

Université de Montréal

**Excitations et ergodicité des chaînes de spins
quantiques critiques à partir de la dynamique classique
hors d'équilibre**

par

Stéphane Vinet

Département de Physique
Faculté des arts et des sciences

Mémoire présenté en vue de l'obtention du grade de
Maître ès sciences (M.Sc.)
en Physique

6 octobre 2021

Université de Montréal

Faculté des arts et des sciences

Ce mémoire intitulé

Excitations et ergodicité des chaînes de spins quantiques critiques à partir de la dynamique classique hors d'équilibre

présenté par

Stéphane Vinet

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes :

Manu Paranjape

(président-rapporteur)

William Witczak-Krempa

(directeur de recherche)

Yvan Saint-Aubin

(membre du jury)

Résumé

Ce mémoire étudie le modèle quantique d'Ising-Kawasaki en une dimension. Cette chaîne quantique de spin-1/2 décrit la dynamique de Kawasaki hors d'équilibre d'une chaîne d'Ising classique couplée à un bain thermique. L'Hamiltonien est obtenu pour le cas général désordonné avec des couplages d'Ising et champs magnétiques non-uniformes. Quand les champs magnétiques sont nuls, la chaîne de spin quantique est stochastique, et dépend des couplages d'Ising normalisés par la température du bain de chaleur. Dans le cas de couplages uniformes, nous donnons les états fondamentaux exacts de la chaîne de spin, ainsi que ses excitations à 1-magnon. Les solutions pour les spectres à deux magnons sont dérivées via une variante de l'Ansatz de Bethe. Dans le régime antiferromagnétique, les états de branche à deux magnons présentent un comportement complexe, notamment en ce qui concerne l'hybridation avec le continuum. L'analyse faite dans ce mémoire, combinée aux études précédentes, suggère que le système manifeste des dynamiques multiples à basse énergie, comme le montre la présence de plusieurs exposants critiques dynamiques. La distribution de l'espacement de l'ensemble des niveaux d'énergie est évaluée en fonction du couplage d'Ising. On conclut que le système est non-intégrable pour des paramètres génériques, ou de manière équivalente, que la dynamique classique hors équilibre correspondante est ergodique.

Mots clés : Chaînes de spins quantiques, dynamique d'hors d'équilibre classique de Kawasaki, intégrabilité, stochasticité, ansatz de Bethe, exposants dynamiques critiques

Abstract

We study a quantum spin-1/2 chain that is dual to the non-equilibrium Kawasaki dynamics of a classical Ising chain coupled to a thermal bath. The Hamiltonian is obtained for the general disordered case with non-uniform Ising couplings. The quantum spin chain is stoquastic, and depends on the Ising couplings normalized by the bath's temperature. Proceeding with uniform couplings, we give the exact groundstates of the gapless spin chain, as well as its single-magnon excitations. Solutions for the two-magnon spectra are derived via a Bethe Ansatz scheme. In the antiferromagnetic regime, the two-magnon branch states show intricate behavior, especially regarding hybridization with the continuum. Our analysis, when combined with previous studies, suggests that the system hosts multiple dynamics at low energy as seen via the presence of multiple dynamical critical exponents. Finally, we analyze the full energy level spacing distribution as a function of the Ising coupling. We conclude that the system is non-integrable for generic parameters, or equivalently, that the corresponding non-equilibrium classical dynamics are ergodic.

Keywords : Quantum spin chains, Kawasaki non-equilibrium classical dynamics, integrability, stoquasticity, Bethe ansatz, dynamical critical exponents

Table des matières

| | |
|---|------|
| Résumé | v |
| Abstract | vii |
| Table des figures | xi |
| Liste des sigles et des abréviations | xiii |
| Remerciements | xv |
| Chapitre 1. Introduction | 1 |
| Chapitre 2. Modèles d’Ising cinétiques | 3 |
| 2.1. Modèle d’Ising en 1D | 4 |
| 2.2. Équation maîtresse | 5 |
| 2.3. Modèle de Glauber en 1D | 5 |
| 2.4. Modèle de Kawasaki en 1D | 6 |
| 2.4.1. Frustration à température nulle | 8 |
| 2.5. Exposant dynamique | 9 |
| Chapitre 3. Modèle quantique de Kawasaki | 11 |
| 3.1. Passage au modèle quantique | 11 |
| 3.2. Stoquasticité | 16 |
| 3.3. Théorème de Perron-Frobenius | 17 |
| Chapitre 4. Ansatz de Bethe | 19 |
| 4.1. Modèle XXX d’Heisenberg en 1D | 19 |
| Chapitre 5. Intégrabilité | 21 |
| 5.1. Statistiques de niveaux d’énergie | 21 |

| | |
|---|-----------|
| 5.2. Conjecture de Berry-Tabor..... | 23 |
| Chapitre 6. Modèles de Motzkin et Fredkin | 25 |
| 6.1. Modèle de Motzkin | 25 |
| 6.2. Modèle de Fredkin..... | 26 |
| Bibliographie | 28 |
| Chapitre 7. Excitations and ergodicity of critical quantum spin chains from non-equilibrium classical dynamics | 33 |
| 7.1. Introduction..... | 34 |
| 7.2. The Model..... | 35 |
| 7.2.1. Ground states | 37 |
| 7.3. Spin wave solutions..... | 38 |
| 7.3.1. One-magnon sector | 38 |
| 7.3.2. Two-magnon sector | 39 |
| 7.3.2.1. Ferromagnetic $J > 0$ | 41 |
| 7.3.2.2. Antiferromagnetic $J < 0$ | 42 |
| 7.3.3. Dynamical critical exponents..... | 43 |
| 7.4. Energy Level Statistics..... | 45 |
| 7.5. Conclusion..... | 48 |
| 7.6. Acknowledgments..... | 49 |
| A. Two-magnon continuum at large $ \kappa $ | 49 |
| B. Bloch basis..... | 50 |
| C. Numerical study of energy level spacings | 50 |
| C.1. Finite-size scaling | 51 |
| Bibliographie | 52 |
| Chapitre 8. Conclusions..... | 55 |
| Bibliographie | 57 |

Table des figures

| | | |
|-----|--|----|
| 6.1 | Excitations à deux magnons pour la chaîne de spins de Fredkin et $N = 200$ avec fidélité à sites plus proches voisins (NN) et prochains plus proches voisins (NNN) respectivement. | 28 |
| 7.1 | Two-magnon excitations and nearest neighbor fidelity of the ferromagnetic quantum Ising-Kawasaki spin chain with $N = 200$ for (a) $\kappa = 0$ and (b) $\kappa = 0.5$. For $\kappa = 0$ we recover the Heisenberg XXX known result [35]. | 41 |
| 7.2 | Two-magnon excitations and nearest neighbor fidelity for the antiferromagnetic quantum Ising-Kawasaki spin chain with $N = 200$ around κ_x | 44 |
| 7.3 | Two-magnon excitations and nearest neighbor fidelity for $N = 200$ and $\kappa = -0.6$ | 44 |
| 7.4 | Nearest and next-nearest neighbor branch state energies for the two-magnon excitations at $K = \pi/2$ given by Eqs. (7.3.16,7.3.17). The crossing value where the Eqs. (7.3.16,7.3.17) have the same energy at κ_x is highlighted by the grey vertical dashed line. The solid black line shows the coupling term in Eqs. (7.3.9, 7.3.10).. | 45 |
| 7.5 | Level spacing distribution for $N = 24$, $\kappa = 0.5$ in the $S_T^z = 1$ and $k = 2\pi/24$ symmetry sector which has 104006 states. The dashed, dotted and plain red lines represent respectively the negative exponential distribution (7.4.1), the Wigner surmise (7.4.2), and the fit (7.4.3). The fit coefficient α value obtained is 0.02.... | 46 |
| 7.6 | Level spacing distribution for $N = 25$, $\kappa = 0.5$ in the $S_T^z = 1/2$, $k = 0$ and $P = \pm 1$ symmetry sector. | 47 |
| 7.7 | Fit coefficient α in each symmetry sector for $N = 20$ and $N = 21$ with $\kappa = 0.5$. Values of $\alpha = 0$ and 1 correspond respectively to Wigner and Poisson distributions, respectively. The symbols $0\pm$ and $\pi\pm$ on the momentum axis k designate the symmetry sectors with $P = \pm 1$ and respectively $k = 0$ and π . Similarly, the $0\pm$ on the total z-spin axis S_T^z designate the symmetry sectors with $\mathcal{T} = \pm 1$ and $S_T^z = 0$. Here \mathcal{T} corresponds to time-reversal. Sectors with $S_T^z \geq 6$ are not shown as they are too small (< 300) to produce a good histogram. | 48 |

| | | |
|----|---|----|
| .8 | Two-magnon excitations and nearest neighbor fidelity for $N = 200$ and $\kappa = \pm\infty$ respectively in (a) and (b)..... | 50 |
| .9 | Fit coefficient α for increasing chain lengths N in the lowest strictly positive S_T^z and $k = 2\pi/N$ sectors. Blue dots have odd N and $S_T^z = 1/2$. Red dots have even N and $S_T^z = 1$ | 51 |

Liste des sigles et des abréviations

| | |
|------|---|
| CBA | Ansatz de Bethe coordonné |
| DMRG | <i>Density Matrix Renormalization Group</i> |
| GOE | Ensemble orthogonal gaussien |
| NN | <i>Nearest Neighbor</i> |
| NNN | <i>Next Nearest Neighbor</i> |
| OBC | Conditions frontières ouvertes |
| PBC | Conditions frontières périodiques |
| QMC | Monte-Carlo quantique |
| RDE | Ensemble diagonal aléatoire |
| RMT | Théorie des matrices aléatoires |

Remerciements

Plusieurs personnes ont contribué à mon cheminement au cours de ma maîtrise à l'Université de Montréal. Je suis particulièrement reconnaissant envers mon directeur de recherche, William Witzak-Krempa, pour son mentorat enthousiaste et inspirant. Je remercie Gabriel Longpré pour sa collaboration au cours des deux dernières années. Je remercie aussi Nicolas Crampé d'avoir généreusement partagé avec moi son expertise sur l'ansatz de Bethe. Merci également aux membres du groupe de William pour leur soutien et leur amitié. Finalement je tiens à remercier ma famille et mes amis pour leur encouragement et leur support inconditionnel.

Chapitre 1

Introduction

Il existe une correspondance exacte entre la dynamique hors d'équilibre de certains systèmes classiques et celle de systèmes quantiques fermés [1, 2, 3]. Cette correspondance a une riche histoire et a notamment été utilisée dans l'étude de divers systèmes magnétiques, tels que le modèle XXX d'Heisenberg [4, 5, 6]. Cette dualité classique-quantique découle du fait que l'équation de Markov peut être identifiée à une équation quantique de Schrödinger en temps imaginaire. On a ainsi reconnu au début des années 1990 que les nombreux outils de la mécanique quantique à plusieurs corps pouvaient être utilisés dans l'étude des processus stochastiques autant à l'équilibre qu'hors d'équilibre [7]. D'autre part, en ayant recours entre autres à l'ansatz de Bethe, aux transformations de similarité et aux symétries globales, on peut examiner une variété de sujets comprenant les temps de relaxation, les exposants critiques et les transitions de phase avec des échelles de longueur divergentes dans des systèmes unidimensionnels hors d'équilibre [8, 9]. De plus, l'intégrabilité de certaines chaînes de spin quantiques nous permet de résoudre la dynamique classique hors d'équilibre correspondante. On peut aussi obtenir de nouveaux Hamiltoniens quantiques à partir de modèles dynamiques classiques bien justifiés. Cette approche est adoptée dans ce mémoire pour explorer la dynamique d'échanges de spins de Kawasaki du modèle d'Ising en une dimension.

La présentation est organisée de la façon suivante : les chapitres 2 à 6 offrent une revue des résultats pertinents à notre étude et au chapitre 7 on trouve l'article où sont présentés les résultats originaux [10]. Dans le chapitre 2 on introduit le modèle classique de Kawasaki. Ensuite au chapitre 3, on exploite la correspondance classique-quantique afin de définir le modèle quantique d'Ising-Kawasaki pour le cas général désordonné avec des couplages d'Ising et champs magnétiques non-uniformes. Les états fondamentaux exacts sont obtenus à partir des états d'équilibre thermodynamique de Boltzmann correspondants. Pour des couplages uniformes, on obtient les excitations à un seul magnon ainsi que les spectres à deux magnons via une variante de l'ansatz de Bethe qui est introduite au chapitre 4. Dans le régime antiferromagnétique, les états de branche à deux magnons présentent un comportement complexe,

notamment en ce qui concerne l'hybridation avec le continuum. Cette analyse, combinée aux études précédentes [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18], suggère que le système possède de multiples dynamiques à basse énergie, comme le montre la présence de plusieurs exposants critiques dynamiques. Au chapitre 5 on introduit la théorie des matrices aléatoires afin d'évaluer les distributions de l'espacement des niveaux d'énergie du modèle quantique d'Ising-Kawasaki en fonction du couplage d'Ising. On conclut que le système est non-intégrable pour des paramètres génériques, ou de manière équivalente, que la dynamique classique hors d'équilibre correspondante est ergodique. Il est intéressant de noter que la chaîne quantique d'Ising-Kawasaki présente des phénomènes similaires à certaines chaînes de spin quantiques sans frustration qui ont été récemment introduites dans un contexte d'information quantique à savoir, les chaînes de spin de Motzkin [19, 20] et de Fredkin [21]. Ces modèles sont présentés au chapitre 6. L'article qui est au coeur de ce mémoire forme le chapitre 7 et les conclusions suivent au chapitre 8.

Chapitre 2

Modèles d'Ising cinétiques

S'il existe un cadre général bien développé pour la description statistique des systèmes à l'équilibre, celui portant sur les systèmes hors d'équilibre thermique est beaucoup moins élaboré. Voilà pourquoi on étudie certains modèles spécifiques pour leur intérêt intrinsèque mais aussi afin d'avoir un aperçu du comportement général des classes de systèmes apparentés. On suppose que les particules de ces systèmes sont situées sur un réseau sur lequel elles se déplacent et interagissent les unes avec les autres. À tout instant, on considère que le système se trouve dans une configuration \vec{s} , définie par les positions des particules. En physique classique, l'état d'un système à N corps est spécifié à un instant donné par un ensemble de positions et de moments conjugués. En théorie quantique, une description complète est fournie par la fonction d'onde du système $\psi(\vec{s}, t)$ qui donne l'amplitude de probabilité de le trouver dans l'état \vec{s} au temps t [7]. Classiquement, une description statistique est plus appropriée pour les systèmes avec un très grand nombre de corps. Plutôt que d'utiliser les équations déterministes du mouvement de Newton, on décrit l'évolution temporelle en termes de probabilités de transitions $W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}')$. Les règles stochastiques sous-jacentes sont en l'occurrence celles de processus de Markov puisque la dynamique du système choisi n'a pas de mémoire explicite de ses configurations antérieures. Autrement dit, les probabilités de transitions décrivant des mouvements tels des sauts d'une particule d'un site du réseau à un autre ne dépendent pas des transitions précédentes. C'est dans cette perspective que l'on se penchera sur les modèles cinétiques d'Ising dans le chapitre présent.

Le modèle sans doute le plus simple d'un système à plusieurs corps en interaction est celui d'Ising, introduit pour la première fois en 1920 [22] afin de décrire les systèmes magnétiques. Une étude sur le comportement dynamique du modèle d'Ising commence par l'introduction d'une règle d'évolution temporelle, car le modèle d'Ising lui-même est un modèle statique sans dynamique a priori. Ses généralisations cinétiques jouent un rôle crucial dans notre compréhension de la physique statistique hors d'équilibre. En effet, dans l'étude des phénomènes

dynamiques, la simplicité des modèles cinétiques d’Ising permet d’obtenir des résultats analytiques (par le biais de développement en séries) [23, 24, 25] et numériques (via Monte-Carlo) [13, 14, 26, 27, 28]. En une dimension, des solutions exactes ont été dérivées. La première généralisation cinétique du modèle d’Ising a été envisagée par Glauber qui a introduit le modèle unidimensionnel à *spin-flip* simple afin de décrire la relaxation vers l’équilibre [29]. Kawasaki a ensuite construit une version d’échange de spins afin d’étudier les processus stochastiques sous conservation de la magnétisation totale [30]. Cette contrainte ralentit la relaxation et joue un rôle déterminant dans l’étude de la séparation de phase, de la croissance des domaines ainsi que dans l’étude du *freezing* après un refroidissement rapide observé dans plusieurs systèmes, tels que les fluides binaires et les alliages [31]. De nombreuses autres lois de conservation ont été introduites peu après notamment par Kadanoff et Swift [32]. La dynamique classique de Kawasaki pour le modèle d’Ising en une dimension sera explorée au cours de ce chapitre. Après un bref résumé des propriétés statiques du modèle d’Ising en 1D, l’équation maîtresse qui dicte la dynamique prescrite est introduite. Ensuite, on s’intéressera aux deux modèles dits prototypes A et B dans la terminologie d’Hohenberg et Halperin [4], c’est-à-dire les modèles de Glauber et de Kawasaki. Finalement, nous étudierons le cas particulier de la température nulle pour le modèle de Kawasaki qui mène à la fragmentation de l’espace d’Hilbert et à une dynamique vitreuse.

2.1. Modèle d’Ising en 1D

Le modèle d’Ising en 1D consiste en une chaîne de N spins $\{s_i\}$ prenant comme valeurs ± 1 . Ces spins sont étiquetés par un entier $i \in \{1, 2, \dots, N\}$ qui indique leur position dans la chaîne. On suppose que les interactions entre les spins sont limitées aux sites voisins. On parle alors d’un couplage NN pour *nearest-neighbor* en anglais. La constante de couplage entre le spin au site i et celui au site $i + 1$ est dénotée par le nombre réel J_i . L’énergie d’Ising de cette chaîne est alors donnée par

$$E_I(\vec{s}) = - \sum_i J_i s_i s_{i+1}. \quad (2.1.1)$$

On suppose que la constante de couplage J_i est uniforme et égale à J pour le reste du chapitre. On trouve alors que chaque paire de spins voisins parallèles contribue $-J$ à l’énergie alors que chaque paire de spins voisins antiparallèles contribue $+J$. Lorsque la constante de couplage est positive ($J > 0$), l’interaction favorise le régime ferromagnétique. Toutes les propriétés thermodynamiques du modèle peuvent être obtenues à partir de la fonction de partition

$$Z = \sum_{\vec{s}} \exp(-\beta E_I(\vec{s})), \quad (2.1.2)$$

où $\beta = \frac{1}{k_B T}$ et k_B est la constante de Boltzmann. De plus, on impose des conditions frontières périodiques c’est-à-dire. $s_{N+1} = s_1$.

2.2. Équation maîtresse

Le modèle d'Ising est un modèle statique. Il ne possède aucune dynamique intrinsèque. Afin d'étudier les propriétés du système hors d'équilibre, on le couple à un bain thermique de température T qui engendre des transitions d'états dans le modèle. Cette dynamique extrinsèque est décrite par une équation maîtresse [4] :

$$\partial_t P(\vec{s}, t) = \sum_{\vec{s}' \in \{-1, 1\}^N} [W(\vec{s}' \rightarrow \vec{s})P(\vec{s}', t) - W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}')P(\vec{s}, t)], \quad (2.2.1)$$

correspondant à l'équation d'évolution de la probabilité $P(\vec{s}, t)$ que le système se trouve dans l'état \vec{s} au temps t . $W(\vec{s}' \rightarrow \vec{s})$ est la probabilité par unité de temps qu'un système initialement dans l'état \vec{s}' évolue à l'état \vec{s} . La condition d'équilibre statique implique que

$$\text{Prob}_{\text{eq}}(\vec{s}) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E_I(\vec{s})) \quad (2.2.2)$$

est une solution indépendante du temps de la dynamique prescrite. Ceci impose une condition sur les taux de transitions :

$$W(\vec{s}' \rightarrow \vec{s})\text{Prob}_{\text{eq}}(\vec{s}') = W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}')\text{Prob}_{\text{eq}}(\vec{s}) \quad (2.2.3)$$

qu'on appelle l'équation de balance détaillée. Cette équation implique que n'importe quel état initial de spin relaxera éventuellement à l'état d'équilibre thermique pour toute température non-nulle. Par contre l'équation (2.2.3) n'est généralement pas suffisante afin de déterminer la forme de W . En effet, il existe une grande latitude dans la formulation de la dynamique dictée par ce taux de transition. Par exemple, les spins peuvent changer un à la fois ou en blocs corrélés. Par ailleurs, la dynamique peut conserver ou non le paramètre d'ordre en particulier la magnétisation totale. Cette dernière condition est particulièrement propice à l'étude d'alliages, liquides et solutions où la composition du matériel implique nécessairement la conservation de la magnétisation [11, 33, 34].

