow \text{j-ème ligne} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.7})$$

Finalement,

$$\langle S_j^+ S_i^- \rangle = \langle 0 | \left(\prod_{m=1}^{N_\uparrow} \sum_{l=1}^N \tilde{P}_{lm}^{(j)*} a_l \right) \left(\prod_{m=1}^{N_\uparrow} \sum_{l'=1}^N \tilde{P}_{l'm}^{(j)} a_{l'}^\dagger \right) | 0 \rangle \quad (\text{B.8})$$

$$= \det(\tilde{P}^{(i)\dagger} \tilde{P}^{(j)}) . \quad (\text{B.9})$$

Calcul de l'entropie d'intrication de la chaîne XX

Nous allons ici calculer l'entropie de Renyi d'ordre 2 d'un sous-système de taille l $S_l^{(2)}$ à partir du Hamiltonien de la chaîne de fermions en supposant un nombre de particules $\frac{N}{2}$ impair. Ces calculs théoriques sont basés sur [79][78].

La matrice densité réduite sur un sous-système de taille l ρ_l peut s'écrire sous la forme

$$\rho_l = \frac{1}{Z_l} e^{-H^{(l)}} \quad (\text{C.1})$$

avec Z_l un facteur de normalisation et $H^{(l)}$ un Hamiltonien effectif, appelé Hamiltonien d'intrication.

Puisque les fonctions de corrélation se décomposent en fonctions de corrélation à deux sites, on retrouve la conséquence du théorème de Wick, le Hamiltonien d'intrication doit être nécessairement quadratique, de la forme $H^{(l)} = \sum_{i,j=1}^l H_{ij}^{(l)} a_i^\dagger a_j$ où a_i^\dagger et a_j sont les opérateurs de création et d'annihilation sur le sous-système considéré de la chaîne de fermions.

La matrice densité du sous-système est donc analogue à celle d'une matrice densité thermodynamique à $\beta = 1$. De plus on peut alors relier les valeurs propres ϵ_α du Hamiltonien $H^{(l)}$ et les valeurs propres n_α de la matrice C des fonctions de corrélation du sous-système $C_{ij} = \langle a_i^\dagger a_j \rangle$.

En effet diagonalisons $H^{(l)}$,

$$H^{(l)} \phi_\alpha = \epsilon_\alpha \phi_\alpha . \quad (\text{C.2})$$

Effectuons un changement de base,

$$a_i = \sum_{\alpha=1}^l \phi_\alpha^{(i)*} c_\alpha . \quad (\text{C.3})$$

Par orthogonalité des vecteurs ϕ_α , $\sum_\alpha \phi_\alpha^{(i)*} \phi_\alpha^{(j)} = \delta_{ij}$, le Hamiltonien se réécrit,

$$H^{(l)} = \sum_{i,j=1}^l H_{ij}^{(l)} f_i^\dagger f_j \quad (\text{C.4})$$

$$= \sum_{i,j=1}^l \left(\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^{(i)} \phi_{\alpha}^{(j)*} \epsilon_{\alpha} \right) \left(\sum_{\beta} \phi_{\beta}^{(i)*} c_{\beta}^\dagger \right) \left(\sum_{\gamma} \phi_{\gamma}^{(j)} c_{\gamma} \right) \quad (\text{C.5})$$

$$= \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha} . \quad (\text{C.6})$$

D'où

$$\rho_l = \frac{1}{Z} e^{-\sum_{\alpha=1}^l \epsilon_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha}} . \quad (\text{C.7})$$

On trouve ainsi par analogie avec la thermodynamique

$$\langle c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha'} \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \frac{1}{e^{\epsilon_{\alpha}} + 1} . \quad (\text{C.8})$$

D'autre part, on a

$$C_{ij} = \langle a_i^\dagger a_j \rangle \quad (\text{C.9})$$

$$= \sum_{\alpha\alpha'} \phi_{\alpha}^{(i)*} \phi_{\alpha'}^{(j)} \langle c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha'} \rangle \quad (\text{C.10})$$

$$= \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^{(i)*} \phi_{\alpha}^{(j)} \frac{1}{e^{\epsilon_{\alpha}} + 1} . \quad (\text{C.11})$$

