



THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par *l'Université Toulouse III - Paul Sabatier*
Discipline ou spécialité : *Physique de la Matière*

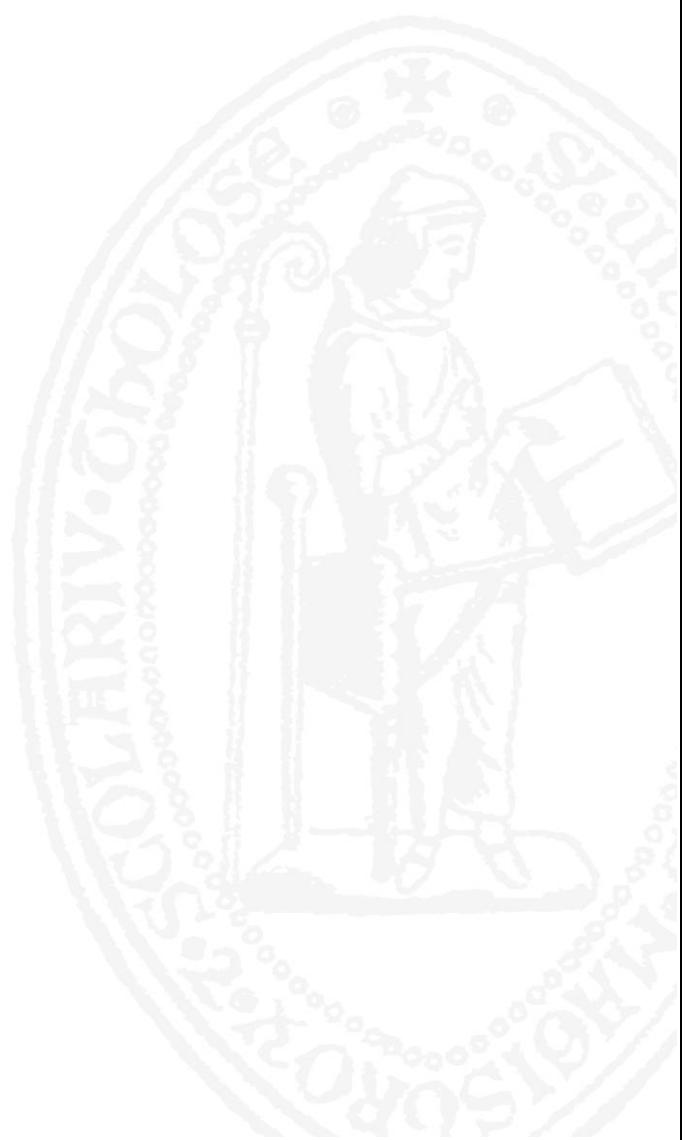
Présentée et soutenue par *Roubert Benoit*
Le 28 septembre 2010

Titre : *Approche semi-classique de l'information quantique*

JURY

Thierry Bastin : Rapporteur
Hans-Rudolf Jauslin : Rapporteur
Benoit Douçot : Examineur
Jacques Blanc-Talon : Examineur
Bertrand Georgeot : Examineur
Mohamed Aziz Bouchene : Examineur
Daniel Braun : Directeur de thèse

Ecole doctorale : *Sciences de la matière*
Unité de recherche : *Laboratoire de physique théorique*
Directeur(s) de Thèse : *Daniel Braun*
Rapporteurs : *Thierry Bastin - Hans-Rudolf Jauslin*



Remerciements

Je remercie mon directeur de thèse Daniel Braun de m'avoir accompagné durant ces trois années de thèse et de m'avoir guidé lorsque cela s'avérait nécessaire.

Je remercie également Peter Braun pour l'aide qu'il m'a apporté durant ma thèse, pour sa gentillesse et sa patience, ainsi que pour l'opportunité qu'il m'a donnée de collaborer avec lui.

Ma reconnaissance va également à Thierry Bastin et Hans-Rudolf Jauslin, qui ont accepté la lourde tâche d'être rapporteurs de ma thèse malgré un délai assez court, ainsi qu'à Benoit Douçot, Jacques Blanc-Talon, Bertrand Georgeot, et Mohamed Aziz Bouchene pour avoir accepté de faire parti de mon jury de thèse.

Je remercie l'I.R.S.A.M.C. de m'avoir accueilli pendant ces trois années et plus particulièrement le Laboratoire de Physique Théorique et son directeur Clément Sire.

Enfin je remercie la D.G.A. grâce à laquelle j'ai pu pendant ces trois années me consacrer pleinement à la recherche.

Je dédie cette thèse à Anne-Sophie, la seule et unique femme de ma vie sans laquelle mon existence aurait bien peu de résonance.