2.3. Modèle de Glauber en 1D

Glauber fût le premier en 1963 à introduire une dynamique de ce type au modèle d'Ising [29]. Dans le modèle de Glauber, les spins sont sélectionnés un à la fois dans un ordre aléatoire et chacun change à un taux qui dépend du changement d'énergie $\Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'}$ du système à la suite de cette mise à jour. Puisque les spins simples peuvent changer de signe dans ce processus de mise à jour, il s'agit d'une dynamique de *spin-flip-simple* non-conservatrice. En effet, on trouve par exemple au site j que la valeur du spin passe de $s_j \rightarrow -s_j$ et donc la magnétisation n'est pas conservée [11]. En une dimension, le taux de transition peut être directement obtenu à partir de l'équation de balance détaillée (2.2.3). Considérons une fois de plus le spin au site j . Il n'est en interaction qu'avec ses plus proche voisins (NN) et donc le taux de transition

ne dépend que des spins $s_{j\pm 1}$. De plus pour un système isotropique, W est restreint par deux symétries : l'invariance sous la réflexion de tous les spins connue sous le nom de *spin reversal symmetry* ainsi qu'une symétrie entre l'interaction gauche et droite c'est-à-dire avec les sites $i - 1$ et $i + 1$. Conséquemment, on trouve que $W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}')$ prend la forme suivante :

$$W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}') = A + Bs_j(s_{j-1} + s_{j+1}) \quad (2.3.1)$$

où \vec{s} et \vec{s}' ne diffèrent que d'un spin au site j [32, 11, 16]. Suite à une factorisation, on peut réécrire cette expression sous une forme plus suggestive :

$$W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}') = \frac{\alpha}{2} \left(1 - \frac{\gamma}{2} s_j(s_{j-1} + s_{j+1})\right) \quad (2.3.2)$$

où $s_j(s_{j-1} + s_{j+1}) = \Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'}/2$. Sans perte de généralité, nous allons travailler avec $\alpha = 1$ de telle manière à ce que le taux de transition soit égal à $1/2$ lorsque les deux voisins au site j sont antiparallèles. Afin de déterminer la constante γ on a recourt à notre équation de balance détaillée qui nous dicte que

$$\frac{W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}')}{W(\vec{s}' \rightarrow \vec{s})} = \frac{1 - \frac{\gamma}{2} s_j(s_{j-1} + s_{j+1})}{1 + \frac{\gamma}{2} s_j(s_{j-1} + s_{j+1})} = \frac{\text{Prob}_{\text{eq}}(\vec{s}')}{\text{Prob}_{\text{eq}}(\vec{s})} = \frac{\exp(-\beta E_I(\vec{s}'))}{\exp(-\beta E_I(\vec{s}))}. \quad (2.3.3)$$

En développant les énergies d'Ising on trouve alors que

$$\frac{\exp(-\beta E_I(\vec{s}'))}{\exp(-\beta E_I(\vec{s}))} = \frac{1 + \frac{1}{2} s_j(s_{j-1} + s_{j+1}) \tanh(2\beta J)}{1 - \frac{1}{2} s_j(s_{j-1} + s_{j+1}) \tanh(2\beta J)} \quad (2.3.4)$$

utilisant alors le fait que $\frac{1}{2} s_j(s_{j-1} + s_{j+1})$ a comme valeurs possibles $0, \pm 1$ et que $\tanh(ax) = a \tanh(x)$ pour $a = 0, \pm 1$; on trouve donc que $\gamma = \tanh(2\beta J)$. On a alors que le taux de transition de Glauber peut être exprimé comme suit :

$$W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}') = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{\beta}{2} \Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'} \right) \right], \quad (2.3.5)$$

où \vec{s} et \vec{s}' ne diffèrent que d'un spin. Notons que lorsque $T \rightarrow 0$, alors $\gamma \rightarrow 1$ et les processus correspondant à une augmentation de l'énergie d'Ising ($\Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'}$) sont interdits. Puisque nous sommes intéressés ici par les processus stochastiques conservant la magnétisation, nous allons nous tourner vers la dynamique de Kawasaki. Pour une description plus détaillée du modèle de Glauber, le lecteur est invité à consulter les revues détaillées de Redner et Privman [11, 32].

2.4. Modèle de Kawasaki en 1D

Lorsque le modèle d'Ising décrit des transitions de séparation de phase dans un mélange binaire (AB), le modèle de Glauber n'est pas applicable [35]. Si on considère un mélange binaire, les deux états de spin différents correspondent aux deux atomes qui composent

l'alliage. Ainsi, la dynamique microscopique appropriée devrait impliquer des échanges aléatoires d'atomes A et B en des sites distincts, leurs nombres individuels étant constants. On parle ainsi d'un mécanisme d'échange de spins qui conserve strictement la magnétisation dans chaque mise-à-jour du système. La dynamique de Kawasaki est dite locale, c'est-à-dire que l'évolution temporelle se fait localement sur un nombre de spins fini dans ce cas-ci sur une paire de spins voisins. Dans la dynamique de Kawasaki, des spins voisins antiparallèles sont échangés :

$$s_{i-1} \uparrow_i \downarrow_{i+1} s_{i+2} \rightleftharpoons s_{i-1} \downarrow_i \uparrow_{i+1} s_{i+2}. \quad (2.4.1)$$

En une dimension, quatre sites interviennent dans l'échange de spins via l'interaction ci-haut entre les deux spins qui s'échangent et leurs voisins. Le taux de transition dépend alors de l'énergie totale des trois liens connectant ces quatre spins. D'ailleurs, l'énergie d'Ising est directement reliée aux nombres de murs de domaine n_{dw} où dw dénote *domain wall* (aussi dénommés spin *kinks*) par la relation suivante :

$$n_{\text{dw}} = \frac{1}{2}(N + E_I(\vec{s})/J). \quad (2.4.2)$$

Il y a trois types d'événements de mise-à-jour correspondant à : i. une augmentation ($\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow \rightarrow \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$), ii. une diminution ($\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \rightarrow \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$) et iii. une conservation de l'énergie d'Ising ($\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow \rightarrow \uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$). On les dénote respectivement comme processus d'évaporation, de condensation et de diffusion de domaines de spins [16, 18]. Comme on ne considère que des configurations de spins \vec{s} et \vec{s}' différant par un *kink* aux sites $i, i + 1$ on trouve que la différence d'énergie est donnée par

$$\Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'} = -J[(s'_{i-1}s'_i - s_{i-1}s_i) + (s'_{i+1}s'_{i+2} - s_{i+1}s_{i+2})] \quad (2.4.3)$$

sachant que $s_{i-1} = s'_{i-1}$ et $s_{i+2} = s'_{i+2}$, cette expression se simplifie à

$$\Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'} = \mp 2J[s_{i+2} - s_{i-1}] \quad (2.4.4)$$

où le \pm dénote respectivement la direction droite et gauche de la flèche dans l'éq. (2.4.1). Conséquemment, lorsque $s_{i-1} = s_{i+2}$ l'énergie d'Ising est conservée lors de la mise-à-jour. On dénote ces événements avec $\Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'} = 0$ comme diffusion du mur de domaine. Ces événements correspondent à la translation d'une paire domaine-paroi, où un domaine dénote une succession de spins alignés (par exemple $\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow \rightarrow \uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$). Tant que cette paire domaine-paroi reste isolée de toutes les autres parois de domaine, la paire liée peut sauter librement entre des sites voisins sur le réseau. Cette paire peut être considérée comme une excitation élémentaire du système de spins [11]. Encore une fois on peut supposer que α dans l'éq. (2.3.2) est égal à 1. Par contre, les taux des deux événements restants associés à $s_{i+2} \neq s_{i-1}$ sont obtenus à partir de l'équation de balance détaillée éq. (2.2.3). Notons que les valeurs possibles

d'énergie d'Ising pour quatre spins sont $\{\pm J, \pm 3J\}$ et donc les différences d'énergie sont de 0 et $\pm 4J$. Si on considère une transition W_3 d'un état d'énergie $3J$ ainsi qu'une transition W_{-1} d'un état d'énergie $-J$ on trouve que l'équation de balance détaillée doit respecter

$$\frac{W_3}{W_{-1}} = \frac{\text{Prob}_{\text{eq}_{-1}}}{\text{Prob}_{\text{eq}_3}} = \exp(4\beta J). \quad (2.4.5)$$

Reprenant le formalisme de Glauber de l'éq. (2.3.2), on peut alors dénoter W_3 comme $(1+\gamma)/2$ et W_{-1} comme $(1-\gamma)/2$ pour des transitions correspondant à une augmentation et une diminution de l'énergie d'Ising. On trouve donc que l'équation de balance détaillée prend la même forme que pour la dynamique de Glauber et donc $\gamma = \tanh(2\beta J)$. Le taux de transition $W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}')$ s'exprime alors aussi comme :

$$W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}') = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{\beta}{2} \Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'} \right) \right], \quad (2.4.6)$$

ici \vec{s} et \vec{s}' diffèrent d'un *kink* aux sites $i, i+1$. Puisque les seules transitions autorisées sont l'échange de spins voisins avec une orientation opposée et que la magnétisation totale est conservée, la dynamique de Kawasaki peut être considérée comme une sorte de contrainte cinétique [31]. Ceci donne lieu à certaines caractéristiques vitreuses comme le *freezing* dans des structures de domaine hors d'équilibre lorsque le système est refroidi suffisamment rapidement [31, 36].

2.4.1. Frustration à température nulle

Le comportement du modèle classique de Kawasaki à température nulle est explorée dans cette sous-section. Puisque le bain thermique ne fournit plus d'énergie au système, les transitions augmentant l'énergie d'Ising ne sont plus réalisables [11, 17]. En effet, lorsque $T \rightarrow 0$ et $\beta \rightarrow \infty$, on trouve que

$$W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}') = \begin{cases} 0 & \text{pour } \Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'} > 0 \\ 1/2 & \text{pour } \Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'} = 0 \\ 1 & \text{pour } \Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'} < 0. \end{cases} \quad (2.4.7)$$

Le système se retrouve alors souvent coincé dans un état métastable, c'est-à-dire un état d'énergie supérieur à celle du fondamental. Il en résulte que toutes les transitions engendreraient une augmentation de l'énergie d'Ising et sont donc impossibles [18]. Ces états empêchent la relaxation à l'état fondamental lorsque la température est nulle. Ils correspondent à des configurations où les spin *kinks* sont séparés par au moins un site c'est-à-dire la longueur minimale des domaines de spins est de 2. Pour une chaîne ouverte (OBC), le nombre de telles configurations $a(N)$ respecte la relation de récurrence de la suite de Fibonacci :

$$a(N) = a(N-1) + a(N-2). \quad (2.4.8)$$

En effet, si on suppose que $a(N)$ correspond au nombre de configurations métastables pour une chaîne de N spins on peut écrire que

$$a(N) = b(N) + c(N) \quad (2.4.9)$$

où $b(N)$ correspond au nombre de configurations où les deux derniers spins sont parallèles et $c(N)$ où ils sont antiparallèles. Clairement,

$$b(N) = b(N-1) + c(N-1) \quad (2.4.10)$$

puisqu'on peut rajouter un spin parallèle au $N-1$ -ième spin dans les deux cas [24]. On peut obtenir $c(N)$ en ajoutant un spin parallèle au $N-1$ -ième spin d'une configuration $b(N-1)$ on a donc

$$c(N) = b(N-1) = a(N-2) \quad (2.4.11)$$

impliquant alors que

$$a(N) = b(N) + c(N) = a(N-1) + a(N-2). \quad (2.4.12)$$

Si on considère des conditions périodiques, la dérivation est similaire. On commence par fixer un site. S'il est occupé par un *kink*, ses voisins de droite et gauche ne peuvent pas l'être afin d'assurer que la longueur du domaine de spins est minimalement de 2. On peut alors considérer la chaîne ouverte restante de $N-3$ sites. Si le site initial considéré n'est pas occupé alors on se retrouve avec une chaîne de $N-1$ sites [37]. Pour une chaîne périodique on a donc

$$a(N) = a(N-1) + a(N-3). \quad (2.4.13)$$

On trouve donc que le nombre d'états métastables croît comme $(\frac{1+\sqrt{5}}{2})^N$ où $\frac{1+\sqrt{5}}{2}$ est le nombre d'or. Le modèle quantique de Kawasaki exploré au chapitre 3 est encore plus contraint lorsque la température est zéro puisque le nombre de murs de domaine n_{dw} est alors conservée c'est-à-dire que les transitions diminuant l'énergie d'Ising ne sont plus réalisables de surcroît. Le système est ainsi non-ergodique à température nulle [17].

2.5. Exposant dynamique

Lorsque β est grand mais fini, le système atteint rapidement un état métastable via des événements de conservation et de diminution de l'énergie. À très basse température, bien que très rarement des évaporations se produisent de sorte que le système est capable d'échantillonner tout l'espace des phases et d'atteindre l'équilibre [11, 17]. Comme le taux de transition associé à une augmentation de l'énergie est de $e^{-4\kappa}$, le temps moyen entre ces évaporations est de $\tau \equiv e^{4\kappa}$. Notons que les processus de diffusion et de condensation se produisent sur une échelle temporelle $O(1)$ et peuvent ainsi être considérés comme étant instantanés par rapport à τ . Après chaque processus d'évaporation permettant de surmonter

la barrière locale, la dynamique procède par processus de diffusion. Le spin, séparé de son domaine lors de l'évaporation, effectue une marche aléatoire jusqu'à ce qu'il se condense avec un autre spin ou un mur de domaine [16]. On retrouve alors une autre configuration métastable. Pour toute température non-nulle, la combinaison d'un cycle d'événements qui augmente l'énergie suivi d'une série d'événements complémentaires ($\Delta E_{\vec{s},\vec{s}'} \leq 0$) se répète jusqu'à ce que le système fini atteigne l'état fondamental [11]. Le mécanisme clé est la diffusion d'un spin à travers un domaine d'orientation opposée, qui peut aussi être considéré comme la diffusion lente du domaine entier. Supposons que la longueur typique d'un domaine de spins est de ℓ . On peut calculer la probabilité qu'un spin traverse de l'autre côté du domaine comme un problème de premier passage. Une fois que le spin s'est séparé de son domaine initial il est à une distance $\ell - 1$ de l'autre côté. Comme le spin se diffuse librement, il atteint l'autre côté avec probabilité $1/\ell$ et retrouve sa position initiale avec probabilité $1 - 1/\ell$. Conséquemment, la probabilité que le domaine de longueur ℓ se déplace d'un site est de $1/\ell$. On trouve donc que le coefficient de diffusion

$$D(\ell) = \ell^{-1} \tag{2.5.1}$$

est l'inverse de la longueur du domaine. L'effet net des sauts de domaines est d'induire le grossissement des domaines, car les domaines de longueur 1 disparaissent chaque fois qu'un domaine voisin saute dans leur direction. Puisque chaque domaine réalise une marche aléatoire, cette coalescence se produit lorsqu'un domaine diffuse à l'ordre de sa propre longueur. Durant cette coalescence, un domaine croît généralement d'une quantité $\Delta\ell$ qui est aussi d'ordre ℓ . Puisque le temps entre ces événements est de $\Delta t \sim \ell^2/D(\ell)$ on trouve que

$$\frac{\Delta\ell}{\Delta t} \sim \frac{\ell}{\ell^2/D(\ell)} \sim \frac{1}{\ell^2}. \tag{2.5.2}$$

La croissance du domaine est donc sous-diffusive : $\ell \sim t^{1/3}$. Dans la littérature de mécanique statistique classique, il est conventionnel de définir l'exposant dynamique ζ en termes de la croissance de l'échelle de longueur typique via $\ell \sim t^\zeta$. Notons que dans le langage quantique, cela se traduit par un exposant critique dynamique $z = 3$ qui relie l'énergie au vecteur d'onde selon $E \sim k^z$. Les modèles de Motzkin et Fredkin discutés au chapitre 6 exhibent un exposant critique assez proche de 3 à savoir ≈ 3.2 selon les simulations DMRG calculés en [38, 39].

Chapitre 3

Modèle quantique de Kawasaki

Dans ce chapitre on exploite la correspondance classique-quantique afin d'explorer de manière plus approfondie le modèle de Kawasaki. Dans la première section, on dérive le modèle quantique de Kawasaki pour des paramètres de couplage non-uniformes. Dans les deux sections suivantes, on considère les propriétés stochastiques du modèle quantique de Kawasaki.

3.1. Passage au modèle quantique

On généralise la dérivation de l'Hamiltonien faite par Grynberg [4] pour la forme la plus générale du modèle d'Ising c'est-à-dire

$$E_I(\vec{s}) = - \sum_i J_i s_i s_{i+1} - \sum_i h_i s_i \quad (3.1.1)$$

qui correspond à des constantes de couplage et un champ magnétique non-uniformes. Considérant à nouveau que des échanges de spins entre les sites $i, i+1$, on trouve que la différence d'énergie est donnée par

$$\Delta E_{s,s'} = \mp 2[J_{i+1}s_{i+2} - J_{i-1}s_{i-1} + h_i - h_{i+1}]. \quad (3.1.2)$$

Afin de simplifier les équations au cours de la dérivation, on dénote $h_{i+1} - h_i$ simplement par \tilde{h}_i . Il s'en suit alors que le taux de transition donné en éq. 2.3.5 peut être exprimé comme

$$W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}') = \frac{1}{2} [1 - \tanh(\frac{\beta}{2} \Delta E_{s,s'})] = \frac{1}{2} [1 \pm \tanh(\beta(J_{i+1}s_{i+2} - J_{i-1}s_{i-1} + \tilde{h}_i))]. \quad (3.1.3)$$

La correspondance classique-quantique nous permet ensuite de dériver toutes les distributions de probabilité ultérieures à partir de l'action d'un opérateur d'évolution sur une distribution initiale donnée. Pour ce faire, on interprète l'éq. (2.2.1) comme l'évolution de Schrödinger en temps imaginaire pour un pseudo-Hamiltonien de manière telle que $\partial_t |P(t)\rangle = -\hat{W} |P(t)\rangle$. Ainsi, on obtient que $|P(t)\rangle = e^{-\hat{W}t} |P(0)\rangle$, où $\hat{W} = \hat{W}_d + \hat{W}_{nd}$ représentent respectivement

les entrées diagonales et non-diagonales données par :

$$\langle \vec{s}' | \hat{W}_d | \vec{s} \rangle = \sum_{\vec{s}' \neq \vec{s}} W(\vec{s}' \rightarrow \vec{s}) \quad (3.1.4)$$

et

$$\langle \vec{s}' | \hat{W}_{nd} | \vec{s} \rangle = -W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}'). \quad (3.1.5)$$

Si on choisit la direction \hat{z} comme axe de quantification, on peut penser aux configurations de spins $|s\rangle$ comme étant diagonales en \hat{z} et on peut alors définir l'analogue opérationnel de l'éq. 3.1.5 :

$$\hat{W}_{nd} = - \sum_i [R_{i-1,i+2}^z(\beta) \sigma_{i+1}^+ \sigma_i^- + R_{i-1,i+2}^z(-\beta) \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^-] \quad (3.1.6)$$

où σ^\pm sont les opérateurs d'échelle de spin 1/2 et $R_{i-1,i+2}^z(\pm\beta)$ correspond au taux d'échange 3.1.3 pour les directions droite et gauche (dénotées respectivement par le \pm) des transitions données en éq. 2.4.1. La traduction opérationnelle de $R_{i-1,i+2}^z(\pm\beta)$ est alors donnée par

$$\begin{aligned} R_{i-1,i+2}^z(\pm\beta) = & \frac{1}{2} \pm \frac{1}{8} [(\tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} - \tilde{h}_i)))(\sigma_{i+2}^z - \sigma_{i-1}^z) \\ & + (\tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} - \tilde{h}_i)))(\sigma_{i+2}^z + \sigma_{i-1}^z) \\ & + ((\tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + (\tanh(\beta(J_{i-1} - J_{i+1} + \tilde{h}_i))))(1 + \sigma_{i+2}^z \sigma_{i-1}^z) \\ & + ((\tanh(\beta(-J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} + \tilde{h}_i)))(1 - \sigma_{i+2}^z \sigma_{i-1}^z)]. \quad (3.1.7) \end{aligned}$$

Les éléments diagonaux de l'éq. 3.1.4 comptent le nombre d'échanges possibles dans lesquels une configuration donnée peut évoluer vers une configuration différente en échangeant à chaque étape seulement des spins plus proches voisins (NN) [4]. Cette quantité, nécessaire à la conservation de la probabilité, peut être exprimée en fonction des opérateurs nombre $n = \sigma^+ \sigma^-$:

$$\hat{W}_d = \sum_i R_{i-1,i+2}^z(\beta) n_i (1 - n_{i+1}) + R_{i-1,i+2}^z(-\beta) n_{i+1} (1 - n_i). \quad (3.1.8)$$

Conséquentement, à partir des Éqs. 3.1.7 et 3.1.8 on trouve que la partie diagonale de l'Hamiltonien est :

$$\begin{aligned}
\hat{W}_d = \frac{1}{16} \sum_i \left(& 4 - [4 + \tanh(\beta(J_i + J_{i-2} + \tilde{h}_{i-1})) + \tanh(\beta(J_i + J_{i-2} - \tilde{h}_{i-1})) + \tanh(\beta(J_{i+2} + J_i + \tilde{h}_{i+1}))] \right. \\
& + \tanh(\beta(J_{i+2} + J_i - \tilde{h}_{i+1})) - \tanh(\beta(J_i - J_{i-2} + \tilde{h}_{i-1})) - \tanh(\beta(J_i - J_{i-2} - \tilde{h}_{i-1})) \\
& \quad + \tanh(\beta(J_{i+2} - J_i + \tilde{h}_{i+1})) + \tanh(\beta(J_{i+2} - J_i - \tilde{h}_{i+1}))] \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \\
& - [\tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} - \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+2} + J_i + \tilde{h}_{i+1})) \\
& \quad + \tanh(\beta(J_{i+2} + J_i - \tilde{h}_{i+1})) + \tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} - \tilde{h}_i)) \\
& \quad - \tanh(\beta(J_{i+2} - J_i + \tilde{h}_{i+1})) - \tanh(\beta(J_i - J_{i+2} + \tilde{h}_{i+1}))] \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z \\
& + [\tanh(\beta(J_i - J_{i-2} + \tilde{h}_{i-1})) + \tanh(\beta(-J_i + J_{i-2} + \tilde{h}_{i-1})) + \tanh(\beta(-J_i - J_{i-2} + \tilde{h}_{i-1})) \\
& \quad + \tanh(\beta(J_i + J_{i-2} + \tilde{h}_{i-1})) - \tanh(\beta(-J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) - \tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} + \tilde{h}_i)) \\
& \quad - \tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) - \tanh(\beta(J_{i-1} - J_{i+1} + \tilde{h}_i))] \sigma_i^z \\
& - [\tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i-1} - J_{i+1} + \tilde{h}_i))] \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^z \\
& \left. - [\tanh(\beta(-J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} + \tilde{h}_i))] \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^z \right) \quad (3.1.9)
\end{aligned}$$