Pour n_{α} les valeurs propres de la matrice C , on obtient donc

$$n_{\alpha} = \frac{1}{1 + e^{\epsilon_{\alpha}}} . \quad (\text{C.12})$$

De plus

$$S_l^{(2)} = -\log \left(\frac{1}{Z_l^2} \text{Tr} e^{-2 \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} a_{\alpha}^\dagger a_{\alpha}} \right) . \quad (\text{C.13})$$

En utilisant l'analogie avec la thermodynamique, on obtient

$$Z_l = \prod_{\alpha} (1 + e^{\epsilon_{\alpha}}) . \quad (\text{C.14})$$

Finalement

$$S_l^{(2)} = -\log \left(\prod_{\alpha} \frac{1 + e^{-2\epsilon_{\alpha}}}{(1 + e^{-\epsilon_{\alpha}})^2} \right) \quad (\text{C.15})$$

$$= -\sum_{\alpha} \log \left(\frac{e^{2\epsilon_{\alpha}} + 1}{(e^{\epsilon_{\alpha}} + 1)^2} \right) \quad (\text{C.16})$$

$$= -\sum_{\alpha} \log \left(\left(1 - \frac{1}{(e^{\epsilon_{\alpha}} + 1)} \right)^2 + \frac{1}{(e^{\epsilon_{\alpha}} + 1)^2} \right) \quad (\text{C.17})$$

$$= -\sum_{\alpha} \log(n_{\alpha}^2 + (1 - n_{\alpha})^2) . \quad (\text{C.18})$$

Évolution de l'aimantation alternée suite à un quench

Nous présenterons ici l'évolution de l'aimantation alternée suite à un quench d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX en présence d'un champ magnétique alterné h . Nous nous intéresserons ici à un système de taille $N = 20$.