Notons que les termes d'échange corrélés de l'éq. 3.1.6 nous laisse avec un opérateur d'évolution non-symétrique. Cependant l'équation de balance détaillée 2.2.3 nous garantit l'existence de représentations dans lesquelles \hat{W} est symétrique et donc diagonalisable [40]. Pour ce faire, on utilise la transformation de similarité non-unitaire

$$M = \exp \left(-\frac{\beta}{2} \sum_j (J_{j,j+1} s_j s_{j+1} + h_j s_j) \right) \quad (3.1.10)$$

qui transforme \hat{W} en l'opérateur hermitien $H'' = M(\hat{W}_d + \hat{W}_{nd})M^{-1}$. Via la formule de Baker-Campbell-Hausdorff, on trouve que les termes d'échange deviennent alors :

$$M \sigma_{i+1}^\pm \sigma_i^\mp M^{-1} = \exp(\pm \beta (J_{i+1} \sigma_{i+2}^z - J_{i-1} \sigma_{i-1}^z + \tilde{h}_i)) \sigma_{i+1}^\pm \sigma_i^\mp. \quad (3.1.11)$$

Afin d'utiliser le théorème du binôme, on réexprime le résultat précédent sous la forme suivante

$$\exp(\pm \beta (J_{i+1} \sigma_{i+2}^z - J_{i-1} \sigma_{i-1}^z + \tilde{h}_i)) = \exp(\pm \beta \tilde{h}_i) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\pm \beta)^n}{n!} (J_{i+1} \sigma_{i+2}^z - J_{i-1} \sigma_{i-1}^z)^n. \quad (3.1.12)$$

Sachant que les matrices de Pauli sont involutives on peut séparer la somme selon la parité de la puissance n

$$\begin{aligned}
& 1 + \sum_{\substack{n=1 \\ \Delta n=2}}^{\infty} \frac{(\pm\beta)^n}{n!} \left(\sum_{\substack{k=0 \\ \Delta k=2}}^n \binom{n}{k} (J_{i+1})^{n-k} (J_{i-1})^k (\sigma_{i+2}^z) + \sum_{\substack{k=1 \\ \Delta k=2}}^n \binom{n}{k} (J_{i+1})^{n-k} (J_{i-1})^k (-\sigma_{i-1}^z) \right) \\
& + \sum_{\substack{n=2 \\ \Delta n=2}}^{\infty} \frac{(\pm\beta)^n}{n!} \left(\sum_{\substack{k=0 \\ \Delta k=2}}^n \binom{n}{k} (J_{i+1})^{n-k} (J_{i-1})^k + \sum_{\substack{k=1 \\ \Delta k=2}}^n \binom{n}{k} (J_{i+1})^{n-k} (J_{i-1})^k (-\sigma_{i-1}^z \sigma_{i+2}^z) \right).
\end{aligned} \tag{3.1.13}$$

Pour la direction de droite (\rightarrow) de l'éq. 2.4.1 correspondant à $+\beta$ on obtient

$$\exp(\beta \tilde{h}_i) [-\sinh(J_{i+1})(\sigma_{i+2}^z \cosh(J_{i-1}) + \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+2}^z \sinh(J_{i-1})) + \cosh(J_{i+1})(\cosh(J_{i-1}) + \sigma_{i-1}^z \sinh(J_{i-1}))] \tag{3.1.14}$$

alors que pour la direction de gauche (\leftarrow) de l'éq. 2.4.1 correspondant à $-\beta$ on trouve

$$\exp(-\beta \tilde{h}_i) [\cosh(J_{i-1})(\cosh(J_{i+1}) + \sigma_{i+2}^z \sinh(J_{i+1})) - (\sigma_{i-1}^z \cosh(J_{i+1}) + \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+2}^z \sinh(J_{i+1})) \sinh(J_{i-1})]. \tag{3.1.15}$$

Conséquentemnt, on a que

$$\begin{aligned}
MH_{nd,i}M^{-1} &= -\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{8}\right) [(\tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} - \tilde{h}_i)))(\sigma_{i+2}^z - \sigma_{i-1}^z) \\
&+ (\tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} - \tilde{h}_i)))(\sigma_{i+2}^z + \sigma_{i-1}^z) \\
&+ ((\tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i-1} - J_1 + \tilde{h}_i)))(1 + \sigma_{i+2}^z \sigma_{i-1}^z) \\
&+ ((\tanh(\beta(-J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} + \tilde{h}_i)))(1 - \sigma_{i+2}^z \sigma_{i-1}^z))] \exp(\beta \tilde{h}_i) [-\sinh(\beta J_{i+1}) \\
&(\sigma_{i+2}^z \cosh(\beta J_{i-1}) + \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+2}^z \sinh(\beta J_{i-1})) + \cosh(\beta J_{i+1})(\cosh(\beta J_{i-1}) + \sigma_{i-1}^z \sinh(\beta J_{i-1}))] \sigma_{i+1}^+ \sigma_i^- \\
&- \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{8}\right) [(\tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} - \tilde{h}_i)))(\sigma_{i+2}^z - \sigma_{i-1}^z) \\
&+ (\tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_1 - J_{i-1} - \tilde{h}_i)))(\sigma_{i+2}^z + \sigma_{i-1}^z) \\
&+ ((\tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i-1} - J_{i+1} + \tilde{h}_i)))(1 + \sigma_{i+2}^z \sigma_{i-1}^z) \\
&+ ((\tanh(\beta(-J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} + \tilde{h}_i)))(1 - \sigma_{i+2}^z \sigma_{i-1}^z))] \exp(-\beta \tilde{h}_i) [\cosh(\beta J_{i-1}) \\
&(\cosh(\beta J_{i+1}) + \sigma_{i+2}^z \sinh(\beta J_{i+1})) - (\sigma_{i-1}^z \cosh(\beta J_{i+1}) + \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+2}^z \sinh(\beta J_{i+1})) \sinh(\beta J_{i-1})] \sigma_{i+1}^- \sigma_i^+
\end{aligned} \tag{3.1.16}$$

En simplifiant cette expression et en la combinant avec le terme diagonal en éq. 3.1.9 on trouve que

$$\begin{aligned}
H'' = & \sum_i \frac{4 \exp(6\beta\tilde{h}_i)}{(1 + \exp(8\beta\tilde{h}_i) + 2 \exp(4\beta\tilde{h}_i)(1 + \cosh(4\beta J_{i+1}) + 4 \cosh(2\beta J_{i+1}) \cosh(2\beta J_{i-1}) \cosh(2\beta\tilde{h}_i))} \\
& (-\cosh(\beta J_{i+1}) \cosh(\beta J_{i-1}) \cosh(\beta\tilde{h}_i)(\cosh(2\beta J_{i+1}) + \cosh(2\beta J_{i-1}) + 2 \sinh(\beta\tilde{h}_i)^2) \\
& + \cosh(\beta J_{i-1}) \sinh(\beta J_{i+1})(\cosh(2\beta J_{i+1}) + \cosh(2\beta\tilde{h}_i) - 2 \sinh(\beta J_{i-1})^2) \sinh(\beta\tilde{h}_i) \sigma_{i+2}^z \\
& - \cosh(\beta J_{i+1})(1 - \cosh(2\beta J_{i+1}) + \cosh(2\beta J_{i-1}) + \cosh(2\beta\tilde{h}_i)) \sinh(\beta J_{i-1}) \sinh(\beta\tilde{h}_i) \sigma_{i-1}^z \\
& - \sinh(\beta J_{i+1}) \sinh(\beta J_{i-1}) \cosh(\beta\tilde{h}_i)(\cosh(2\beta J_{i+1}) + \cosh(2\beta J_{i-1}) - 2 \sinh(\beta\tilde{h}_i)^2) \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+2}^2) \\
& (\sigma_{i+1}^+ \sigma_i^- + \sigma_{i+1}^- \sigma_i^+) \\
+ & \frac{1}{16} \sum_i \left(4 - [4 + \tanh(\beta(J_i + J_{i-2} + \tilde{h}_{i-1})) + \tanh(\beta(J_i + J_{i-2} - \tilde{h}_{i-1})) + \tanh(\beta(J_{i+2} + J_i + \tilde{h}_{i+1})) \right. \\
& + \tanh(\beta(J_{i+2} + J_i - \tilde{h}_{i+1})) - \tanh(\beta(J_i - J_{i-2} + \tilde{h}_{i-1})) - \tanh(\beta(J_i - J_{i-2} - \tilde{h}_{i-1})) \\
& \quad \left. + \tanh(\beta(J_{i+2} - J_i + \tilde{h}_{i+1})) + \tanh(\beta(J_{i+2} - J_i - \tilde{h}_{i+1}))] \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right. \\
& - [\tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} - \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+2} + J_i + \tilde{h}_{i+1})) \\
& + \tanh(\beta(J_{i+2} + J_i - \tilde{h}_{i+1})) + \tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} - \tilde{h}_i)) \\
& \quad \left. - \tanh(\beta(J_{i+2} - J_i + \tilde{h}_{i+1})) - \tanh(\beta(J_i - J_{i+2} + \tilde{h}_{i+1}))] \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z \right. \\
& + [\tanh(\beta(J_i - J_{i-2} + \tilde{h}_{i-1})) + \tanh(\beta(-J_i + J_{i-2} + \tilde{h}_{i-1})) + \tanh(\beta(-J_i - J_{i-2} + \tilde{h}_{i-1})) \\
& + \tanh(\beta(J_i + J_{i-2} + \tilde{h}_{i-1})) - \tanh(\beta(-J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) - \tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} + \tilde{h}_i)) \\
& \quad \left. - \tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) - \tanh(\beta(J_{i-1} - J_{i+1} + \tilde{h}_i))] \sigma_i^z \right. \\
& - [\tanh(\beta(J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i-1} - J_{i+1} + \tilde{h}_i))] \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^z \\
& \left. - [\tanh(\beta(-J_{i+1} - J_{i-1} + \tilde{h}_i)) + \tanh(\beta(J_{i+1} + J_{i-1} + \tilde{h}_i))] \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^z \right) \quad (3.1.17)
\end{aligned}$$

Notons que H'' et l'opérateur de Markov \hat{W} ont les mêmes valeurs propres. De plus pour un vecteur propre $|\psi\rangle$ de H'' , $M|\psi\rangle$ est un vecteur propre de \hat{W} . Cet Hamiltonien H'' a des simplifications intéressantes. Notamment, pour un champ magnétique nul, l'Hamiltonien en

éq. 3.1.17 se réduit à l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
H' = & - \sum_{i=1}^N \frac{(\cosh(\kappa_{i+1}) \cosh(\kappa_{i-1}) + \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+2}^z \sinh(\kappa_{i+1}) \sinh(\kappa_{i-1}))}{2(\cosh(2\kappa_{i+1}) + \cosh(2\kappa_{i-1}))} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) \\
& + \frac{1}{8} \sum_{i=1}^N [2 + (-2 - \tanh(\kappa_i + \kappa_{i-2}) - \tanh(\kappa_i - \kappa_{i-2}) - \tanh(\kappa_{i+2} + \kappa_i) + \tanh(\kappa_{i+2} - \kappa_i)) \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \\
& + (\tanh(\kappa_{i+1} + \kappa_{i-1}) + \tanh(\kappa_{i+1} - \kappa_{i-1}) + \tanh(\kappa_{i+2} + \kappa_i) - \tanh(\kappa_{i+2} - \kappa_i)) \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z],
\end{aligned} \tag{3.1.18}$$

où $\kappa_i = \beta J_i$. On note que dans la limite de température infinie, correspondant à $\kappa_i = 0$, on retrouve l'Hamiltonien du modèle XXX d'Heisenberg ferromagnétique uniforme. En effet, les valeurs individuelles des couplages J_i deviennent sans importance par rapport à la haute température $1/\beta$ du bain, et la dynamique devient intégrable [8]. Le modèle XXX d'Heisenberg correspondant à cette limite intégrable ($\kappa_i = 0$) est présenté au chapitre 4. Nous verrons dans le chapitre 7 que ce n'est pas le cas lorsque β est fini. On s'intéresse aussi au cas où les couplages sont uniformes c'est-à-dire. $J_i = J$, on trouve alors que l'Hamiltonien à température finie, champ externe nul et couplage uniforme se simplifie davantage à

$$H = \gamma_\kappa \sum_{i=1}^N \left(1 + \delta_\kappa \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+2}^z\right) \left(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y\right) + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N \left[1 + \alpha_\kappa \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z - (1 + \alpha_\kappa) \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z\right], \tag{3.1.19}$$

où $\gamma_\kappa = -\frac{1}{8}(1 + \operatorname{sech}(2\kappa))$, $\delta_\kappa = \tanh(\kappa)^2$, $\alpha_\kappa = \tanh(2\kappa)$, en accord avec la notation de [4].

3.2. Stoquasticité

Un Hamiltonien $H = \sum_a H_a$ est dit **stoquastique** par rapport à une base \mathcal{B} donnée si et seulement si tout H_a a seulement des éléments de matrice non-diagonaux réels et non-positifs. Autrement dit pour $x \neq y$, H est stoquastique si et seulement si $\langle x | H | y \rangle \leq 0$ où $|x\rangle, |y\rangle$ sont des éléments de \mathcal{B} [41].

On peut vérifier la stoquasticité de H' à partir de ces définitions¹. Si on calcule le produit tensoriel de la partie non-diagonale de H'_i on obtient que

$$\frac{(\cosh(\kappa_{i+1}) \cosh(\kappa_{i-1}) + \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+2}^z \sinh(\kappa_{i+1}) \sinh(\kappa_{i-1}))}{2(\cosh(2\kappa_{i+1}) + \cosh(2\kappa_{i-1}))} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) = \begin{pmatrix} 0 & A & 0 & 0 \\ B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C \\ 0 & 0 & D & 0 \end{pmatrix} \tag{3.2.1}$$

1. Notons que H'' n'est pas stoquastique.

où les matrices A, B, C, D sont données par

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2(a+d) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2(a-d) & 0 & 0 \end{pmatrix} ; \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -2(a+d) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2(a-d) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.2)$$

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2(a-d) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2(a+d) & 0 & 0 \end{pmatrix} ; \quad D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -2(a-d) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2(a+d) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.3)$$

et où on a défini $\frac{\cosh(\kappa_{i+1})\cosh(\kappa_{i-1})}{2(\cosh(2\kappa_{i+1})+\cosh(2\kappa_{i-1}))}$ comme a et $\frac{\sinh(\kappa_{i+1})\sinh(\kappa_{i-1})}{2(\cosh(2\kappa_{i+1})+\cosh(2\kappa_{i-1}))}$ comme d . On trouve alors que toutes les entrées matricielles non-diagonales s'expriment comme $-2(a \pm d) = -\frac{1}{2} \operatorname{sech}(\kappa_{i+1} \mp \kappa_{i-1})$ ce qui est $< 0 \quad \forall \kappa_i$ et donc H' est stoquastique.

3.3. Théorème de Perron-Frobenius

Le théorème de Perron-Frobenius implique que les états fondamentaux peuvent être exprimés comme une distribution de probabilité classique [42]. En effet, si on définit $G = 1 - tH$ pour un Hamiltonien stoquastique H et $t \in \mathbb{R}$, alors G est une matrice non-négative dans une base standard choisie $|i\rangle$. Le théorème de Perron-Frobenius implique ensuite que le vecteur propre $|\psi\rangle$ de G avec la plus grande valeur propre (correspondant à l'état fondamental de H) a la propriété que $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle$, où $\alpha_i \geq 0$ et $P(i) = \frac{\alpha_i}{\sum_i \alpha_i}$ est une distribution de probabilité [43, 44]. Conséquemment, le *mapping* quantique-classique standard utilisé dans les algorithmes de Monte-Carlo quantique (QMC) ne donne pas lieu à une fonction de partition avec des poids de Boltzmann prenant des valeurs négatives non physiques ou même complexes [45]. On dit ainsi que les Hamiltoniens stoquastiques évitent "le problème de signe" des algorithmes QMC.

Chapitre 4

Ansatz de Bethe

L'ansatz de Bethe, originellement introduit comme méthode pour résoudre le modèle spin-1/2 unidimensionnel XXX d'Heisenberg en 1931, a depuis été généralisé bien au-delà de sa forme initiale. Il existe aujourd'hui une multitude de systèmes quantiques à plusieurs corps solubles par une version de l'ansatz de Bethe [8, 9]. Dans le chapitre 7, on utilise une variante de l'Ansatz de Bethe en coordonnées (CBA) afin d'obtenir les états et valeurs propres exactes des secteurs à un et deux magnons du modèle de Kawasaki. Une brève introduction de cette méthode est présentée dans ce qui suit.

4.1. Modèle XXX d'Heisenberg en 1D

Le modèle XXX d'Heisenberg en 1D consiste en un réseau linéaire d'électrons avec couplage uniforme entre les voisins les plus proches (NN). Son Hamiltonien (qui correspond à la limite $\kappa = 0$ de l'éq. 7.2.7) est donné par

$$H = -\frac{J}{4} \sum_{i=1}^N (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - 1). \quad (4.1.1)$$

Notons que l'Hamiltonien commute avec $\hat{S}_T^z = \sum_{i=1}^N \sigma_i^z / 2$ et donc tout comme celui du modèle de Kawasaki, il préserve la magnétisation totale c'est-à-dire le nombre de spins up (ou inversement le nombre de spins down). Conséquemment, on peut diagonaliser l'Hamiltonien par blocs étiquetés par nombre quantique $S_T^z \in \{-N/2, -N/2 + 1, \dots, N/2 - 1, N/2\}$. Pour chaque valeur de S_T^z on a un espace d'Hilbert de dimension $\binom{N}{N/2 - S_T^z}$. Il est pratique de considérer chaque spin down comme une quasi-particule (dans ce cas-ci un magnon) et l'état avec tous ses spins *up* comme l'état du vide [46]. L'invariance sous translation, conséquence de la périodicité de la chaîne, détermine par elle-même les états du secteur à 1-magnon. En effet, les vecteurs propres de l'opérateur de translation forment une base complète pour le sous-espace à 1-magnon. Les vecteurs propres s'écrivent

$$|\psi_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikn} |n\rangle. \quad (4.1.2)$$

où $|n\rangle$ est l'état correspondant à la configuration dans laquelle le magnon est au $n^{\text{ième}}$ site avec nombre d'onde $k = 2\pi m/N$ et $m \in [0, N-1]$. On remarque ensuite que la fonction d'onde d'une seule quasi-particule ressemble à la fonction d'onde d'une particule libre sur un anneau : on a une onde plane de la forme $\exp(ikn)$ ainsi qu'une énergie :

$$E_m = 1 - \cos k \quad (4.1.3)$$

qui dépend du nombre d'onde k . De manière plus générale, on peut écrire les états du secteur à r magnons sous la forme

$$\sum_{1 \leq n_1 < n_2 < \dots < n_r \leq N} a(n_1, n_2, \dots, n_r) |n_1, n_2, \dots, n_r\rangle \quad (4.1.4)$$

où $n_i, i \in \{1, 2, \dots, r\}$ dénote la position du i -ème magnon. La recherche des solutions se réduit alors au calcul des coefficients $a(n_1, n_2, \dots, n_r)$. L'idée centrale de Bethe pour les états propres avec plus d'une quasi-particule fut de considérer les régions de l'espace de configuration où les quasi-particules sont séparées les unes des autres. Étant donné que l'interaction est à courte portée (NN), son ansatz présume que les quasi-particules dans ces régions n'interagissent pas du tout et peuvent être décrites par une superposition d'ondes planes. Par exemple dans le secteur à 2-magnons, Bethe suppose que

$$a(n_1, n_2) = Ae^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} + A'e^{i(k_1 n_2 + k_2 n_1)}. \quad (4.1.5)$$

En faisant correspondre les fonctions d'onde sur les interfaces entre ces régions, on obtient alors un système d'équations qu'on dénomme les équations de Bethe. Il s'agit ensuite de résoudre ce système d'équations. Ce travail est fait pour le modèle XXX d'Heisenberg de manière détaillée dans la revue de Karbach [9]. Pour l'analyse des solutions de type ondes de spin du modèle quantique de Kawasaki, la forme donnée à l'éq. 4.1.5 est trop restreinte et on optera plutôt pour l'ansatz suivant :

$$a(n_1, n_2) = e^{iK(n_1 + n_2)} g(n_2 - n_1) \quad (4.1.6)$$

où $K = m\pi/N$ est l'impulsion dans le centre de masse et $m = 0, 1, \dots, N-1$. Pour plus de détails, le lecteur est invité à lire la section 7.3 du chapitre 7.