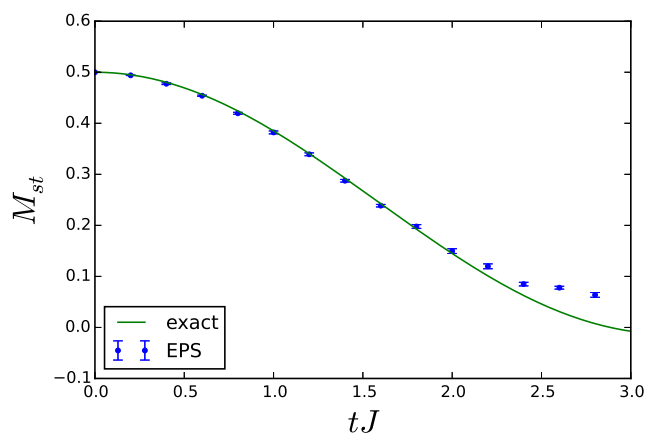


FIG. D.1 $h = 0.5$

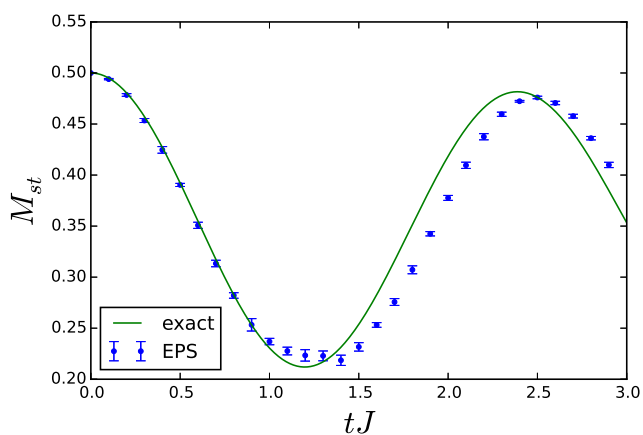


FIG. D.2 $h = 1$

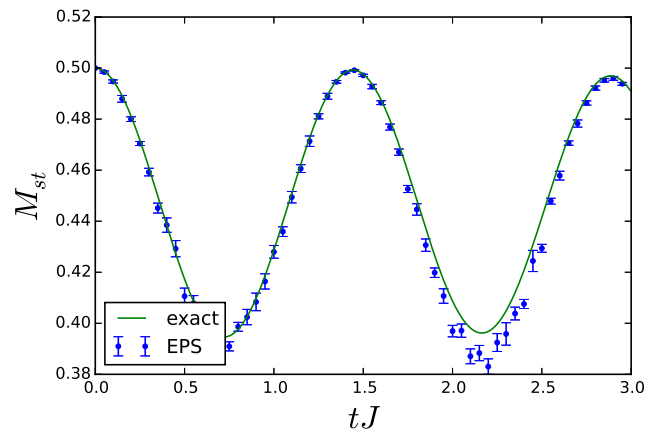


FIG. D.3 $h = 2$

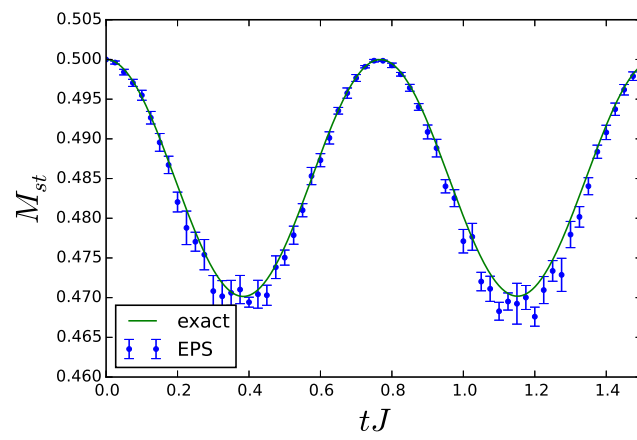


FIG. D.4 $h = 4$

Évolution des fonctions de corrélation suite à un quench

Nous présenterons ici l'évolution des fonctions de corrélation entre deux sites à distance r suite à un quench d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX en présence d'un champ magnétique alterné h . Nous nous intéresserons ici à un système de taille $N = 20$.

Corrélations des composantes x et y des spins Nous avons représenté les corrélations jusqu'à une distance $r = 4$ au delà de cette limite, les corrélations sont trop faibles pour permettre de conclure quant à l'efficacité de notre approche.

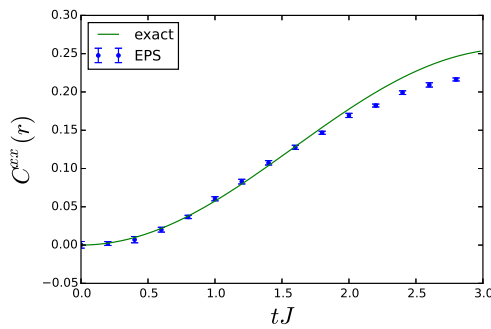


FIG. E.1 $h = 0.5$ et $r = 1$

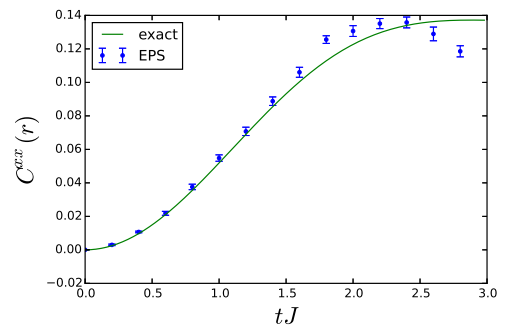


FIG. E.2 $h = 0.5$ et $r = 2$

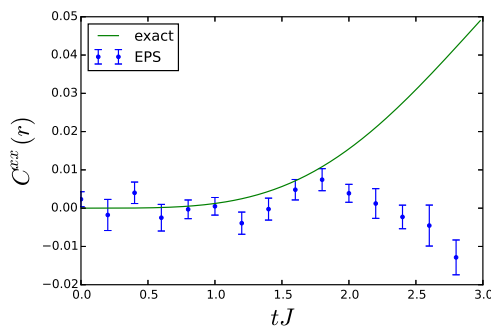


FIG. E.3 $h = 0.5$ et $r = 3$

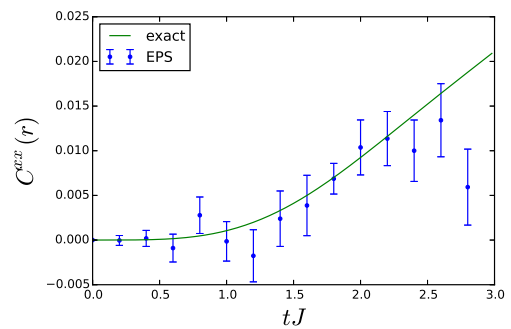


FIG. E.4 $h = 0.5$ et $r = 4$

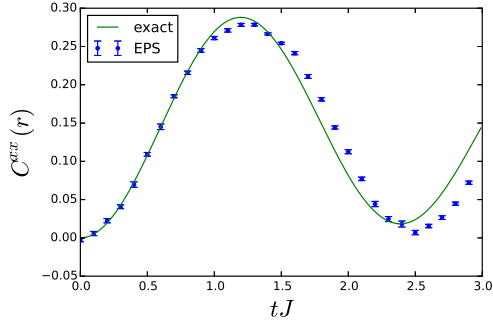


FIG. E.5 $h = 1$ et $r = 1$

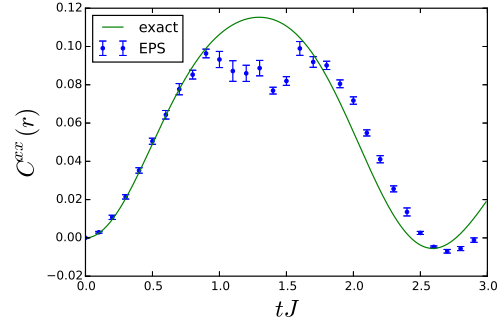


FIG. E.6 $h = 1$ et $r = 2$

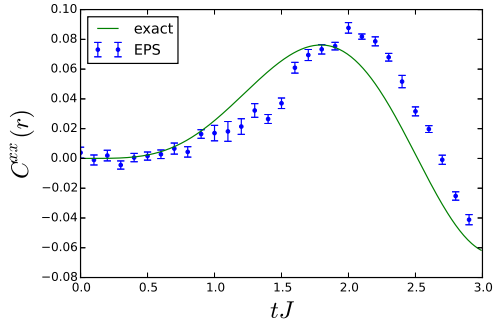


FIG. E.7 $h = 1$ et $r = 3$

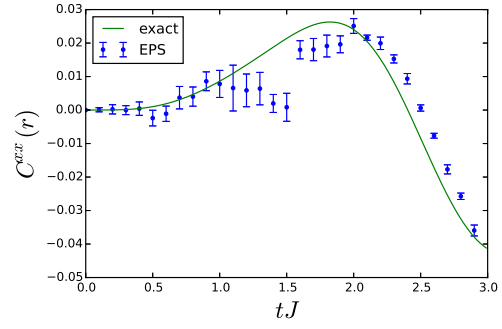


FIG. E.8 $h = 1$ et $r = 4$

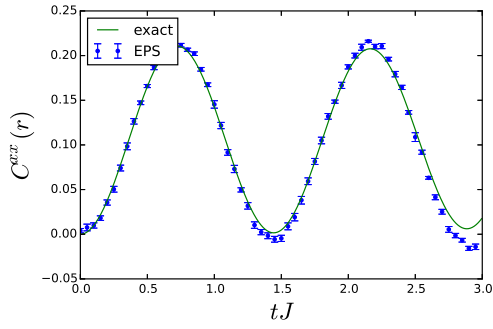


FIG. E.9 $h = 2$ et $r = 1$

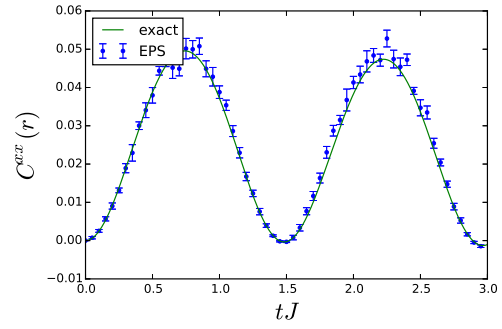