Chapitre 5

Intégrabilité

La théorie des matrices aléatoires, RMT de l'anglais pour *Random Matrix Theory*, a été introduite au début des années 1950 par Eugene Wigner [47] pour étudier les noyaux lourds. Considérant que l'Hamiltonien d'un noyau lourd est si complexe que sa détermination complète est hors de portée, on suppose que l'opérateur en question peut être considéré comme représentant d'un ensemble statistique approprié. Ainsi, de manière analogue à la loi des grands nombres où la distribution de la somme d'un grand nombre de variables aléatoires, sous certaines conditions (par exemple variables indépendantes et identiquement distribuées) est une gaussienne, on trouve que le spectre d'un Hamiltonien suffisamment générique est bien approximé par le spectre moyen d'un ensemble statistique d'opérateurs [48]. Cette approximation a donné d'excellents résultats dans la description de nombreux phénomènes en physique nucléaire en particulier pour la distribution des niveaux d'énergie. Pour les systèmes quantiques à plusieurs corps, l'analyse RMT a été appliquée à la caractérisation du chaos quantique et à l'étude de l'intégrabilité [49]. En gros, les systèmes ayant autant de constantes de mouvement que de degrés de liberté sont dits intégrables. Les systèmes de spins quantiques intégrables sont exactement résolubles par l'ansatz de Bethe discuté au chapitre précédent. Dans la section 7.4 du chapitre 7, on étudie l'intégrabilité du modèle quantique de Kawasaki dans le contexte des matrices aléatoires. Pour ce faire, on a recourt à la conjecture de Berry-Tabor au sujet des statistiques des niveaux d'énergie qu'on présente ci-dessous.

5.1. Statistiques de niveaux d'énergie

L'analyse RMT ne s'applique pas à un seul Hamiltonien, mais plutôt à une famille d'Hamiltoniens agissant sur un certain espace d'Hilbert et qui impliquent certains paramètres. Ainsi, l'ensemble statistique ne dépend que des symétries du système physique sous considération. Par symétrie, on entendra pour faire simple un opérateur linéaire indépendant

des paramètres agissant sur le même espace d’Hilbert et qui commute avec la famille d’Hamiltoniens. L’ensemble de tels opérateurs forment une représentation de groupe. Supposant celle-ci complètement réductible, on pourra trouver une base dans laquelle l’Hamiltonien est bloc-diagonal, où chaque bloc définit un secteur indexé par des nombres quantiques. Évidemment, les états appartenant à différents secteurs ne sont pas corrélés et l’analyse doit être effectuée séparément dans chaque bloc. De manière plus pratique, on ne connaît pas nécessairement toutes les symétries et donc la diagonalisation par blocs demeure partielle [48]. Deux ensemble statistiques suffisent pour décrire les différents Hamiltoniens rencontrés. Pour les modèles intégrables quantiques où l’on a autant de constantes du mouvement (opérateurs qui commutent) que de degrés de liberté, il existe une base indépendante des paramètres dans laquelle l’Hamiltonien est diagonal. L’ensemble statistique consiste alors en l’ensemble RDE (*Random Diagonal matrix Ensemble*) de matrices diagonales avec des entrées indépendantes et aléatoires. Si la famille d’opérateurs peut être exprimée dans une base indépendante des paramètres où toutes les entrées de la matrice symétrique sont réelles alors la distribution de probabilité devrait être invariante sous transformation orthogonale. Si l’on exige également l’indépendance des entrées matricielles, on trouve l’ensemble orthogonal gaussien (GOE) qui est l’ensemble des matrices symétriques avec des entrées tirées d’une distribution gaussienne centrée et normalisée. Pour effectuer l’analyse RMT, il faut travailler avec le spectre déplié et désymétrisé. En effet, on peut écrire la densité d’états sous la forme suivante $P(s) = \text{régulier}(s) + \text{échelle} \times \text{universel}(s)$ où $P(s)$ est la probabilité que les énergies adjacentes aient un espacement s . La partie régulière dépend du modèle choisi alors que la partie universelle n’en dépend pas [48]. La forme possible de la distribution universelle est donnée par l’un des deux ensembles décrit dans ce paragraphe. La première étape de notre méthode est donc de calculer le spectre complet dans un secteur de symétrie donné correspondant aux nombres quantiques par exemple S_T^z et k dans le cas de la chaîne quantique de Kawasaki. Ensuite, le déroulement du spectre consiste à transformer les valeurs propres brutes en valeurs propres dépliées c’est-à-dire en valeurs propres ayant une densité locale d’états très proche de 1 partout dans le spectre. On définit la densité intégrée d’états comme

$$n(E) = \sum_{i=1}^N \theta(E - E_i) \quad (5.1.1)$$

où E_i sont les valeurs propres brutes, N le nombre de valeurs propres et $\theta(E)$ la fonction de Heaviside. On choisit alors des points d’échantillonnage régulièrement espacés $(E_i, n(E_i))$ pour $i = 1, 21, 41, \dots, N$ par exemple [50]. On peut alors approximer la moyenne de la densité intégrée d’états $\langle N(E_i) \rangle$ via une interpolation spline à travers ces points choisis. Ainsi, les valeurs propres dépliées sont définies comme $x_i = \langle N(E_i) \rangle$ et l’espacement entre plus proches voisins par $s_i = x_{i+1} - x_i$ [51]. Il ne reste ensuite qu’à comparer les spectres avec les distributions GOE et RDE (Poisson) selon la conjecture de Berry-Tabor.

5.2. Conjecture de Berry-Tabor

Selon la conjecture de Berry-Tabor, si un Hamiltonien est intégrable sa distribution de niveaux d'énergie sera une exponentielle négative correspondant à un processus de Poisson :

$$P_{\text{Poi}}(s) = \exp(-s). \quad (5.2.1)$$

En revanche, si le système n'est pas intégrable, le spectre présentera de la rigidité ainsi qu'une répulsion de niveaux d'énergies. Pour de tels systèmes ayant la symétrie de renversement dans le temps, la distribution des niveaux d'énergie sera alors de type distribution de Wigner correspondant à l'ensemble GOE :

$$P_{\text{Wig}}(s) = \frac{\pi s}{2} \exp\left(-\frac{\pi s^2}{4}\right). \quad (5.2.2)$$

On caractérise ainsi l'intégrabilité du système dans le chapitre 7 par le biais d'une combinaison linéaire normalisée de ces deux distributions :

$$\alpha P_{\text{Poi}}(s) + (1 - \alpha) P_{\text{Wig}}(s). \quad (5.2.3)$$

Chapitre 6

Modèles de Motzkin et Fredkin

De nombreux systèmes avec plusieurs corps en interaction sont beaucoup trop complexes pour se prêter à une étude analytique ou même numérique. Cependant, des modèles simples peuvent parfois suffire à déterminer des propriétés universelles ainsi que les lois de puissance observées en particulier dans le contexte des phénomènes critiques [7]. Cette universalité découle du fait que de nombreux systèmes sont connus pour être invariants sous changement d'échelle. En d'autres mots, quels que soient les détails microscopiques de l'interaction, ils semblent identiques sur une large gamme d'échelles de longueur et de temps. Ces notions s'appliquent non seulement aux systèmes en équilibre, mais aussi au comportement hors d'équilibre de processus aléatoires microscopiquement très différents. C'est donc intéressant d'examiner le comportement de ces modèles et de comprendre les relations possibles entre ces processus différents et leur caractérisation en termes de classes d'universalité. En particulier, on s'intéresse à l'exposant dynamique z présenté au chapitre 2. En gros, à grande échelle, cette quantité relie le comportement sous changement d'échelle dans la direction spatiale au changement d'échelle temporelle. Pour les systèmes dynamiques critiques, le changement d'échelle des coordonnées spatiales par un facteur λ joint à un changement d'échelle du temps par un facteur λ^z laissent les fonctions de corrélation invariantes à une amplitude globale près. Des quantités comme l'exposant dynamique sont universelles pour de tels systèmes. Dans ce chapitre, on considère les modèles de Motzkin ($S = 1$) et Fredkin ($S = 1/2$) qui démontrent des phénomènes similaires à ce qui est observé dans le modèle quantique de Kawasaki [20, 21, 52, 53]. En effet, ces deux chaînes de spin sans gap possèdent des dynamiques multiples à basse température ainsi qu'un exposant dynamique autour de 3.

6.1. Modèle de Motzkin

Selon les simulations DMRG (*Density Matrix Renormalization Group*) des dernières années [39], le modèle de Motzkin possède différents exposants dynamiques correspondants à diverses excitations. En particulier, l'exposant dynamique associé aux excitations sans *gap* à

basse énergie est ≥ 2 [20, 52] ce qui implique que le modèle ne peut être décrit par une théorie conforme des champs relativiste [38]. Dans le modèle de Motzkin, les échanges entre les spins $S = 1$ de la chaîne sont décrits à l'aide de termes d'interaction bilinéaires et biquadratiques. Son Hamiltonien est donné par :

$$H = \sum_j \Pi_{j,j+1} + H_\partial \quad (6.1.1)$$

où $\Pi_{j,j+1}$ est le terme du *bulk* qui correspond aux processus d'échange des plus proches voisins et est défini en termes de projecteurs :

$$\Pi_{j,j+1} = |D\rangle_{j,j+1} \langle D| + |U\rangle_{j,j+1} \langle U| + |V\rangle_{j,j+1} \langle V| \quad (6.1.2)$$

où

$$|D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0d\rangle + |d0\rangle), \quad |U\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0u\rangle + |u0\rangle), \quad |V\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |ud\rangle) \quad (6.1.3)$$

avec $|u\rangle \equiv |+1\rangle$, $|d\rangle \equiv |-1\rangle$ et $|0\rangle$ les vecteurs propres de l'opérateur S_j^z et avec comme terme de frontières $H_\partial = |d\rangle_1 \langle d| + |u\rangle_N \langle u|$ [38]. L'Hamiltonien est dit sans-frustration : l'état fondamental total est composé des états fondamentaux de chaque terme individuel de l'éq. 6.1.1. De plus, similairement au modèle quantique de Kawasaki, la chaîne de Motzkin a une symétrie $U(1)$ générée par \hat{S}_T^z .

6.2. Modèle de Fredkin

Le modèle de Fredkin a été introduit par Salberger et Korepin comme une généralisation du modèle de Motzkin de spin-1/2 [21, 53]. Son Hamiltonien est donné par

$$H = H_{bulk} + H_\partial = H_\partial + \sum_j H_j \quad (6.2.1)$$

où $H_\partial = |\downarrow\rangle_1 \langle \downarrow| + |\uparrow\rangle_N \langle \uparrow|$ et

$$H_j = (1 + \sigma_j^z)(1 - \vec{\sigma}_{j+1} \cdot \vec{\sigma}_{j+2}) + (1 - \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1})(1 - \sigma_{j+2}^z). \quad (6.2.2)$$

Cet Hamiltonien aussi est sans frustration et son terme de *bulk* peut être exprimé à l'aide de projecteurs :

$$H_j = |\uparrow\rangle_j \langle \uparrow| \otimes |S\rangle_{j+1,j+2} \langle S| + |S\rangle_{j,j+1} \langle S| \otimes |\uparrow\rangle_{j+2} \langle \uparrow| \quad (6.2.3)$$

où $|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$. Il décrit l'interaction de trois spins plus proches voisins sous deux échanges de spins : $|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \Leftrightarrow |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \Leftrightarrow |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$. Dans le langage de l'information quantique, ces processus sont désignés comme les portes de Fredkin. L'Hamiltonien possède aussi la symétrie $U(1)$ provenant de \hat{S}_T^z . Conséquemment, on peut diagonaliser l'Hamiltonien en blocs selon les secteurs de S_z^T . En particulier, on s'intéresse au continuum pour le secteur à 2 magnons. Pour ce faire, on résout d'abord le spectre à deux magnons du modèle de

Fredkin. Ensuite, on produit un graphique tel celui à la Fig. 6.1 des énergies du secteur à deux magnons en fonction de l'impulsion K dans la limite où $N \rightarrow \infty$, évaluée ici pour 200 sites. On définit la mesure de fidélité $F(\phi, \psi)$ comme étant la probabilité de mesurer l'état ψ dans la configuration ϕ . On quantifie cette fidélité à la Fig. 6.1 en fonction de la légende de couleur jointe en-dessous de la figure. On s'intéresse particulièrement aux états plus proches voisins (NN) et prochains plus proches voisins (NNN) :

$$|NN\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n_1} e^{iK(n_1+n_2)} |\uparrow \dots \uparrow \downarrow_{n_1} \downarrow_{n_2} \uparrow \dots \uparrow\rangle \quad ; \quad |NNN\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j_1} e^{iK(j_1+j_2)} |\uparrow \dots \uparrow \downarrow_{j_1} \uparrow \downarrow_{j_2} \uparrow \dots \uparrow\rangle, \quad (6.2.4)$$

où K est l'impulsion du centre de masse, $n_2 = n_1 + 1 \pmod{N}$ et $j_2 = j_1 + 2 \pmod{N}$. Pour chaque valeur propre de la figure de droite, on calcule la fidélité de l'état $|\psi\rangle$ correspondant en fonction de $|\phi\rangle = |NN\rangle$ tel que $F(NN, \psi) = \frac{1}{N} |\langle NN | \psi \rangle|^2$. De manière similaire à la figure de droite, on calcule $F(NNN, \psi) = \frac{1}{N} |\langle NNN | \psi \rangle|^2$. En général, les configurations à deux magnons correspondent à 4 parois de domaine. Cependant, les magnons sur les sites voisins ne correspondent qu'à 2 parois de domaine et nécessitent afin de se propager des états intermédiaires avec un plus grand nombre de parois de domaine impliquant une énergie plus élevée. Ainsi, les configurations de voisins les plus proches ont une énergie plus faible et survivent en tant qu'état lié. Par conséquent, comme on peut le voir dans la Fig. 1a du chapitre 7 pour le modèle XXX d'Heisenberg, les paires de magnons forment un continuum d'états de diffusion à deux magnons et une branche inférieure d'états liés à deux magnons. Pour le modèle quantique de Kawasaki avec interaction ferromagnétique, voir Fig. 7.1(b) du chapitre 7, on trouve une branche supérieure d'états NNN. Par contre, dans le cas du modèle de Fredkin comme l'illustre la Fig. 6.1 les deux branches sont caractérisées par un mélange des fidélités de type NN et NNN indiquant que les états ont une très haute probabilité d'être dans une configuration NN ou NNN.

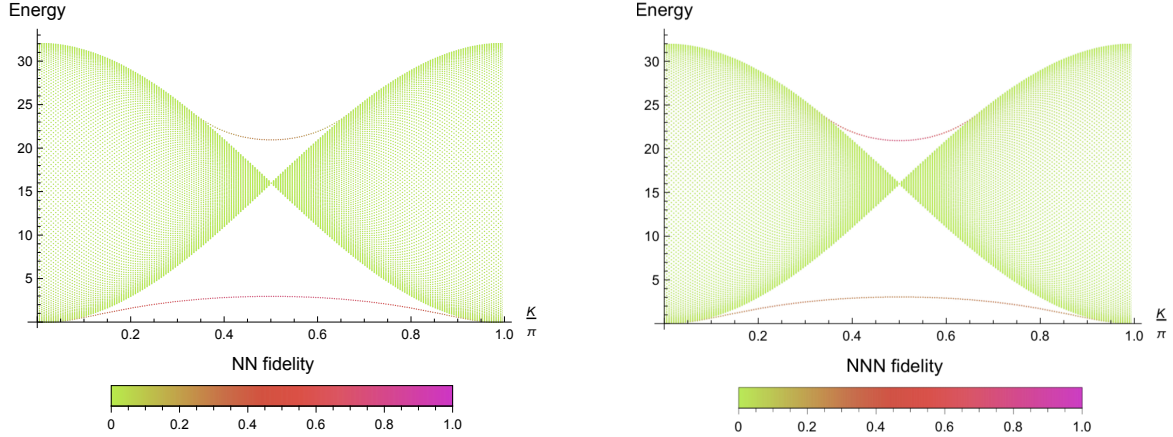


FIGURE 6.1. Excitations à deux magnons pour la chaîne de spins de Fredkin et $N = 200$ avec fidélité à sites plus proches voisins (NN) et prochains plus proches voisins (NNN) respectivement.

Bibliographie

- [1] I. Peschel and V. J. Emery. Calculation of spin correlations in two-dimensional ising systems from one-dimensional kinetic models. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 43(3) :241–249, 1981.
- [2] P. Ruján. Order and disorder lines in systems with competing interactions : I. Quantum spins at $T=0$. *Journal of Statistical Physics*, 29(2) :231–245, October 1982.
- [3] Paul Ruján. Exact disorder solutions. In N. Sanchez, editor, *Non-Linear Equations in Classical and Quantum Field Theory*, Lecture Notes in Physics, pages 286–300, Berlin, Heidelberg, 1985. Springer.
- [4] Marcelo D. Grynberg. Revisiting kawasaki dynamics in one dimension. *Physical Review E*, 82(5) :051121, Nov 2010.
- [5] C L Henley. From classical to quantum dynamics at rokhsar–kivelson points. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 16(11) :S891–S898, mar 2004.
- [6] S. V. Isakov, P. Fendley, A. W. W. Ludwig, S. Trebst, and M. Troyer. Dynamics at and near conformal quantum critical points. *Physical Review B*, 83(12), Mar 2011.
- [7] G.M. Schütz. 1 - exactly solvable models for many-body systems far from equilibrium. volume 19 of *Phase Transitions and Critical Phenomena*, pages 1–251. Academic Press, 2001.
- [8] Hans Bethe. Zur theorie der metalle. eigenwerte und eigenfunktionen der linearen atomkette. *Zeitschrift für Physik*, 71(3) :205–226, March 1931.
- [9] Michael Karbach and Gerhard Müller. Introduction to the bethe ansatz i. *Computers in Physics*, 11(1) :36, Jan 1997.

- [10] Stéphane Vinet, Gabriel Longpré, and William Witczak-Krempa. Excitations and ergodicity of critical quantum spin chains from non-equilibrium classical dynamics. 2021.
- [11] Pavel L. Krapivsky, Sidney Redner, and Eli Ben-Naim. *A Kinetic View of Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2010.
- [12] Ya'akov Achiam. Diffusion in the one-dimensional ising model. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 13(5) :1825–1833, may 1980.
- [13] David A. Huse. Corrections to late-stage behavior in spinodal decomposition : Lifshitz-slyozov scaling and monte carlo simulations. *Phys. Rev. B*, 34 :7845–7850, Dec 1986.
- [14] B. D. Gaulin. Kinetics of spinodal decomposition in one dimension. *Phys. Rev. B*, 38 :7184–7187, Oct 1988.
- [15] A. J. Bray. Exact renormalization-group results for domain-growth scaling in spinodal decomposition. *Phys. Rev. Lett.*, 63 :818–818, Aug 1989.
- [16] S.J. Cornell. *One-dimensional kinetic Ising models at low temperatures - critical dynamics, domain growth and freezing*. Cambridge University Press, 1996.
- [17] E. Ben-Naim and P. L. Krapivsky. Domain number distribution in the nonequilibrium ising model. *Journal of Statistical Physics*, 93(3) :583–601, 1998.
- [18] Claude Godrèche, Florent Krzaka a, and Federico Ricci-Tersenghi. Non-equilibrium critical dynamics of the ferromagnetic ising model with kawasaki dynamics. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2004(04) :P04007, may 2004.
- [19] Sergey Bravyi, Libor Caha, Ramis Movassagh, Daniel Nagaj, and Peter W. Shor. Criticality without frustration for quantum spin-1 chains. *Phys. Rev. Lett.*, 109 :207202, Nov 2012.
- [20] Ramis Movassagh and Peter W. Shor. Supercritical entanglement in local systems : Counterexample to the area law for quantum matter. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 113(47) :13278–13282, 2016.
- [21] Olof Salberger and Vladimir Korepin. *Fredkin Spin Chain*, pages 439–458. World Scientific, 2018.
- [22] Wilhelm Lenz. Contributions to the understanding of the magnetic properties in solids. *Physical Journal*, 21 :613–615, 1920.
- [23] Douglas Poland. The one-dimensional kinetic ising model : A series expansion study. *Journal of Statistical Physics*, 59(3) :935–967, 1990.
- [24] S. Redner. One-dimensional ising chain with competing interactions : Exact results and connection with other statistical models. *J Stat Phys*, 25 :15–23, 1981.
- [25] Jian Wang. Critical slowing down of the two-dimensional kinetic ising model with glauber dynamics. *Phys. Rev. B*, 47 :869–871, Jan 1993.
- [26] Jacques G. Amar, Francis E. Sullivan, and Raymond D. Mountain. Monte carlo study of growth in the two-dimensional spin-exchange kinetic ising model. *Phys. Rev. B*, 37 :196–208, Jan 1988.