FIG. E.10 $h = 2$ et $r = 2$

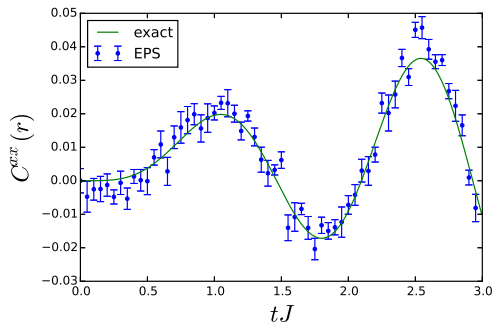


FIG. E.11 $h = 2$ et $r = 3$

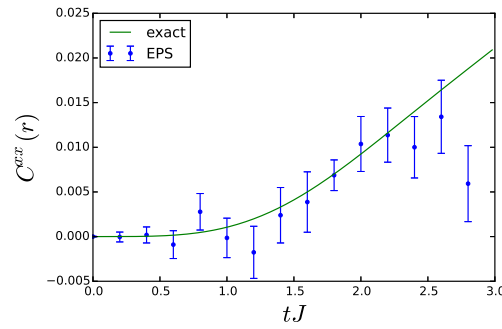


FIG. E.12 $h = 2$ et $r = 4$

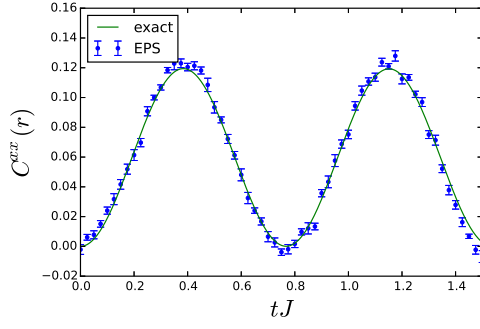


FIG. E.13 $h = 4$ et $r = 1$

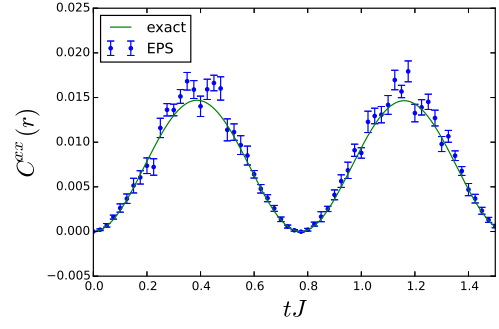


FIG. E.14 $h = 4$ et $r = 2$

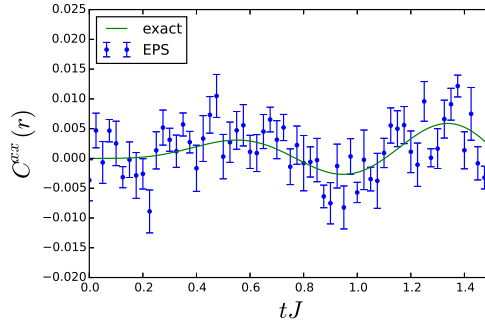


FIG. E.15 $h = 4$ et $r = 3$

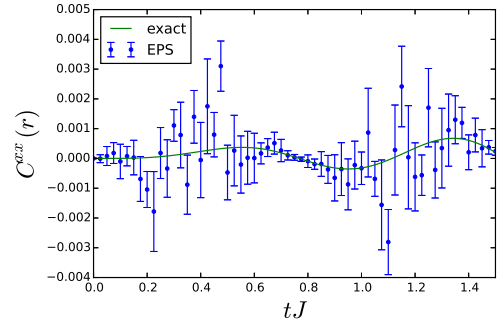


FIG. E.16 $h = 4$ et $r = 4$

Corrélations des composantes z des spins Nous avons représenté les corrélations à distance $r = 1$. Au delà de cette valeur, pour $h > 1$, les corrélations sont trop faibles pour permettre de conclure quant à l'efficacité de notre approche