- [27] M. K. Phani, Joel L. Lebowitz, M. H. Kalos, and O. Penrose. Kinetics of an order-disorder transition. *Phys. Rev. Lett.*, 45 :366–369, Aug 1980.
- [28] E. T. Gawłinski, Martin Grant, J. D. Gunton, and K. Kaski. Growth of unstable domains in the two-dimensional ising model. *Phys. Rev. B*, 31 :281–286, Jan 1985.
- [29] Roy J. Glauber. Time-dependent statistics of the ising model. *Journal of mathematical physics*, 4(2) :294, 1963.
- [30] Kyozi Kawasaki. Diffusion constants near the critical point for time-dependent ising models. i. *Physical Review*, 145(1) :224–230, May 1966.
- [31] Felix Ritort and Peter Sollich. Glassy dynamics of kinetically constrained models. *Advances in physics*, 2003.
- [32] Vladimir Privman. *Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension*. Cambridge University Press, 1997.
- [33] Daniel S. Fisher and David A. Huse. Nonequilibrium dynamics of spin glasses. *Phys. Rev. B*, 38 :373–385, Jul 1988.
- [34] A.J. Bray. Theory of phase-ordering kinetics. *Advances in Physics*, 43(3) :357–459, 1994.
- [35] Sushanta Dattagupta and Sanjay Puri. *Dissipative Phenomena in Condensed Matter*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004.
- [36] K. Kaski S.J. Cornell and R.B. Stinchcombe. Domain scaling and glassy dynamics in a one-dimensional kawasaki ising model.
- [37] Malte Henkel. *Conformal Invariance and Critical Phenomena*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1999.
- [38] Xiao Chen, Eduardo Fradkin, and William Witczak-Krempa. Gapless quantum spin chains : multiple dynamics and conformal wavefunctions. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 50(46) :464002, October 2017.
- [39] Xiao Chen, Eduardo Fradkin, and William Witczak-Krempa. Quantum spin chains with multiple dynamics. *Physical Review B*, 96(18), Nov 2017.
- [40] N.G. Van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. Elsevier, 2007.
- [41] Sergey Bravyi and Barbara Terhal. Complexity of stoquastic frustration-free hamiltonians. *Journal on Computing*, 39(4) :24, 2009.
- [42] Sergey Bravyi, David P. Divincenzo, Roberto Oliveira, and Barbara M. Terhal. The complexity of stoquastic local hamiltonian problems. *Quantum Info. Comput.*, 8(5) :361–385, May 2008.
- [43] Oskar Perron. Zur theorie der matrices. *Mathematische Annalen*, 64(2) :248–263, 1907.
- [44] Ueber matrizen aus nicht negativen elementen. *Sitzungsberichte der Königlich Preussischen Akademie der Wissenschaften*, pages 456–477, 1912.
- [45] Milad Marvian, Daniel A. Lidar, and Itay Hen. On the computational complexity of curing non-stoquastic hamiltonians. *Nat. Commun*, 10(1571), 2019.

- [46] Murray T. Batchelor. The bethe ansatz after 75 years. *Physics Today*, 60(1) :36, January 2007.
- [47] Eugene P. Wigner. Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions. *Annals of Mathematics Second Series*, pages 548–564, 1955.
- [48] J.-Ch. Anglès d’Auriac and J.-M. Maillard. Random matrix theory in lattice statistical mechanics. *Physica A*, pages 325–333, 2003.
- [49] Kazue Kudo and Tetsuo Deguchi. Level Statistics of XXZ Spin Chains with Discrete Symmetries : Analysis through Finite-size Effects. *Journal of the Physical Society of Japan*, 74(7) :1992–2000, July 2005.
- [50] Kazue Kudo and Tetsuo Deguchi. Level statistics of XXZ spin chains with a random magnetic field. *Physical Review B*, 69(13) :132404, Apr 2004.
- [51] Kazue Kudo and Tetsuo Deguchi. Unexpected non-wigner behavior in level-spacing distributions of next-nearest-neighbor coupled XXZ spin chains. *Physical Review B*, 68(5) :052510, Aug 2003.
- [52] Ramis Movassagh and Peter W. Shor. Power law violation of the area law in quantum spin chains. 2016.
- [53] Olof Salberger and Vladimir Korepin. Fredkin spin chain, 2016.

Chapitre 7

Excitations and ergodicity of critical quantum spin chains from non-equilibrium classical dynamics

Stéphane Vinet,¹ Gabriel Longpré,¹ William Witczak-Krempa,^{1,2,3}

¹*Département de physique, Université de Montréal, Montréal, Québec, H3C 3J7, Canada*

²*Centre de Recherches Mathématiques, Université de Montréal; P.O. Box 6128, Centre-ville Station; Montréal (Québec), H3C 3J7, Canada*

³*Regroupement Québécois sur les Matériaux de Pointe (RQMP)*

Article publié sur arXiv : <https://arxiv.org/pdf/2107.04615.pdf>.

Les résultats de la section 7.3 et de la section 7.4 ont été respectivement obtenus par SV et GL. Dans la section 7.2, SV est responsable pour la dérivation de l'Hamiltonien H' alors que GL a obtenu les états fondamentaux. Les sections 7.2-7.3 ont été rédigées par SV, la section 7.4 par GL. WWK a aussi contribué à la conception du problème, l'analyse et la mise en contexte des résultats et la rédaction de toutes les sections du papier.

7.1. Introduction

The exact correspondence between the non-equilibrium dynamics of certain classical systems and the dynamics of closed quantum systems has a rich history [1]. This classical-quantum duality follows from the fact that the Markov or Master equation can be mapped to a quantum Schrödinger equation in imaginary time. One can thus gain insights about the dynamics from either side of the correspondance. This has been used in the study of various systems, such as the non-equilibrium dynamics of particles or spins on the lattice, and, on the quantum side of the mapping, various quantum spin Hamiltonians including Heisenberg and XY models, as well as dimer models [1, 2, 3, 4]. One powerful application has been to use the integrability of certain quantum spin chains to solve the corresponding non-equilibrium classical dynamics [1]. Alternatively, one can generate new quantum Hamiltonians starting from classical dynamical models. This is the approach that we shall take in this work.

Our analysis begins with a canonical problem in non-equilibrium statistical mechanics : the non-equilibrium dynamics of a 1d classical Ising spin chain subject to Kawasaki (spin-preserving) dynamics. More precisely, the Ising chain couples to a thermal bath that allows anti-aligned neighboring spins to exchange positions. The corresponding quantum Hamiltonian is a spin-1/2 chain with a global U(1) symmetry, and contains up to 4-spin interactions. We shall refer to it as the *quantum Ising-Kawasaki chain*. In the limit of uniform Ising couplings (we also discuss the non uniform case), the quantum spin chain depends on a single parameter : βJ , the Ising coupling normalized by the temperature of the classical bath, $1/\beta$. This temperature does not correspond to a temperature in the quantum system, instead it simply determines the coupling of the quantum spin chain. The latter is studied as a closed quantum system evolving under unitary Hamiltonian evolution. The exact groundstates are simply obtained from the Boltzmann distribution of the classical Ising model ; the ground-state degeneracy is $N + 1$ corresponding to the different magnetization sectors for a chain of N sites. The 1-magnon excitations (where 1 spin is flipped in a ferromagnetic sea) are obtained exactly, and disperse quadratically at low wavenumbers. Combined with the analysis from previous works [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12], this leads us to conclude that the quantum spin chain, and corresponding non-equilibrium dynamics, host multiple dynamical critical exponents, one of them being $z = 2$. Next, we derive solutions for the two-magnon spectra via a Bethe Ansatz scheme. In the antiferromagnetic regime, the 2-magnon branch states show intricate behavior, especially regarding hybridization with the continuum. Next, we turn to the study of the entire eigenspectrum, and numerically analyze the energy level statistics using exact diagonalization on short chains, $N \leq 25$. We conclude that the system is non-integrable for generic values of βJ , or equivalently, that the corresponding non-equilibrium classical dynamics are ergodic as expected.

Interestingly, the quantum Ising-Kawasaki chain shows phenomena that are similar to certain frustration free quantum spin chains that were recently introduced with motivation from a quantum information perspective : the Motzkin [13, 14] and Fredkin [15] spin chains. Just like the Ising-Kawasaki chain, these gapless chains show multiple dynamics at low energy [16, 17]. Besides the rich dynamical and entanglement properties of these chains, it has been shown that the Motzkin chain realizes a local approximate quantum error correcting code in its ground space [18]. It would be interesting to study the Kawasaki chain from such a quantum information perspective.

The rest of the paper is organized as follows. In Section 7.2 we introduce the classical non-equilibrium model, and the resulting quantum Hamiltonian. We give its exact groundstates. In Section 7.3, turning to the uniform case, we find the 1- and 2-magnon excitations via the standard Bethe Ansatz. Among others, we show exactly that the dynamical critical exponent in those sectors is $z = 2$. In Section 7.4, we use exact diagonalization to determine the energy level spacing distribution for the entire spectrum. Our analysis shows that the system is non-integrable for generic βJ , which in turn implies that the classical Kawasaki dynamics are ergodic. We give a summary of our results and various extensions in Section 7.5.

7.2. The Model

As the Ising model is a static model in equilibrium, dynamical generalizations have been introduced notably by Glauber and Kawasaki [19, 20] in order to study relaxational processes near equilibrium. Glauber dynamics consists of single spin-flip processes while Kawasaki proposes a spin exchange for a pair of unequal spins. Kawasaki dynamics thus conserves the total magnetization. The quantum Kawasaki spin chain is obtained from the corresponding Markov operator [2], as we now discuss.

For a classical Ising chain of length N , a state is identified by a vector $\vec{s} \in \{-1, 1\}^N$. We generalize the analysis of [2] by working with non uniform couplings, for which the Ising energy reads

$$E_I(\vec{s}) = - \sum_{i=1}^N J_i s_i s_{i+1}, \quad (7.2.1)$$

where the coupling constant J_i is positive/negative for ferromagnetic/antiferromagnetic interactions. Assuming periodic boundary conditions, we have that $s_{N+1} = s_1$. In thermal equilibrium, the probability to find a state is given by its Boltzmann weight $P(\vec{s}) = e^{-\beta E_I(\vec{s})}/Z$, where $\beta = 1/(k_B T)$ is the inverse temperature of the heat bath and Z is the canonical partition function. After endowing the system with Kawasaki *non-equilibrium* dynamics, the evolution of the probability obeys the gain-loss equation [2] :

$$\partial_t P(\vec{s}, t) = \sum_{\vec{s}' \in \{-1, 1\}^N} [W(\vec{s}' \rightarrow \vec{s}) P(\vec{s}', t) - W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}') P(\vec{s}, t)], \quad (7.2.2)$$

which describes the evolution of the probability $P(\vec{s}, t)$ that the system will be in the state \vec{s} at time t . In order to derive all subsequent probability distributions from the action of an evolution operator on a given initial distribution, Eq. (7.2.2) can be viewed as the Schrödinger evolution in imaginary time of a pseudo-Hamiltonian such that $\partial_t |P(t)\rangle = -\hat{W} |P(t)\rangle$. Consequently, $|P(t)\rangle = e^{-\hat{W}t} |P(0)\rangle$, where $\hat{W} = \hat{W}_d + \hat{W}_{nd}$ whose diagonal and non-diagonal matrix entries are

$$\langle \vec{s}' | \hat{W}_d | \vec{s} \rangle = \sum_{\vec{s}' \neq \vec{s}} W(\vec{s}' \rightarrow \vec{s}) \quad \text{and} \quad \langle \vec{s}' | \hat{W}_{nd} | \vec{s} \rangle = -W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}'). \quad (7.2.3)$$

The dimensionless transition probability rate for a state configuration $|\vec{s}\rangle$ to evolve to $|\vec{s}'\rangle$ is taken to be

$$W(\vec{s} \rightarrow \vec{s}') = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{\beta}{2} \Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'} \right) \right], \quad (7.2.4)$$

where $|\vec{s}\rangle$ and $|\vec{s}'\rangle$ differ at most by a pair of nearest neighbor spins (NN), and $\Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'} = E_I(\vec{s}') - E_I(\vec{s})$ is the Ising energy difference between the two configurations [2, 20]. Using the z -axis in spin space as the quantization axis by promoting s_i variables to Pauli operators σ_i^z , the obtained Markov operator \hat{W} is real but not symmetric. The non-unitary similarity transformation $H' = M\hat{W}M^{-1}$, with

$$M = \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \kappa_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right), \quad (7.2.5)$$

where $\kappa_i = \beta J_i$, yields a self-adjoint Hamiltonian operator H' . It is important to note that H' and the Markov operator \hat{W} share the same eigenvalues. In addition, an eigenstate $|\psi\rangle$ of H' yields an eigenstate $M|\psi\rangle$ of \hat{W} . Under periodic boundary conditions (PBCs), we find that H' takes the following form :

$$\begin{aligned} H' = & - \sum_{i=1}^N \frac{(\cosh(\kappa_{i+1}) \cosh(\kappa_{i-1}) + \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+2}^z \sinh(\kappa_{i+1}) \sinh(\kappa_{i-1}))}{2(\cosh(2\kappa_{i+1}) + \cosh(2\kappa_{i-1}))} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) \\ & + \frac{1}{8} \sum_{i=1}^N [2 + (-2 - \tanh(\kappa_i + \kappa_{i-2}) - \tanh(\kappa_i - \kappa_{i-2}) - \tanh(\kappa_{i+2} + \kappa_i) + \tanh(\kappa_{i+2} - \kappa_i)) \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \\ & + (\tanh(\kappa_{i+1} + \kappa_{i-1}) + \tanh(\kappa_{i+1} - \kappa_{i-1}) + \tanh(\kappa_{i+2} + \kappa_i) - \tanh(\kappa_{i+2} - \kappa_i)) \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z], \end{aligned} \quad (7.2.6)$$

where the first line generates spin-flips, while the last are diagonal in the σ_i^z basis. We note that in the limit of infinite temperature, $\kappa_i = 0$, we recover the *uniform* ferromagnetic Heisenberg XXX Hamiltonian. This is because the individual values of the couplings J_i become unimportant compared to the large bath temperature $1/\beta$. In that limit, the dynamics simplify, and in fact become integrable. We shall see that this is not the case at finite β .

The Hamiltonian (7.2.6) is *stoquastic* in the standard σ_i^z basis. A Hamiltonian is stoquastic with respect to a given basis if it has only real nonpositive off-diagonal matrix elements in

that basis [21]. This can be readily seen from the non-diagonal term of Eq. (7.2.6) as its matrix elements $-\text{sech}(\kappa_{i+1} \pm \kappa_{i-1})/2$ are real and non-positive $\forall \kappa_i$. This implies that its ground states can be expressed as a classical probability distribution [22]. Furthermore, stoquastic Hamiltonians avoid the “sign problem” in quantum Monte Carlo (QMC) algorithms. In particular, the standard quantum-to-classical mapping used in QMC algorithms does not result in a partition function with Boltzmann weights taking negative or even complex values [23].

For uniform couplings, we find that Eq. (7.2.6) reduces to :

$$H = \gamma_\kappa \sum_{i=1}^N \left(1 + \delta_\kappa \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+2}^z\right) \left(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y\right) + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N \left[1 + \alpha_\kappa \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z - (1 + \alpha_\kappa) \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z\right], \quad (7.2.7)$$

where $\gamma_\kappa = -\frac{1}{8}(1 + \text{sech}(2\kappa))$, $\delta_\kappa = \tanh(\kappa)^2$, $\alpha_\kappa = \tanh(2\kappa)$, in agreement with [2].

7.2.1. Ground states

As the total spin is conserved in the interaction with the thermal bath, the resulting Hamiltonian (7.2.7) conserves total S_T^z (the spin symmetry is enlarged to $SU(2)$ at $\beta = \infty$). We thus have a thermodynamic equilibrium for every spin subsector. The $N + 1$ ground states of the Hamiltonian (7.2.7) are thus obtained by applying the nonunitary similarity transformation (7.2.5) to Ising equilibrium states in each of these subsectors.

At thermodynamic equilibrium, the probability of finding the Ising chain in a configuration \vec{s} is given by the Boltzmann distribution

$$\text{Prob}_{\text{eq}}(\vec{s}) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E_I(\vec{s})) = \frac{1}{Z} \exp\left(\sum_{i=1}^N \kappa_i s_i s_{i+1}\right). \quad (7.2.8)$$

Suppose the total spin $S_T^z = j$ for $j \in \{-N/2, -N/2 + 1, \dots, N/2 - 1, N/2\}$, the Ising thermal equilibrium state for the subsector \mathcal{S}_j can be mapped to the following (not normalized) quantum state

$$|P_{\text{eq},j}\rangle := \sum_{\vec{s} \in \mathcal{S}_j} \text{Prob}_{\text{eq}}(\vec{s}) |\vec{s}\rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\vec{s} \in \mathcal{S}_j} \exp(-\beta E_I(\vec{s})) |\vec{s}\rangle, \quad (7.2.9)$$

where $|\vec{s}\rangle$ is labelled by the σ_i^z eigenvalues. The ground state is then obtained by applying the transformation (7.2.5) to $|P_{\text{eq},j}\rangle$, and normalizing the result. Therefore the ground state of H for the subsector of total spin $S_T^z = j$ is

$$|\phi_{0,j}\rangle = \frac{M |P_{\text{eq},j}\rangle}{\langle P_{\text{eq},j} | M M | P_{\text{eq},j} \rangle^{1/2}} = \frac{1}{Z_j^{1/2}} \sum_{\vec{s} \in \mathcal{S}_j} \exp\left(-\frac{\beta}{2} E_I(\vec{s})\right) |\vec{s}\rangle \quad (7.2.10)$$

where $Z_j = \sum_{\vec{s} \in \mathcal{S}_j} \exp(-\beta E_I(\vec{s}))$ is the partition function restricted to the magnetization sector j . Up to an overall constant, each component or amplitude of the groundstate vector (7.2.10) is the square root of the amplitude appearing in the original equilibrium state $|P_{\text{eq},j}\rangle$.

We note that the ground state degeneracy is no longer $N + 1$ at $\beta = \infty$, i.e. as the bath temperature vanishes. The probability rate in Eq. (7.2.4) is zero for transitions that would raise the Ising energy ($\Delta E_{\vec{s}, \vec{s}'} > 0$). Consequently, the classical system will often get stuck in one of the many metastable states for which the only possible transitions would increase the energy. These states correspond to configurations in which each spin kink (domain wall) is separated by more than a nearest-neighbor distance from any other spin kink [5]. The quantum system is further constrained at low temperature by the non-unitary transformation M , which suppresses the energy lowering transitions, and leads to the conservation of the Ising energy $H_{\text{Ising}} = \sum_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z$, which is directly related to the domain-wall number $n_{\text{dw}} = \frac{1}{2}(N - H_{\text{Ising}})$. This is shown in Appendix A. These additional constraints at $\beta = \infty$ give rise to glassy dynamics. We find numerically for the quantum spin chain up to $N = 24$ that the number of ground states $g(N)$ of H at $\kappa = \infty$ is exactly given by

$$g(N) = \left(\frac{1 + \sqrt{5}}{2}\right)^N + |(N - 1 \bmod 6) - 2| + \lfloor \frac{N - 2}{3} \rfloor \bmod 2 \quad (7.2.11)$$

where $\frac{1+\sqrt{5}}{2}$ is the golden ratio, and $\lfloor x \rfloor$ corresponds to the floor, i.e. the greatest integer less than or equal to x . Given that Eq. (7.2.11) holds exactly for $N \leq 24$, we expect that it will hold for all N . Consequently, the ground state degeneracy grows exponentially as $(\frac{1+\sqrt{5}}{2})^N$ at large N , which is in accordance with the scaling of the number of stable configurations for the classical system [5, 24].

7.3. Spin wave solutions

In the remainder of the paper, we shall work with the case of uniform couplings $\kappa_i = \kappa$. The rotational symmetry about the z -axis in spin space implies that the total z -spin $S_T^z = \sum_{i=1}^N \sigma_i^z / 2$ is conserved. Consequently, the Hamiltonian matrix in Eq. (7.2.7) can be block diagonalized according to the total z -spin quantum number $S_T^z \in \{-N/2, -N/2 + 1, \dots, N/2 - 1, N/2\}$. Each of its values corresponds to an eigenspace \mathcal{S}_j of dimension $\binom{N}{N/2 - S_T^z}$. Therefore, the subsectors with $S_T^z = \pm N/2$ consist of a single eigenstate. In section 7.3, we consider the one and two magnon sectors namely $S_T^z = N/2 - 1$ and $S_T^z = N/2 - 2$.

7.3.1. One-magnon sector

For the $S_T^z = N/2 - 1$ sector, the translational symmetry allows for the complete diagonalization of the Hamiltonian. Consequently, the eigenvectors of the translation operator

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikn} |n\rangle, \quad (7.3.1)$$

where $|n\rangle$ is the state corresponding to the configuration in which the magnon is in the $n^{\text{th}} \in [1, N]$ site, with wavevector $k = 2\pi m/N$ and $m \in [0, N-1]$, are also eigenvectors of H whose eigenvalues are given by

$$E_m = 1 - \cos(2\pi m/N). \quad (7.3.2)$$

Setting $m = 0$, one recovers the corresponding ground state from the previous section. Eq. (7.3.1) is the well-studied single-magnon equation of the Heisenberg spin chain studied in [25, 26], among others, with a dynamical critical exponent of $z = 2$ and wavelength $\lambda = 2\pi/k$. Note that Eq. (7.3.2) is independent of κ since the Ising energy does not change as the magnon hops. It can also be seen in the coordinate Bethe ansatz formalism as

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N a(n) |n\rangle \quad (7.3.3)$$

where periodic boundary conditions impose $a(n) = a(n+N)$. The spin-flip component of the Hamiltonian applied onto the state $|n\rangle$ will yield a non-zero result when either $i = n$ or $i + 1 = n$:

$$(\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y) |n\rangle = 2 |n+1\rangle \quad (7.3.4a)$$

$$(\sigma_{n-1}^x \sigma_n^x + \sigma_{n-1}^y \sigma_n^y) |n\rangle = 2 |n-1\rangle. \quad (7.3.4b)$$

evaluating the remaining σ^z terms in the eigenvalue equation $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ one obtains

$$H \sum_{n=1}^N a(n) |n\rangle = \sum_{n=1}^N a(n) [2\gamma_\kappa(1 + \delta_\kappa)(|n+1\rangle + |n-1\rangle) + |n\rangle], \quad (7.3.5)$$

where $2\gamma_\kappa(1 + \delta_\kappa) = -\frac{1}{4}(1 + \text{sech}(2\kappa))(1 + \tanh(\kappa)^2) = -\frac{1}{2}$ thus the coupling dependence cancels out and we find the following condition for the coefficients $a(n)$:

$$2Ea(n) = 2a(n) - a(n-1) - a(n+1). \quad (7.3.6)$$

Consequently, in accordance with Eq. (7.3.1) we have that $a(n) = e^{ikn}$, as well as N linearly independent solutions of Eq. (7.3.6) obeying periodic boundary conditions for $e^{ik(n+N)} = e^{ikn}$.