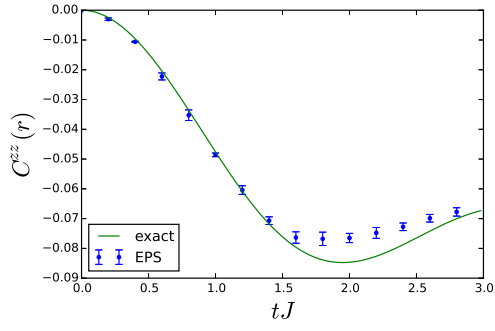


FIG. E.17 $h = 0.5$

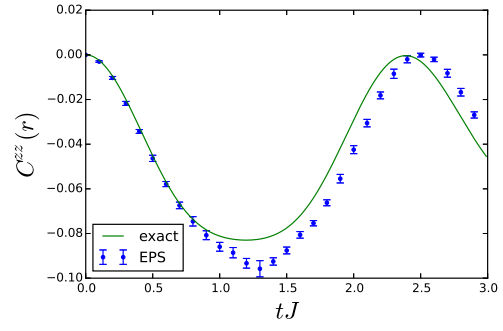


FIG. E.18 $h = 1$

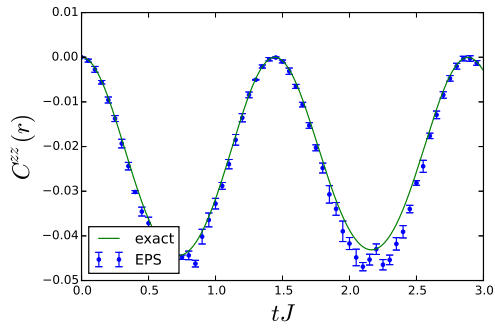


FIG. E.19 $h = 2$

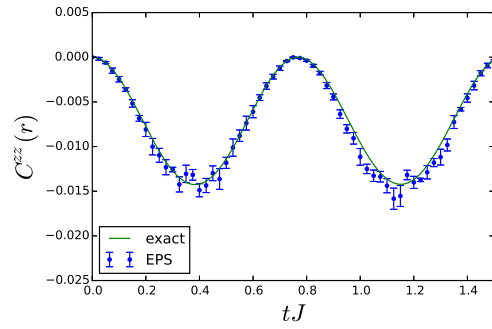


FIG. E.20 $h = 4$

Évolution de l'entropie d'intrication suite à un quench

Nous présenterons ici l'évolution de l'entropie d'intrication d'un sous-système de taille ℓ (pour $\ell = 1$ et $\ell = \frac{N}{2} = 10$) suite à un quench d'un état de Néel soumis à un Hamiltonien de chaîne XX en présence d'un champ magnétique alterné h . Nous nous intéresserons ici à un système de taille $N = 20$.