7.3.2. Two-magnon sector

Analogously for $S_T^z = N/2 - 2$, we have in the two magnon sector

$$|\psi\rangle = \sum_{1 \leq n_1 < n_2 \leq N}^N a(n_1, n_2) |n_1, n_2\rangle \quad (7.3.7)$$

We work in the center of mass $K = k_1 + k_2$, with relative coordinate $j = n_2 - n_1$. Based on symmetry considerations, we use the following ansatz for the coefficients $a(n_1, n_2)$:

$$a(n_1, n_2) = e^{iK(n_1+n_2)}g(j) \quad (7.3.8)$$

where $K = m\pi/N$ is the momentum of the center of mass, $m = 0, 1, \dots, N-1$ and $g(j)$ a function of the number of lattice sites between the two excitations. PBC impose that $a(n_1, n_2) = a(n_2, n_1 + N)$ and so $e^{iKN}g(N-j) = g(j)$. We consequently obtain a periodic condition dependent on the parity of m as in the even case $g(j) = g(N-j)$ whereas in the odd case $g(j) = -g(N-j)$. For even N , these coefficients satisfy the following linear equations given by substituting Eq. (7.3.7) into the Schrödinger equation :

$$Eg(1) = (1 - \alpha_\kappa)g(1) + 4\gamma_\kappa(1 - \delta_\kappa) \cos(K)g(2) \quad (7.3.9)$$

$$Eg(2) = 4\gamma_\kappa(1 - \delta_\kappa) \cos(K)g(1) + (2 + \alpha_\kappa)g(2) - \cos(K)g(3) \quad (7.3.10)$$

$$Eg(j) = -\cos(K)[g(j-1) + g(j+1)] + 2g(j), \quad \text{for } 3 \leq j < N/2 \quad (7.3.11)$$

In the limiting case of Eq. (7.3.11) where the magnons are furthest apart $j = n_2 - n_1 = N/2$ we find that $g(j-1) = e^{im\pi}g(j+1)$ and so

$$Eg(N/2) = -2\cos(K)g(N/2-1) + 2g(N/2), \quad \text{for } m \text{ even} \quad (7.3.12a)$$

$$Eg(N/2) = 2g(N/2), \quad \text{for } m \text{ odd.} \quad (7.3.12b)$$

For an odd spin chain length the upper bound of j on Eq. (7.3.11) is reduced to $(N-1)/2$ and Eq. (7.3.12) is changed to

$$Eg\left(\frac{N-1}{2}\right) = -\cos(K)g\left(\frac{N-3}{2}\right) + (2 - \cos(K))g\left(\frac{N-1}{2}\right) \quad \text{for } m \text{ even} \quad (7.3.13a)$$

$$Eg\left(\frac{N-1}{2}\right) = -\cos(K)g\left(\frac{N-3}{2}\right) + (2 + \cos(K))g\left(\frac{N-1}{2}\right) \quad \text{for } m \text{ odd} \quad (7.3.13b)$$

One finds that Eq. (7.3.12b) is trivially satisfied by $E = 2$. This result would however yield an overcomplete set of nonorthogonal and nonstationary states. Removing the overcount, the remaining task is to solve the system of Eqs. (7.3.9)-(7.3.13) also known as the Bethe ansatz equations [27]. Note that we obtain particular equations for $g(1)$ and $g(2)$ corresponding to the nearest neighbor (NN) and next nearest neighbor (NNN) configurations which lead to distinct behavior and branch states in the two-magnon spectra. We explore this further in subsections 7.3.2.1 and 7.3.2.2 below. Additionally, we introduce the fidelity F as

$$F(\text{NN}, \psi) = \frac{1}{N} |\langle \text{NN} | \psi \rangle|^2, \quad (7.3.14)$$

where the NN state for a chain of N sites is defined as

$$|\text{NN}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n_1} e^{iK(n_1+n_2)} |\uparrow \dots \uparrow \downarrow_j \downarrow_{j+1} \uparrow \dots \uparrow\rangle, \quad (7.3.15)$$

where $n_2 = n_1 + 1 \pmod{N}$. It is defined as the probability to measure a given state $|\psi\rangle$ of momentum K and energy E in any bound state configuration corresponding to two excitations being nearest neighbors. These bound state configurations were previously theoretically studied in [28, 29, 30, 31, 32] and from an experimental point of view as well in [33, 34].

7.3.2.1. Ferromagnetic $J > 0$

A plot of the two-magnon energies versus wavevector K for $N = 200$ as obtained from the solutions of Eqs. (7.3.9)-(7.3.13) is shown in Fig. 7.1. The 19900 points in the range $0 \leq K \leq \pi$ produce a density plot for the two-magnon continuum which emerges in the limit $N \rightarrow \infty$ [26, 35]. The color scheme legend denoting the fidelity is also provided.

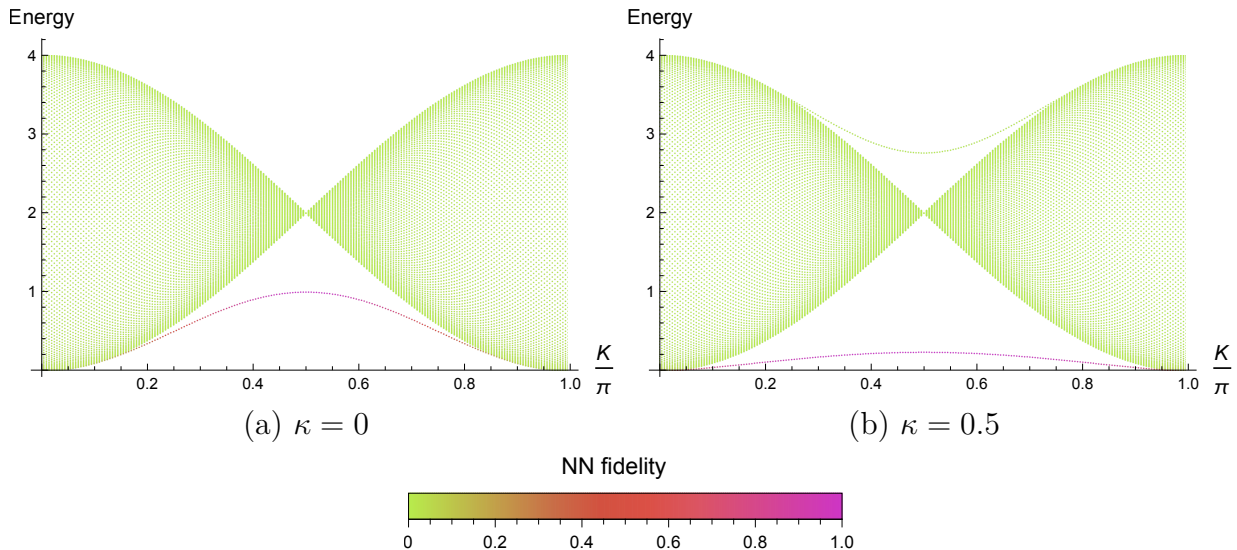


FIGURE 7.1. Two-magnon excitations and nearest neighbor fidelity of the ferromagnetic quantum Ising-Kawasaki spin chain with $N = 200$ for (a) $\kappa = 0$ and (b) $\kappa = 0.5$. For $\kappa = 0$ we recover the Heisenberg XXX known result [35].

We recover in Fig. 7.1(a) the Heisenberg XXX continuum when taking $\kappa = 0$ in accordance with Eq. (7.2.7). Generally, two-magnons configurations correspond to 4 domain walls. However, magnons on neighboring sites correspond to 2 domain walls and require intermediate states with a larger number of domain walls implying a higher energy in order to propagate. Thus nearest neighbor configurations have a lower energy and survive as a bound state. Consequently, as can be seen for the XXX Heisenberg model, pairs of magnons form a continuum of two-magnon scattering states and a lower branch of two magnon bound states [28, 29, 36, 37]. Additionally, in Fig. 7.1(b) we find an upper branch of states

separate from the continuum dominated by next-nearest neighbor excitations of the form $|\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle$. Consequently the lower and upper branches are respectively characterized by the Eqs. (7.3.9) and (7.3.10) for $g(1)$ and $g(2)$. The apex of each branch is found at $K = \pi/2$ as equations (7.3.9) and (7.3.10) are simplified to

$$(1 - \alpha_\kappa)g(1) = Eg(1) \quad (7.3.16)$$

$$(2 + \alpha_\kappa)g(2) = Eg(2). \quad (7.3.17)$$

The maximum of the lower branch of bound states decreases with increasing κ in the ferromagnetic case, and in the limit $\kappa \rightarrow \infty$, the bound states tend towards zero. Meanwhile, the behavior of the upper branch at large κ remains similar to what is seen in Fig. 7.1(b), with its minimum increasing to $E = 3$. The two-magnon spectrum in this limit is shown in Fig. 8(a) of Appendix A.

7.3.2.2. Antiferromagnetic $J < 0$

In the antiferromagnetic regime $\kappa < 0$, the branch states have a more intricate behavior as we now discuss. At $\kappa = 0$, we saw previously that the branch below the continuum corresponds to a bound state of the two magnons (high NN fidelity). As κ becomes negative, anti-alignment of spins is favored, implying that this branch is pushed to higher energies. In addition, a NNN branch appears, as for $\kappa > 0$. These phenomena can be seen in Fig. 7.2(a)-(b). However, in contrast to the ferromagnetic case, the NNN is now located below the continuum. As the κ becomes progressively more negative, the NNN branch shifts to lower energies, while the NN to higher energies. The inevitable collision between the two branches occurs at

$$\kappa_x = \frac{\operatorname{arctanh}(-1/2)}{2} = -\frac{\ln 3}{4} \approx -0.275, \quad (7.3.18)$$

as can be observed in Fig. 7.2(c). As $\kappa \rightarrow \kappa_x$, the bound state (NN) fidelity of the NNN branch states increases. At κ_x , we find that $(1 - \alpha_\kappa) = (2 + \alpha_\kappa)$, and so the energies found in Eqs. (7.3.16) and (7.3.17) are equal and the two branches cross at $K = \pi/2$. Additionally, the fidelity of the two branches becomes the same near the crossing, as can be seen in Fig. 7.2(c).

In the limit where $\kappa \rightarrow -\infty$, the bound state fidelity of the NNN branch states decreases back to 0 past κ_x . We also find that Eq. (7.3.9) becomes

$$2g(1) = Eg(1) \quad (7.3.19)$$

and the interaction term $4\gamma_\kappa(1 - \delta_\kappa)\cos(K)$ between the coupled Eqs. (7.3.9) and (7.3.10) tends to zero, meaning that we have a pure bound state not interacting with the continuum of energy $E = 2$ and fidelity 1 at every value of K . This is shown in Fig. 8(b) of Appendix A. Consequently, the NN branch states form the upper branch of the continuum in the antiferromagnetic regime past κ_x . This limit can be observed in Fig. 7.4.

We note that throughout Fig. 7.1 to 7.2 the bowtie form of the envelope of the continuum is unchanged implying that it is independent of κ . However, the states within the envelope evolve with κ . The coupling strength of the $g(1)$ dominated states, $|4\gamma_\kappa(1 - \delta_\kappa)|$, decreases with increasing $|\kappa|$ and conversely increases as $|\kappa|$ decreases as can be seen by the black line in Fig. 7.4. For strong interactions, the quasiparticle is pushed outside of the continuum as a consequence of level repulsion [38]. This is observed in Fig. 7.2(a). One would expect that as the interaction starts weakening, the bound state decays when encountering the continuum. It is indeed the case in Fig. 7.2(d). However as the coupling further decreases the bound state becomes longer lived throughout the continuum as can be seen in Fig. 7.3 and Fig. 7.8(b). In fact, the weaker interactions lead to a stronger NN fidelity and lower perturbation allowing for a penetration of the bound state branch through the continuum. Note that the NN fidelity observed in Fig. 7.2 is significantly lower due to a lower $|\kappa|$ leading to higher coupling in comparison with Fig. 7.3 and thus resulting in a faster decay of the branch states within the bulk of the continuum. This behaviour is particular to the antiferromagnetic regime as the bound state branch tends toward the center of the continuum at $E = 2$ with increasing fidelity in the $\kappa \rightarrow -\infty$ limit. In the ferromagnetic case, the bound state branch approaches $E = 0$ as $\kappa \rightarrow \infty$, so that the bound states remain below the continuum and no merger with the continuum occurs.

7.3.3. Dynamical critical exponents

The critical exponent of the 2-magnon sector can be easily deduced to be $z = 2$ from the quadratic shape of the envelope of the continuum, which holds for all values of the coupling κ . Note that this is the same critical exponent as obtained from Eq. (7.3.2) for the 1-magnon sector. This is also consistent with the critical exponent calculated by Grynberg for the entire spin chain with antiferromagnetic coupling $\kappa < 0$ in [2]. However, in the ferromagnetic case $\kappa > 0$, Grynberg numerically obtains a critical exponent dependent on κ . In particular, it ranges from $z \approx 2$ at small β , while in the limit where $\kappa \gg 1$ Grynberg finds $z \approx 3.1$ using exact diagonalization on short chains. This is consistent with the known results for classical Kawasaki dynamics at large β according to which $z = 3$ is the dominant critical exponent in sectors with small $|S_T^z|$ [9, 10, 11, 12]. We recall the basic argument here. When κ is large but finite, the system rapidly reaches a metastable state via energy conserving and lowering events. Then after a long time $e^{4\kappa}$, an energy raising event overcomes the local barrier, and the system can reach a lower metastable state. Eventually, this cascade leads to the ground state. The key process is the diffusion of a spin across a domain of opposite orientation, which can be alternatively seen as the slow diffusion of the entire domain [5, 6, 8, 7]. The diffusion coefficient scales as $D(\ell) = 1/\ell$ for a domain of length ℓ , which leads to a subdiffusive domain growth $\ell \sim t^{1/3}$. This translates to a dynamical

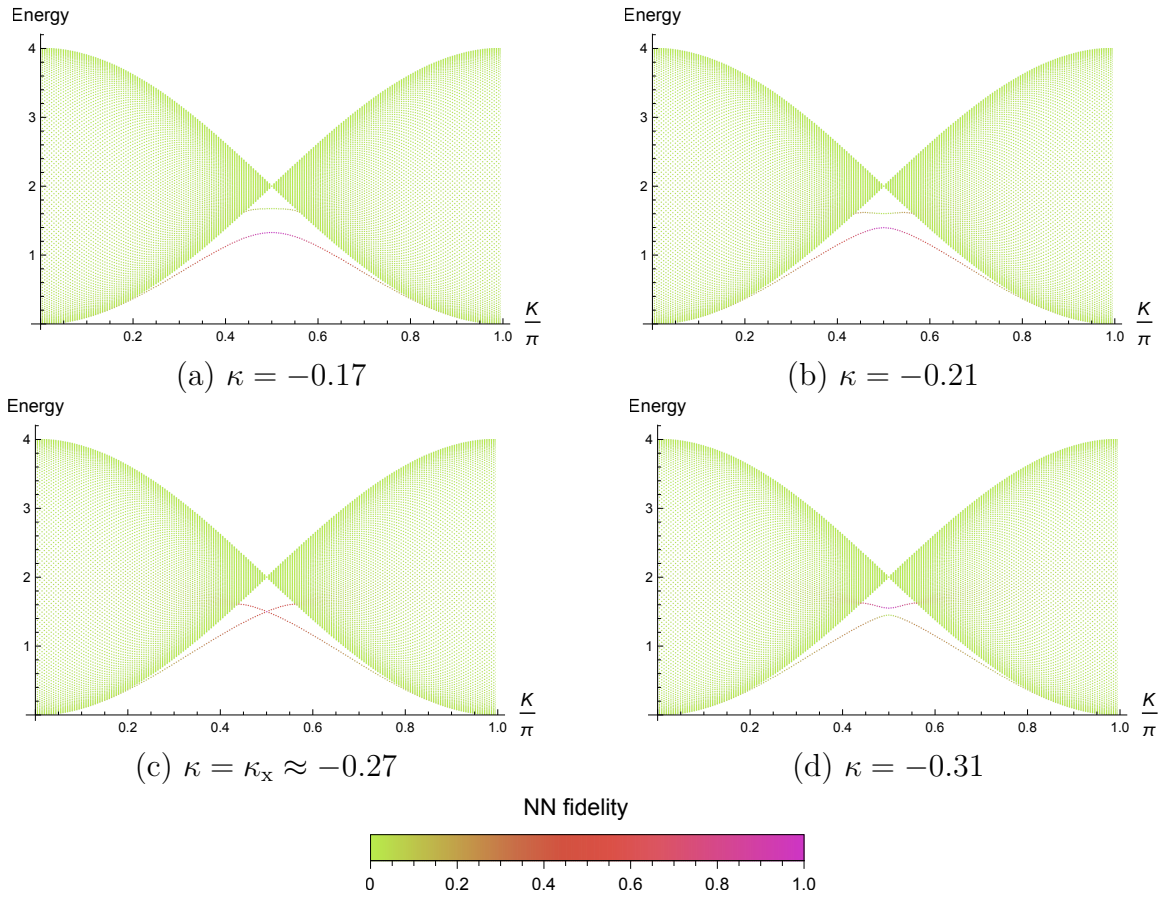


FIGURE 7.2. Two-magnon excitations and nearest neighbor fidelity for the antiferromagnetic quantum Ising-Kawasaki spin chain with $N = 200$ around κ_x .

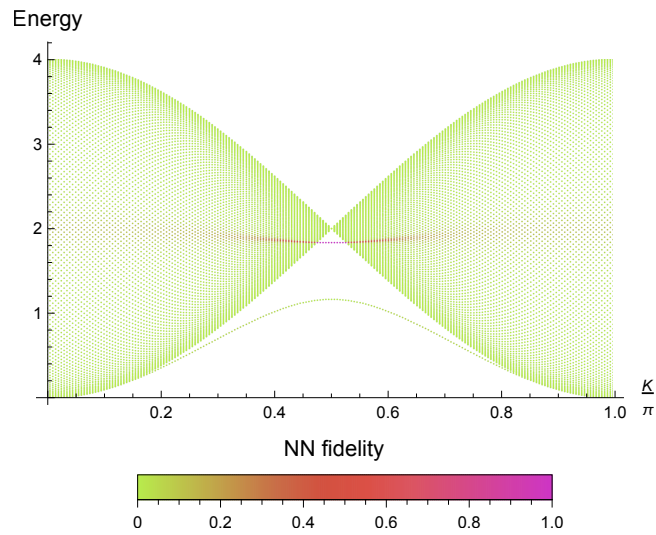


FIGURE 7.3. Two-magnon excitations and nearest neighbor fidelity for $N = 200$ and $\kappa = -0.6$.

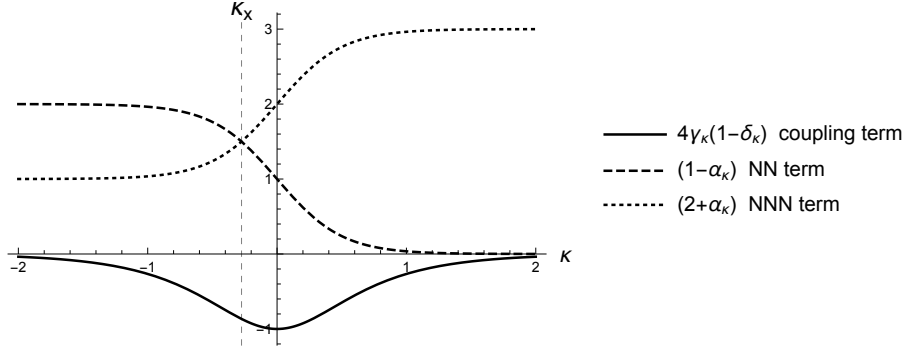


FIGURE 7.4. Nearest and next-nearest neighbor branch state energies for the two-magnon excitations at $K = \pi/2$ given by Eqs. (7.3.16,7.3.17). The crossing value where the Eqs. (7.3.16,7.3.17) have the same energy at κ_x is highlighted by the grey vertical dashed line. The solid black line shows the coupling term in Eqs. (7.3.9, 7.3.10).

critical exponent $z = 3$ (relating energy to wavevector $E \sim k^z$). We note that in the classical statistical mechanics literature, the dynamical exponent is often defined as the inverse of the above definition : $z_c = 1/z = 1/3$. We thus see that the quantum spin chain hosts both diffusive and subdiffusive modes at $\kappa > 0$, signalling the presence of multiple dynamics at low energy. Similar phenomena were encountered in the Motzkin and Fredkin quantum spin chains (and their deformations) [16, 17]. A dynamical critical exponent of $z = 3$ was also encountered in a different $S = 1/2$ quantum spin chain studied in the context of lattice supersymmetry [39, 40].