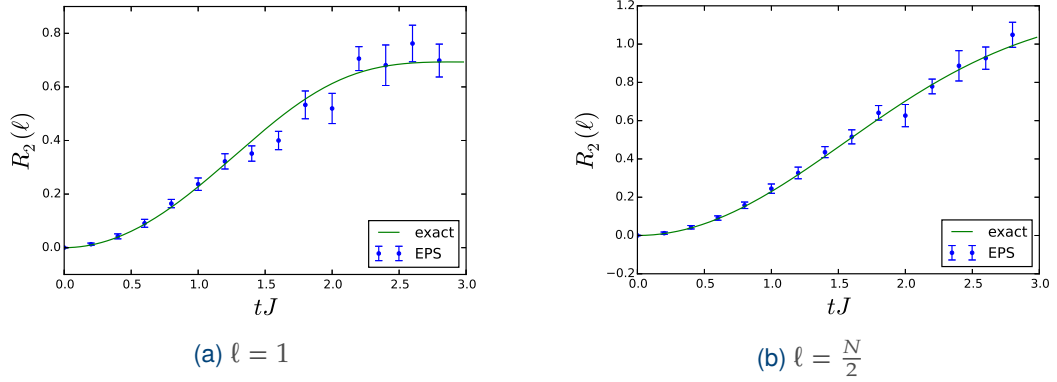


FIG. F.1 $h = 0.5$

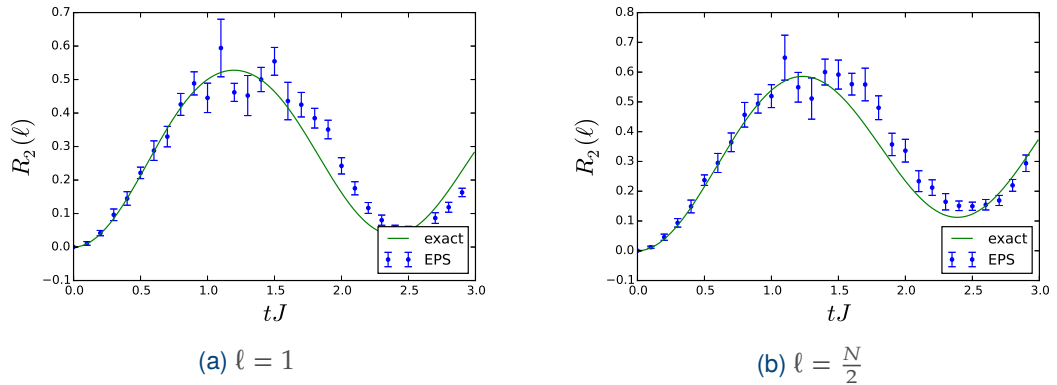
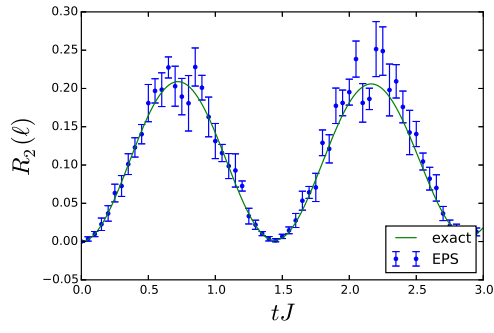
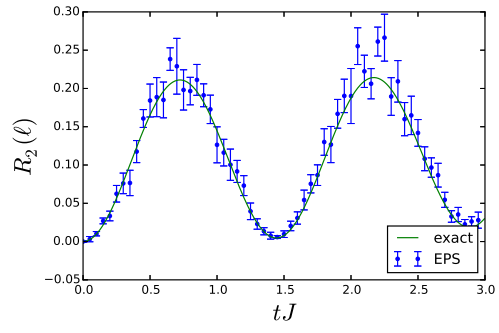


FIG. F.2 $h = 1$

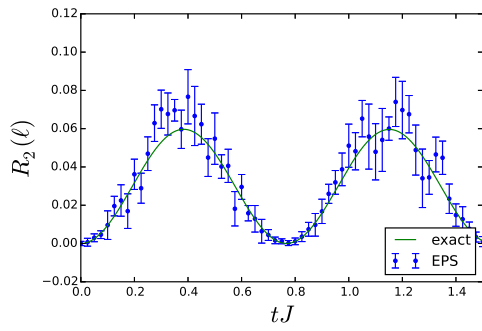


(a) $\ell = 1$

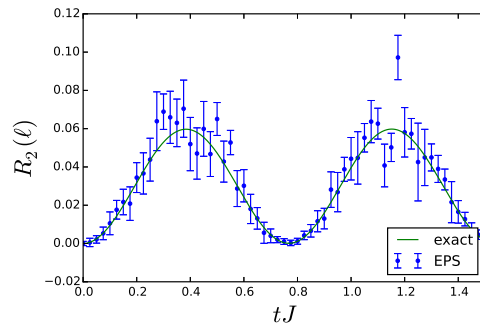


(b) $\ell = \frac{N}{2}$

FIG. F.3 $h = 2$



(a) $\ell = 1$



(b) $\ell = \frac{N}{2}$

FIG. F.4 $h = 4$