7.4. Energy Level Statistics

The level spacing distribution $P(s)$ is the probability that adjacent energies have spacing s . For the following analysis, we need to work with the unfolded and unsymmetrized spectrum. The unfolded spectrum is obtained by renormalizing the energies such that the local density of states is constant and equal to one. To do so, we first compute the full spectrum in a specified symmetry sector labeled by S_T^z and k as detailed in Appendices B and C. Then, the unfolding method presented in [41, 42] is followed to obtain the unfolded eigenvalues and their nearest neighbor level spacing s . We define the integrated density of states as $n(E) = \sum_{i=1}^D \theta(E - E_i)$, where θ is the Heaviside step function, D is the dimension of the symmetry sector and $\{E_i\}_{i=1}^D$ the energies. We then approximate its average $\langle n(E) \rangle$ via a spline interpolation through the evenly spaced sample points $(E_i, n(E_i))$ for $i \in \{1, 21, 41, \dots\}$. The size of the sample step here chosen to be 20 doesn't affect the results when far enough from 1 and D . The unfolded eigenvalues are then defined as $x_i = \langle n(E_i) \rangle$ and their nearest neighbor spacing $s_i = x_{i+1} - x_i$ [42, 41]. According to the Berry-Tabor conjecture [43, 44], if the system is integrable, the distribution will be a negative exponential

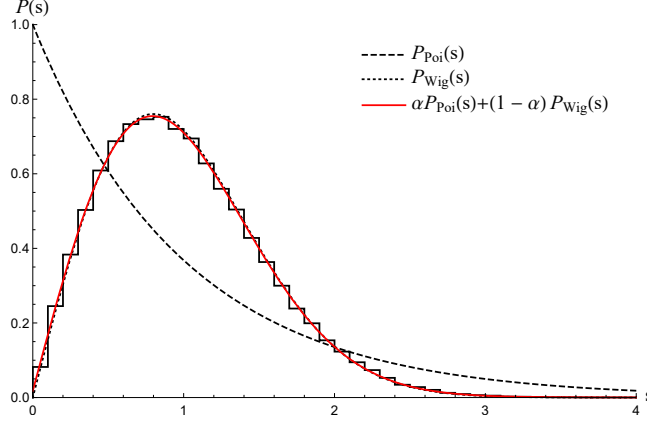


FIGURE 7.5. Level spacing distribution for $N = 24$, $\kappa = 0.5$ in the $S_T^z = 1$ and $k = 2\pi/24$ symmetry sector which has 104006 states. The dashed, dotted and plain red lines represent respectively the negative exponential distribution (7.4.1), the Wigner surmise (7.4.2), and the fit (7.4.3). The fit coefficient α value obtained is 0.02.

(7.4.1) describing a Poisson process :

$$P_{\text{Poi}}(s) = \exp(-s). \quad (7.4.1)$$

On the other hand, if it isn't integrable the spectrum will exhibit level repulsion and rigidity, and, for systems with time-reversal symmetry, the distribution will be the Wigner surmise (7.4.2) from the Gaussian orthogonal ensemble (GOE) of random matrix theory :

$$P_{\text{Wig}}(s) = \frac{\pi s}{2} \exp\left(-\frac{\pi s^2}{4}\right). \quad (7.4.2)$$

The distributions will be fitted with a normalized linear combination of the two distributions

$$\alpha P_{\text{Poi}}(s) + (1 - \alpha) P_{\text{Wig}}(s). \quad (7.4.3)$$

Figure 7.5 shows the distribution for the largest symmetry sector with $S_T^z \neq 0$ and $k \notin \{0, \pi\}$ for a chain of length $N = 24$. Very strong correspondence with the Wigner distribution is observed.

In the $k \in \{0, \pi\}$ symmetry sectors, an extra desymmetrization step is needed to account for the spatial inversion symmetry \hat{P} . Figure 7.6 shows the distributions for both reflection eigenvalues $P = \pm 1$ in the largest symmetry sector with spatial reflection symmetry ($k = 0$) for $N = 25$. Again, Wigner distributions are observed.

Spin reversal symmetry also implies that the spectrum for S_T^z is the same as the one for $-S_T^z$. Similarly, the spatial inversion symmetry implies that the spectrum for k is the same as the one for $-k$. Figure 7.7 shows the value of the fit coefficient α in each symmetry sector for $N = 20$ and $N = 21$. It is close to 0 in most cases, indicating Wigner behaviour. The same behaviour is observed for different values of κ in $[-1, -0.1]$ and $[0.1, 1]$ — the unfolding

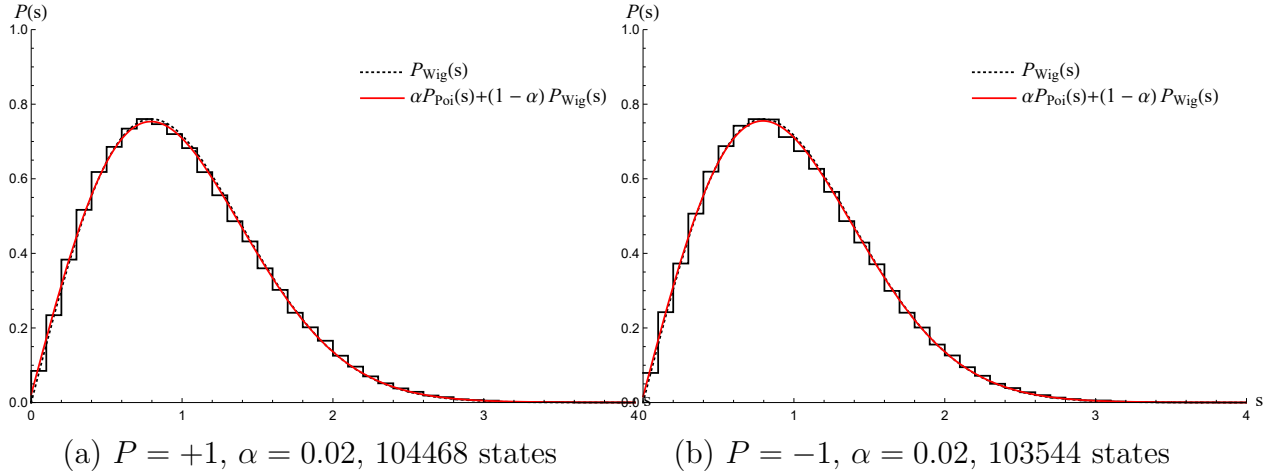


FIGURE 7.6. Level spacing distribution for $N = 25$, $\kappa = 0.5$ in the $S_T^z = 1/2$, $k = 0$ and $P = \pm 1$ symmetry sector.

method used isn't reliable for $|\kappa| < 0.1$ and $|\kappa| > 1$ since $n(E)$ becomes highly discontinuous near 0 and the difference between consecutive energies approaches the numerical precision. Therefore, our level spacing analysis suggests that the system isn't integrable for finite, non-zero κ . The value of α increases as S_T^z increases because there are less eigenvalues so the histogram is less smooth and the quality of the fit diminishes. The same behaviour is observed for $13 \leq N \leq 19$.

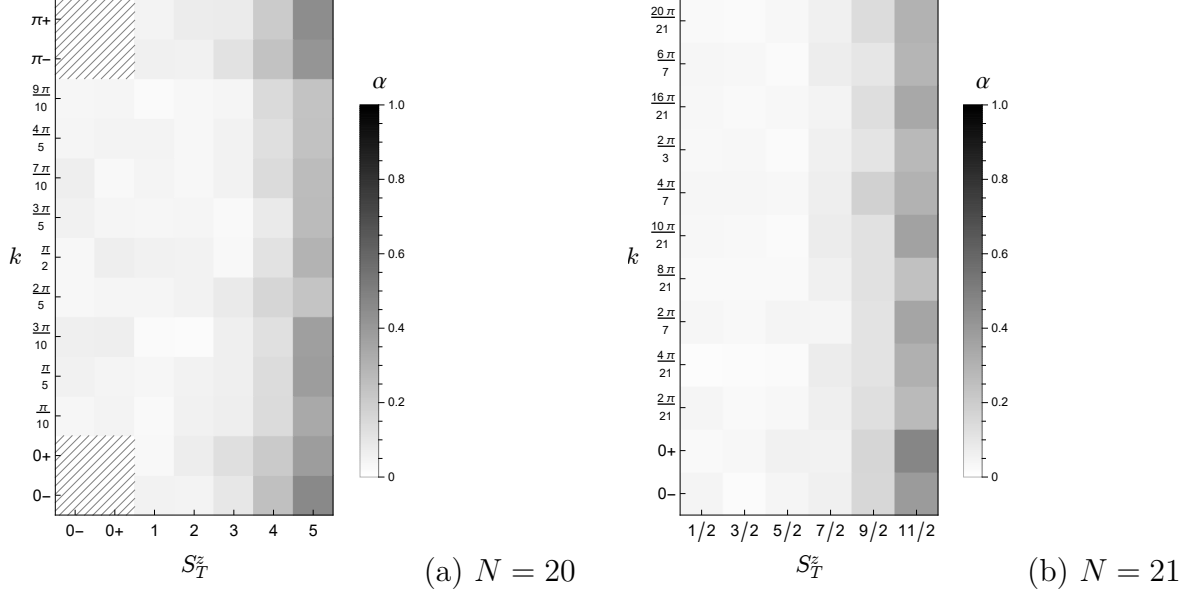


FIGURE 7.7. Fit coefficient α in each symmetry sector for $N = 20$ and $N = 21$ with $\kappa = 0.5$. Values of $\alpha = 0$ and 1 correspond respectively to Wigner and Poisson distributions, respectively. The symbols $0\pm$ and $\pi\pm$ on the momentum axis k designate the symmetry sectors with $P = \pm 1$ and respectively $k = 0$ and π . Similarly, the $0\pm$ on the total z-spin axis S_T^z designate the symmetry sectors with $\mathcal{T} = \pm 1$ and $S_T^z = 0$. Here \mathcal{T} corresponds to time-reversal. Sectors with $S_T^z \geq 6$ are not shown as they are too small (< 300) to produce a good histogram.

Our analysis allows us to conclude that the system is not integrable for generic value of $\kappa \neq 0, \pm \infty$. This applies equally to the Hamiltonian H and the Markov operator \hat{W} , as they share the same spectrum. Our conclusion is in agreement with the known results for non-equilibrium classical Kawasaki dynamics [5].

7.5. Conclusion

To summarize, we have studied a stoquastic quantum spin-1/2 chain dual to the non-equilibrium Kawasaki dynamics of a classical Ising chain coupled to a thermal bath. After deriving the corresponding Hamiltonian for non-uniform Ising couplings, we showed that the exact groundstates are obtained from the Boltzmann distribution of the classical Ising model via a nonunitary similarity transformation given in Eq. (7.2.5). Energy level spacing distributions have revealed the model to be non-integrable for finite uniform couplings $\kappa \neq 0$. Consequently, we find that the associated non-equilibrium classical dynamics are ergodic. The one and two magnon sectors exhibit a critical exponent $z = 2$, which differs from the value $z = 3$ obtained when $\kappa \gg 1$, thus suggesting the presence of multiple dynamics at low energy. For the two-magnon sector, there is peculiar behavior in the antiferromagnetic

regime past $\kappa_x = -\ln(3)/4$ as the nearest neighbor dominated branch crosses the NNN one, and starts penetrating the continuum. At $\beta = \infty$, the conservation of the Ising energy (i.e. domain wall number) leads to a multitude of frustrated states and the slowing down of the dynamics. Further work to understand the associated glassy dynamics is needed. It would also be interesting to generalize the analysis to the disordered case, as well as to higher dimensions.

From a quantum perspective, it would be interesting to examine the entanglement properties of the eigenstates. For example, one could study the quantum error correcting properties of its ground space, in the same spirit as was done for the Motzkin and other spin chains [18]. Further, given the conservation of spin, one could study the frequency-dependent spin conductivity as a function of the coupling κ , and of the temperature in the quantum system (not to be confused with the $1/\beta$ appearing in the coupling).

7.6. Acknowledgments

The authors thank X. Chen, N. Crampé, M. Knap and J. Feldmeier for insightful discussions. This work was funded by a Discovery Grant from NSERC, a Canada Research Chair, a grant from the Fondation Courtois, and a “Établissement de nouveaux chercheurs et de nouvelles chercheuses universitaires” grant from FRQNT. Simulations were performed on Calcul Québec’s and Compute Canada’s superclusters. GL is supported by a BESC M scholarship from NSERC and a B1X scholarship from FRQNT.

A. Two-magnon continuum at large $|\kappa|$

It can be shown that the commutator of the Hamiltonian H in Eq. (7.2.7) and the Ising energy $H_{\text{Ising}} = \sum_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z$ gives

$$[H, H_{\text{Ising}}] = 1 - \tanh^2 \kappa \quad (\text{A.1})$$

which is zero in the limit where $\kappa \rightarrow \pm\infty$. At $\beta = \infty$, this new conservation law strongly constrains the dynamics. For the two-magnon subsector, the interaction between the NN bound state and the continuum is also suppressed. In particular, we find that Eqs. (7.3.9,7.3.10) become

$$0 = Eg(1) \quad (\text{A.2})$$

$$3g(2) - \cos(K)g(3) = Eg(2) \quad (\text{A.3})$$

and thus we find a state ψ with $F(\text{NN}, \psi) = 1$ and $E = 0$ at every value of K in Fig. A. Similarly for $\kappa = -\infty$, $\delta_\kappa = 1$ and $\alpha_\kappa = -1$ and so Eqs. (7.3.9,7.3.10) now respectively become

$$2 = Eg(1) \quad (\text{A.4})$$

$$g(2) - \cos(K)g(3) = Eg(2) \quad (\text{A.5})$$

and we again find a state with $F(\text{NN}, \psi) = 1$ but with $E = 2$ for every value of K in Fig. A. The NNN branch in Fig. A is the reflection of the one in Fig. A about the $E = 2$ line.

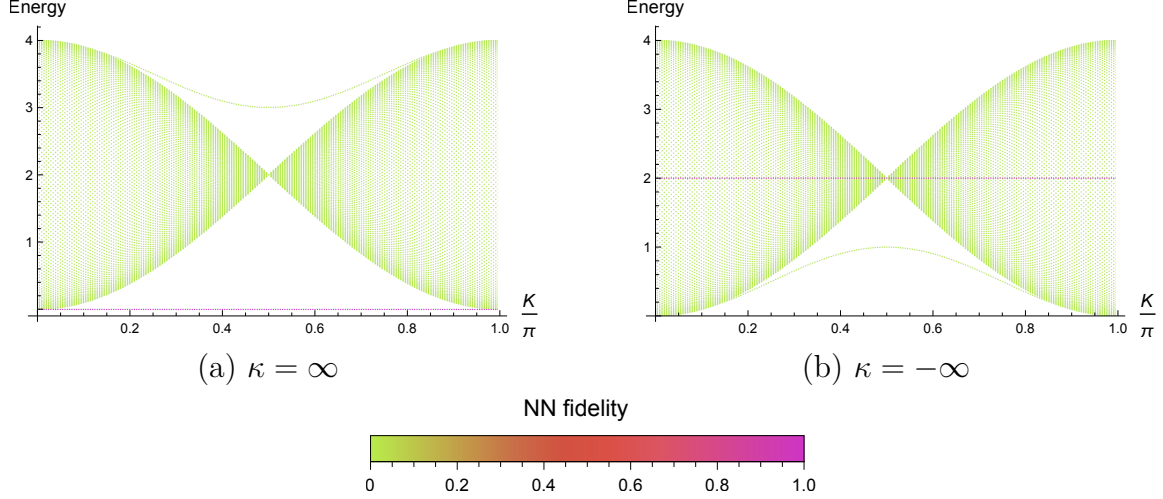


FIGURE .8. Two-magnon excitations and nearest neighbor fidelity for $N = 200$ and $\kappa = \pm\infty$ respectively in (a) and (b).

B. Bloch basis

The common eigenstates of S_T^z and the translation operator T_1 are the Bloch states which are given by

$$|\vec{s}, k_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{p}} \sum_{n=0}^{p-1} e^{in k_m} (T_1)^{-n} |\vec{s}\rangle, \quad (\text{B.1})$$

for $\vec{s} \in \{-1, 1\}^N$ and $m \in \{0, 1, \dots, N-1\}$ such that $pm/N \in \mathbb{N}$, where $k_m = 2\pi m/N$ is the momentum of the Bloch state and p is the period of the state $|\vec{s}\rangle$, i.e. the smallest integer $p > 0$ such that $T_1^p |\vec{s}\rangle = |\vec{s}\rangle$.

C. Numerical study of energy level spacings

Each state $|\vec{s}\rangle$ is stored as a binary number where each bit correspond to a site : 0 to \downarrow and 1 to \uparrow . For each orbit of T_1 we select the state \vec{s} with the lowest binary number as the representative of its Bloch state $|\vec{s}, k\rangle$. To allow parallel computation of the Hamiltonian matrix elements and eigenvalues on a computer cluster, the basis states representatives are block-cyclically distributed using BLACS NUMROC function.

Because the action of the Pauli operators on the Bloch states are not straightforward, to compute the Hamiltonian elements in the Bloch basis we use the following simplification :

$$\langle \vec{s}', k | H | \vec{s}, k \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{p'}} \sum_{n'=0}^{p'-1} e^{-in'k} \langle \vec{s}' | T_{-n'}^\dagger \right) H \left(\frac{1}{\sqrt{p}} \sum_{n=0}^{p-1} e^{in k} T_{-n} | \vec{s} \rangle \right) \quad (\text{C.1})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{pp'}} \sum_{n'=0}^{p'-1} \sum_{n=0}^{p-1} e^{i(n-n')k} \langle \vec{s}' | T_{n'-n} H | \vec{s} \rangle = \frac{1}{\sqrt{pp'}} \sum_{n=1-p'}^{p-1} \min(p' + n, p - n, p', p) e^{in k} \langle \vec{s}' | T_{-n} H | \vec{s} \rangle \quad (\text{C.2})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{pp'}} \sum_{i=1}^N \sum_{n=1-p'}^{p-1} \min(p' + n, p - n, p', p) e^{in k} \langle \vec{s}' | T_{-n} H_i | \vec{s} \rangle, \quad (\text{C.3})$$

where p and p' are the periods of the representatives \vec{s} and \vec{s}' , and

$$H_i = \gamma_\kappa \left(1 + \delta_\kappa \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+2}^z \right) \left(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y \right) + \frac{1}{4} \left[1 + \alpha_\kappa \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z - (1 + \alpha_\kappa) \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right]. \quad (\text{C.4})$$

To compute $\langle \vec{s}' | T_{-n} H_i | \vec{s} \rangle$ efficiently, bitwise operations on the binary numbers representing $|\vec{s}\rangle$ and $|\vec{s}'\rangle$ are used.

Finally, all the eigenvalues of the block-cyclically distributed Hamiltonian matrix are found using the PZHEEV subroutine from ScaLAPACK.

C.1. Finite-size scaling

As the chains get longer, the dimension of the sectors increases. Hence, the histogram of their level spacing distribution smoothens out and gets closer to the Wigner surmise. This can be seen in Fig. .9 where we see how α decreases with N . It suggests that the distribution tends to the Wigner surmise in the $N \rightarrow \infty$ limit.

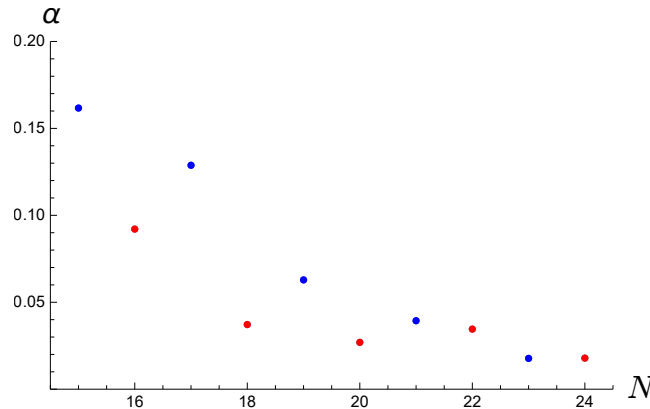


FIGURE .9. Fit coefficient α for increasing chain lengths N in the lowest strictly positive S_T^z and $k = 2\pi/N$ sectors. Blue dots have odd N and $S_T^z = 1/2$. Red dots have even N and $S_T^z = 1$.

Bibliographie

- [1] G.M. Schütz. 1 - exactly solvable models for many-body systems far from equilibrium. volume 19 of *Phase Transitions and Critical Phenomena*, pages 1–251. Academic Press, 2001.
- [2] Marcelo D. Grynberg. Revisiting kawasaki dynamics in one dimension. *Physical Review E*, 82(5) :051121, Nov 2010.
- [3] C L Henley. From classical to quantum dynamics at rokhsar–kivelson points. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 16(11) :S891–S898, mar 2004.
- [4] S. V. Isakov, P. Fendley, A. W. W. Ludwig, S. Trebst, and M. Troyer. Dynamics at and near conformal quantum critical points. *Physical Review B*, 83(12), Mar 2011.
- [5] Pavel L. Krapivsky, Sidney Redner, and Eli Ben-Naim. *A Kinetic View of Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2010.
- [6] S.J. Cornell. *One-dimensional kinetic Ising models at low temperatures - critical dynamics, domain growth and freezing*. Cambridge University Press, 1996.
- [7] Claude Godrèche, Florent Krzaka a, and Federico Ricci-Tersenghi. Non-equilibrium critical dynamics of the ferromagnetic ising model with kawasaki dynamics. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2004(04) :P04007, may 2004.
- [8] E. Ben-Naim and P. L. Krapivsky. Domain number distribution in the nonequilibrium ising model. *Journal of Statistical Physics*, 93(3) :583–601, 1998.
- [9] Ya'akov Achiam. Diffusion in the one-dimensional ising model. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 13(5) :1825–1833, may 1980.
- [10] David A. Huse. Corrections to late-stage behavior in spinodal decomposition : Lifshitz-slyozov scaling and monte carlo simulations. *Phys. Rev. B*, 34 :7845–7850, Dec 1986.
- [11] B. D. Gaulin. Kinetics of spinodal decomposition in one dimension. *Phys. Rev. B*, 38 :7184–7187, Oct 1988.
- [12] A. J. Bray. Exact renormalization-group results for domain-growth scaling in spinodal decomposition. *Phys. Rev. Lett.*, 63 :818–818, Aug 1989.
- [13] Sergey Bravyi, Libor Caha, Ramis Movassagh, Daniel Nagaj, and Peter W. Shor. Criticality without frustration for quantum spin-1 chains. *Phys. Rev. Lett.*, 109 :207202, Nov 2012.
- [14] Ramis Movassagh and Peter W. Shor. Supercritical entanglement in local systems : Counterexample to the area law for quantum matter. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 113(47) :13278–13282, 2016.
- [15] Olof Salberger and Vladimir Korepin. *Fredkin Spin Chain*, pages 439–458. World Scientific, 2018.
- [16] Xiao Chen, Eduardo Fradkin, and William Witczak-Krempa. Quantum spin chains with multiple dynamics. *Physical Review B*, 96(18), Nov 2017.

- [17] Xiao Chen, Eduardo Fradkin, and William Witczak-Krempa. Gapless quantum spin chains : multiple dynamics and conformal wavefunctions. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 50(46) :464002, October 2017.
- [18] Fernando G.S.L. Brandão, Elizabeth Crosson, M. Burak Şahinoğlu, and John Bowen. Quantum error correcting codes in eigenstates of translation-invariant spin chains. *Physical Review Letters*, 123(11), Sep 2019.
- [19] Roy J. Glauber. Time-dependent statistics of the ising model. *Journal of mathematical physics*, 4(2) :294, 1963.
- [20] Kyozi Kawasaki. Diffusion constants near the critical point for time-dependent ising models. i. *Physical Review*, 145(1) :224–230, May 1966.
- [21] Sergey Bravyi and Barbara Terhal. Complexity of stoquastic frustration-free hamiltonians. *Journal on Computing*, 39(4) :24, 2009.
- [22] Sergey Bravyi, David P. Divincenzo, Roberto Oliveira, and Barbara M. Terhal. The complexity of stoquastic local hamiltonian problems. *Quantum Info. Comput.*, 8(5) :361–385, May 2008.
- [23] Milad Marvian, Daniel A. Lidar, and Itay Hen. On the computational complexity of curing non-stoquastic hamiltonians. *Nat. Commun*, 10(1571), 2019.
- [24] S. Redner. One-dimensional ising chain with competing interactions : Exact results and connection with other statistical models. *J Stat Phys*, 25 :15–23, 1981.
- [25] Hans Bethe. Zur theorie der metalle. eigenwerte und eigenfunktionen der linearen atomkette. *Zeitschrift für Physik*, 71(3) :205–226, March 1931.
- [26] Michael Karbach and Gerhard Müller. Introduction to the bethe ansatz i. *Computers in Physics*, 11(1) :36, Jan 1997.
- [27] Murray T. Batchelor. The bethe ansatz after 75 years. *Physics Today*, 60(1) :36, January 2007.
- [28] Jan Mölter, Thomas Barthel, Ulrich Schollwöck, and Vincenzo Alba. Bound states and entanglement in the excited states of quantum spin chains. *Journal of Statistical Mechanics*, 2014(10) :P10029, October 2014.
- [29] Jean Hanus. Bound states in the heisenberg ferromagnet. *Physical Review Letters*, 11(7) :336–338, Oct 1963.
- [30] H. C. Fogedby. The spectrum of the continuous isotropic quantum heisenberg chain : quantum solitons as magnon bound states. *Journal of Physics C*, 13(9) :L195–L200, Mar 1980.
- [31] Masanori Kohno. Dynamically dominant excitations of string solutions in the spin-1/2 antiferromagnetic heisenberg chain in a magnetic field. *Physical Review Letters*, 102(3) :037203, Jan 2009.
- [32] Martin Ganahl, Elias Rabel, Fabian H. L. Essler, and H. G. Evertz. Observation of complex bound states in the spin-1/2 heisenberg XXZ chain using local quantum quenches.

- Physical Review Letters*, 108(7) :077206, Feb 2012.
- [33] E. Haller, M. Gustavsson, M. J. Mark, J. G. Danzl, R. Hart, G. Pupillo, and H.-C. Nagerl. Realization of an excited, strongly correlated quantum gas phase. *Science*, 325(5945) :1224–1227, Sep 2009.
- [34] Takeshi Fukuhara, Peter Schauß, Manuel Endres, Sebastian Hild, Marc Cheneau, Immanuel Bloch, and Christian Gross. Microscopic observation of magnon bound states and their dynamics. *Nature*, 502(7469) :76–79, Sep 2013.
- [35] A. Ceulemans, S. Cojocaru, and L.F. Chibotaru. Finite size corrections within the continuum limit for quantum spins : two-magnon bound states in 1d heisenberg ferromagnet. *The European Physical Journal B*, 21(4) :511–519, Jun 2001.
- [36] H.J. Mikeska and A.K. Kolezhuk. *Quantum Magnetism*, volume 645. Springer, 2004.
- [37] Michael Wortis. Bound states of two spin waves in the heisenberg ferromagnet. *Physical Review*, 132(1) :85–97, Oct 1963.
- [38] Ruben Verresen, Roderich Moessner, and Frank Pollmann. Avoided quasiparticle decay from strong quantum interactions. *Nat. Phys.*, 15 :750–753, 2019.
- [39] Noriaki Sannomiya and Hosho Katsura. Supersymmetry breaking and nambu-goldstone fermions in interacting majorana chains. *Physical Review D*, 99(4), Feb 2019.
- [40] Edward O’Brien and Paul Fendley. Lattice supersymmetry and order-disorder coexistence in the tricritical ising model. *Physical Review Letters*, 120(20), May 2018.
- [41] Kazue Kudo and Tetsuo Deguchi. Level statistics of XXZ spin chains with a random magnetic field. *Physical Review B*, 69(13) :132404, Apr 2004.
- [42] Kazue Kudo and Tetsuo Deguchi. Unexpected non-wigner behavior in level-spacing distributions of next-nearest-neighbor coupled XXZ spin chains. *Physical Review B*, 68(5) :052510, Aug 2003.
- [43] Michael Victor Berry and Michael Tabor. Level clustering in the regular spectrum. *Proceedings of the Royal Society of London. A*, 356(1686) :375–394, September 1977.
- [44] O. Bohigas, M. J. Giannoni, and C. Schmit. Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation Laws. *Physical Review Letters*, 52(1) :1–4, January 1984.

Chapitre 8

Conclusions

En résumé, nous avons étudié une chaîne quantique de spins-1/2 duale à la dynamique de Kawasaki hors équilibre d'une chaîne d'Ising classique couplée à un bain thermique. Après avoir dérivé au chapitre 3 l'Hamiltonien générique avec couplages et champs magnétiques non-uniformes, nous avons montré que les états fondamentaux exacts de l'Hamiltonien avec champs magnétiques nuls sont obtenus à partir de la distribution de Boltzmann du modèle d'Ising classique via une transformation de similarité non unitaire donnée par l'équation 7.2.5. Pour des couplages d'Ising finis et constants, les secteurs à un et deux magnons présentent un exposant critique $z = 2$ et diffèrent donc de la valeur $z = 3$ obtenue lorsque $\kappa \gg 1$ au chapitre 2, suggérant ainsi la présence de dynamiques multiples à basse énergie. Il serait intéressant d'étudier le système quantique de Kawasaki avec des conditions aux frontières ouvertes via la méthode DMRG afin de voir si l'exposant critique $z = 3$ reste dominant pour de très longues chaînes $N \gg 1$. Étant donné que les domaines de spins deviendraient alors énormes, il serait possible que les conditions aux frontières affectent la dynamique de sorte que l'on n'obtienne que de la diffusion pure c'est-à-dire $z = 2$. Ceci indiquerait que l'exposant critique $z = 3$ dépend alors des conditions frontières. Pour le secteur à deux magnons, on observe un comportement particulier dans le régime antiferromagnétique au-delà de $\kappa_x = -\ln(3)/4$, où la branche dominée par les plus proches voisins (NN) croise la branche NNN et commence à pénétrer dans le continuum. De plus, les distributions d'espacement des niveaux d'énergie révèlent que le modèle est non intégrable pour des couplages uniformes finis $\kappa \neq 0$. À $\beta = \infty$, la conservation de l'énergie d'Ising mène à une multitude d'états frustrés et au ralentissement de la dynamique. Des travaux afin de mieux comprendre la fragmentation de l'espace d'Hilbert et la dynamique vitreuse associée sont en cours. Il serait également intéressant de généraliser l'analyse au cas désordonné, ainsi que de considérer la dynamique de Kawasaki en dimensions supérieures ($d \geq 2$). Une autre piste de recherche possible serait d'approfondir la comparaison avec les modèles de Motzkin et Fredkin en examinant le modèle quantique de Kawasaki du point de vue de l'information quantique, en

effet, il serait intéressant d'étudier par exemple les propriétés d'intrication des états propres et les possibilités qu'offre le fondamental pour réaliser des corrections d'erreurs quantiques [55].

Bibliographie

- [1] A. Ceulemans, S. Cojocaru, and L.F. Chibotaru. Finite size corrections within the continuum limit for quantum spins : two-magnon bound states in 1d heisenberg ferromagnet. *The European Physical Journal B*, 21(4) :511–519, Jun 2001.
- [2] I. Peschel and V. J. Emery. Calculation of spin correlations in two-dimensional ising systems from one-dimensional kinetic models. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 43(3) :241–249, 1981.
- [3] P. Ruján. Order and disorder lines in systems with competing interactions : I. Quantum spins at $T=0$. *Journal of Statistical Physics*, 29(2) :231–245, October 1982.
- [4] Paul Ruján. Exact disorder solutions. In N. Sanchez, editor, *Non-Linear Equations in Classical and Quantum Field Theory*, Lecture Notes in Physics, pages 286–300, Berlin, Heidelberg, 1985. Springer.
- [5] Marcelo D. Grynberg. Revisiting kawasaki dynamics in one dimension. *Physical Review E*, 82(5) :051121, Nov 2010.
- [6] C L Henley. From classical to quantum dynamics at rokhsar–kivelson points. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 16(11) :S891–S898, mar 2004.
- [7] S. V. Isakov, P. Fendley, A. W. W. Ludwig, S. Trebst, and M. Troyer. Dynamics at and near conformal quantum critical points. *Physical Review B*, 83(12), Mar 2011.
- [8] G.M. Schütz. 1 - exactly solvable models for many-body systems far from equilibrium. volume 19 of *Phase Transitions and Critical Phenomena*, pages 1–251. Academic Press, 2001.
- [9] Hans Bethe. Zur theorie der metalle. eigenwerte und eigenfunktionen der linearen atomkette. *Zeitschrift für Physik*, 71(3) :205–226, March 1931.
- [10] Michael Karbach and Gerhard Müller. Introduction to the bethe ansatz i. *Computers in Physics*, 11(1) :36, Jan 1997.
- [11] Stéphane Vinet, Gabriel Longpré, and William Witczak-Krempa. Excitations and ergodicity of critical quantum spin chains from non-equilibrium classical dynamics. 2021.
- [12] Pavel L. Krapivsky, Sidney Redner, and Eli Ben-Naim. *A Kinetic View of Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2010.
- [13] Ya'akov Achiam. Diffusion in the one-dimensional ising model. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 13(5) :1825–1833, may 1980.
- [14] David A. Huse. Corrections to late-stage behavior in spinodal decomposition : Lifshitz-slyozov scaling and monte carlo simulations. *Phys. Rev. B*, 34 :7845–7850, Dec 1986.
- [15] B. D. Gaulin. Kinetics of spinodal decomposition in one dimension. *Phys. Rev. B*, 38 :7184–7187, Oct 1988.
- [16] A. J. Bray. Exact renormalization-group results for domain-growth scaling in spinodal decomposition. *Phys. Rev. Lett.*, 63 :818–818, Aug 1989.

- [17] S.J. Cornell. *One-dimensional kinetic Ising models at low temperatures - critical dynamics, domain growth and freezing*. Cambridge University Press, 1996.
- [18] E. Ben-Naim and P. L. Krapivsky. Domain number distribution in the nonequilibrium ising model. *Journal of Statistical Physics*, 93(3) :583–601, 1998.
- [19] Claude Godrèche, Florent Krzakala, and Federico Ricci-Tersenghi. Non-equilibrium critical dynamics of the ferromagnetic ising model with kawasaki dynamics. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2004(04) :P04007, may 2004.
- [20] Sergey Bravyi, Libor Caha, Ramis Movassagh, Daniel Nagaj, and Peter W. Shor. Criticality without frustration for quantum spin-1 chains. *Phys. Rev. Lett.*, 109 :207202, Nov 2012.
- [21] Ramis Movassagh and Peter W. Shor. Supercritical entanglement in local systems : Counterexample to the area law for quantum matter. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 113(47) :13278–13282, 2016.
- [22] Olof Salberger and Vladimir Korepin. *Fredkin Spin Chain*, pages 439–458. World Scientific, 2018.
- [23] Wilhelm Lenz. Contributions to the understanding of the magnetic properties in solids. *Physical Journal*, 21 :613–615, 1920.
- [24] Douglas Poland. The one-dimensional kinetic ising model : A series expansion study. *Journal of Statistical Physics*, 59(3) :935–967, 1990.
- [25] S. Redner. One-dimensional ising chain with competing interactions : Exact results and connection with other statistical models. *J Stat Phys*, 25 :15–23, 1981.
- [26] Jian Wang. Critical slowing down of the two-dimensional kinetic ising model with glauber dynamics. *Phys. Rev. B*, 47 :869–871, Jan 1993.
- [27] Jacques G. Amar, Francis E. Sullivan, and Raymond D. Mountain. Monte carlo study of growth in the two-dimensional spin-exchange kinetic ising model. *Phys. Rev. B*, 37 :196–208, Jan 1988.
- [28] M. K. Phani, Joel L. Lebowitz, M. H. Kalos, and O. Penrose. Kinetics of an order-disorder transition. *Phys. Rev. Lett.*, 45 :366–369, Aug 1980.
- [29] E. T. Gawłinski, Martin Grant, J. D. Gunton, and K. Kaski. Growth of unstable domains in the two-dimensional ising model. *Phys. Rev. B*, 31 :281–286, Jan 1985.
- [30] Roy J. Glauber. Time-dependent statistics of the ising model. *Journal of mathematical physics*, 4(2) :294, 1963.
- [31] Kyozi Kawasaki. Diffusion constants near the critical point for time-dependent ising models. i. *Physical Review*, 145(1) :224–230, May 1966.
- [32] Felix Ritort and Peter Sollich. Glassy dynamics of kinetically constrained models. *Advances in physics*, 2003.
- [33] Vladimir Privman. *Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension*. Cambridge University Press, 1997.

- [34] Daniel S. Fisher and David A. Huse. Nonequilibrium dynamics of spin glasses. *Phys. Rev. B*, 38 :373–385, Jul 1988.
- [35] A.J. Bray. Theory of phase-ordering kinetics. *Advances in Physics*, 43(3) :357–459, 1994.
- [36] Sushanta Dattagupta and Sanjay Puri. *Dissipative Phenomena in Condensed Matter*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004.
- [37] K. Kaski S.J. Cornell and R.B. Stinchcombe. Domain scaling and glassy dynamics in a one-dimensional kawasaki ising model.
- [38] Malte Henkel. *Conformal Invariance and Critical Phenomena*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1999.
- [39] Xiao Chen, Eduardo Fradkin, and William Witczak-Krempa. Gapless quantum spin chains : multiple dynamics and conformal wavefunctions. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 50(46) :464002, October 2017.
- [40] Xiao Chen, Eduardo Fradkin, and William Witczak-Krempa. Quantum spin chains with multiple dynamics. *Physical Review B*, 96(18), Nov 2017.
- [41] N.G. Van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. Elsevier, 2007.
- [42] Sergey Bravyi and Barbara Terhal. Complexity of stoquastic frustration-free hamiltonians. *Journal on Computing*, 39(4) :24, 2009.
- [43] Sergey Bravyi, David P. Divincenzo, Roberto Oliveira, and Barbara M. Terhal. The complexity of stoquastic local hamiltonian problems. *Quantum Info. Comput.*, 8(5) :361–385, May 2008.
- [44] Oskar Perron. Zur theorie der matrices. *Mathematische Annalen*, 64(2) :248–263, 1907.
- [45] Ueber matrizen aus nicht negativen elementen. *Sitzungsberichte der Königlich Preussischen Akademie der Wissenschaften*, pages 456–477, 1912.
- [46] Milad Marvian, Daniel A. Lidar, and Itay Hen. On the computational complexity of curing non-stoquastic hamiltonians. *Nat. Commun*, 10(1571), 2019.
- [47] Murray T. Batchelor. The bethe ansatz after 75 years. *Physics Today*, 60(1) :36, January 2007.
- [48] Eugene P. Wigner. Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions. *Annals of Mathematics Second Series*, pages 548–564, 1955.
- [49] J.-Ch. Anglès d’Auriac and J.-M. Maillard. Random matrix theory in lattice statistical mechanics. *Physica A*, pages 325–333, 2003.
- [50] Kazue Kudo and Tetsuo Deguchi. Level Statistics of XXZ Spin Chains with Discrete Symmetries : Analysis through Finite-size Effects. *Journal of the Physical Society of Japan*, 74(7) :1992–2000, July 2005.
- [51] Kazue Kudo and Tetsuo Deguchi. Level statistics of XXZ spin chains with a random magnetic field. *Physical Review B*, 69(13) :132404, Apr 2004.

- [52] Kazue Kudo and Tetsuo Deguchi. Unexpected non-wigner behavior in level-spacing distributions of next-nearest-neighbor coupled XXZ spin chains. *Physical Review B*, 68(5) :052510, Aug 2003.
- [53] Ramis Movassagh and Peter W. Shor. Power law violation of the area law in quantum spin chains. 2016.
- [54] Olof Salberger and Vladimir Korepin. Fredkin spin chain, 2016.
- [55] Fernando G.S.L. Brandão, Elizabeth Crosson, M. Burak Şahinoğlu, and John Bowen. Quantum error correcting codes in eigenstates of translation-invariant spin chains. *Physical Review Letters*, 123(11), Sep 2019.
- [56] Jan Mölter, Thomas Barthel, Ulrich Schollwöck, and Vincenzo Alba. Bound states and entanglement in the excited states of quantum spin chains. *Journal of Statistical Mechanics*, 2014(10) :P10029, October 2014.
- [57] Jean Hanus. Bound states in the heisenberg ferromagnet. *Physical Review Letters*, 11(7) :336–338, Oct 1963.
- [58] H. C. Fogedby. The spectrum of the continuous isotropic quantum heisenberg chain : quantum solitons as magnon bound states. *Journal of Physics C*, 13(9) :L195–L200, Mar 1980.
- [59] Masanori Kohno. Dynamically dominant excitations of string solutions in the spin-1/2 antiferromagnetic heisenberg chain in a magnetic field. *Physical Review Letters*, 102(3) :037203, Jan 2009.
- [60] Martin Ganahl, Elias Rabel, Fabian H. L. Essler, and H. G. Evertz. Observation of complex bound states in the spin-1/2 heisenberg XXZ chain using local quantum quenches. *Physical Review Letters*, 108(7) :077206, Feb 2012.
- [61] E. Haller, M. Gustavsson, M. J. Mark, J. G. Danzl, R. Hart, G. Pupillo, and H.-C. Nagerl. Realization of an excited, strongly correlated quantum gas phase. *Science*, 325(5945) :1224–1227, Sep 2009.
- [62] Takeshi Fukuhara, Peter Schauß, Manuel Endres, Sebastian Hild, Marc Cheneau, Immanuel Bloch, and Christian Gross. Microscopic observation of magnon bound states and their dynamics. *Nature*, 502(7469) :76–79, Sep 2013.
- [63] HJ. Mikeska and A.K. Kolezhuk. *Quantum Magnetism*, volume 645. Springer, 2004.
- [64] Michael Wortis. Bound states of two spin waves in the heisenberg ferromagnet. *Physical Review*, 132(1) :85–97, Oct 1963.
- [65] Ruber Verresen, Roderich Moessner, and Frank Pollmann. Avoided quasiparticle decay from strong quantum interactions. *Nat. Phys.*, 15 :750–753, 2019.
- [66] Noriaki Sannomiya and Hosho Katsura. Supersymmetry breaking and nambu-goldstone fermions in interacting majorana chains. *Physical Review D*, 99(4), Feb 2019.
- [67] Edward O’Brien and Paul Fendley. Lattice supersymmetry and order-disorder coexistence in the tricritical ising model. *Physical Review Letters*, 120(20), May 2018.

- [68] Michael Victor Berry and Michael Tabor. Level clustering in the regular spectrum. *Proceedings of the Royal Society of London. A*, 356(1686) :375–394, September 1977.
- [69] O. Bohigas, M. J. Giannoni, and C. Schmit. Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation Laws. *Physical Review Letters*, 52(1) :1–4, January 1984.