Table des matières

Avant-propos	1
1 Introduction à l'information quantique et rappels utiles	3
1.1 Un peu d'histoire	3
1.1.1 Genèse de l'information quantique et conjecture de Moore	3
1.1.2 Naissance de l'idée d'un ordinateur quantique	4
1.1.3 Naissance du traitement quantique de l'information	5
1.2 Le bit quantique ou qubit	6
1.2.1 Paramétrisation d'un qubit - Sphère de Bloch	6
1.2.2 Action d'une opération unitaire sur un état pur	7
1.2.3 Base computationnelle	8
1.2.4 Convention d'écriture	8
2 Rôle de l'interférence dans le clonage quantique d'un qubit	9
2.1 Présentation des cloneurs quantiques	9
2.1.1 Théorème de non-clonage	9
2.1.2 Différence entre clonage classique et clonage quantique	10
2.1.3 Définition d'une fidélité de clonage	10
2.1.4 Définition d'une fidélité moyenne de clonage	11
2.1.5 Cloneur de Buzek et Hillery	11
2.1.6 Cloneurs universels atteignant la valeur optimale classique	12
2.2 Clonage quantique et interférence	12
2.2.1 Intérêt de l'interférence	12
2.2.2 Définition d'une mesure d'interférence	13
2.2.3 Clonage quantique en terme de matrice dynamique	15
2.2.4 Optimisation convexe	18
2.2.5 Classe générale de cloneurs symétriques optimaux sans interférence	20

2.2.6	Cas du cloneur de Buzek et Hillery	22
2.3	Conclusion partielle	22
3	Amplification de spin	23
3.1	Intérêt des chaînes de spins	23
3.1.1	Problème du transfert de spin	23
3.1.2	Transfert d'état parfait	24
3.1.3	Détection d'un spin unique	25
3.1.4	Mesure d'un spin unique	26
3.1.5	Philosophie de l'amplification de spin	27
3.1.6	Équivalence entre transfert de spin et amplification de spin	28
3.1.7	Influence de la topologie, de la géométrie et des conditions aux frontières	29
3.1.8	Approche semi-classique de l'amplification de spin	30
3.1.9	Introduction de la base des $ \Gamma_{k,l}\rangle$	31
3.2	Chaîne linéaire	31
3.2.1	Modèle physique de Lee et Khitrin	31
3.2.2	Équivalence entre le problème d'amplification de spin et le problème de transfert de spin	33
3.2.3	Propagateur quantique en terme de fonctions de Bessel	35
3.2.4	Approximation semi-classique du propagateur : l'approximation WKB . .	39
3.2.5	Comportement des polarisations individuelles moyennes	40
3.2.6	Comportement linéaire de la polarisation totale moyenne	42
3.3	Chaînes circulaires	44
3.3.1	$\hat{H}_1^{(C)}$: Fermeture par identification de S_{N_L+1} et S_1	45
3.3.2	$\hat{H}_2^{(C)}$: Chaîne circulaire complètement périodique	47
3.3.3	$\hat{H}_3^{(C)}$: Fermeture par un couplage particulier entre S_{N_C-1} , S_{N_C} , S_1 , S_2 . .	51
3.3.4	$\hat{H}_4^{(C)}$: Existence d'une chaîne circulaire dynamiquement équivalente à une chaîne linéaire	56
3.4	Comparaison de l'efficacité de l'amplification de spin pour les différents systèmes	57
3.4.1	Définition d'une fidélité totale de polarisation	57
3.4.2	Étude comparative des différents systèmes	58
3.4.3	Origine des différences observées	64
3.5	Conclusion partielle	68
	Conclusion générale	69

Annexe	71
A Fonctions de Bessel et fonctions de Airy	71
A.0.1 Fonctions de Bessel du premier type	71
A.0.2 Fonctions de Airy	72
B Fidélité moyenne et matrice dynamique	75
Bibliographie	79

Avant-propos

Prophétisé par Feynman qui disait à son propos :« *Au lieu de nous plaindre que la simulation des phénomènes quantiques demande des puissances énormes à nos ordinateurs actuels, utilisons la puissance de calcul des phénomènes quantiques pour faire plus puissant que nos ordinateurs actuels* », l'ordinateur quantique est pendant presque 20 ans resté dans le placard des physiciens qui doutaient que de tels ordinateurs puissent un jour exister. C'est en 1994 qu'un véritable tremblement de terre marque le début de la folle épopée de cette jeune théorie qu'est la théorie de l'information quantique. En cette année, un jeune physicien de 35 ans, Peter Shor, montre qu'il est possible de réaliser une factorisation en un nombre polynomial d'opérations, alors que les meilleurs algorithmes classiques ne savent faire mieux qu'en un nombre exponentiel d'opérations (menaçant par là de rendre obsolète le cryptage RSA, et amenant ainsi la preuve qu'un ordinateur quantique est capable de proposer une accélération exponentielle de la résolution de certains problèmes).

Depuis maintenant 15 ans, le concept même de l'ordinateur quantique n'est plus remis en cause, et des recherches très actives sont effectuées afin de savoir quels seraient les systèmes physiques les plus appropriés pour jouer le rôle de bits quantiques : photons, électrons, atomes, nuages d'atomes, etc. Concrétiser un tel ordinateur quantique suppose que ce dernier soit capable de réaliser certains types d'opérations élémentaires comme par exemple recopier de l'information quantique. Or si le calcul quantique porte en lui de formidables espérances (notamment celle d'une accélération exponentielle relativement au calcul classique), le clonage quantique quant à lui porte l'écueil de ne pas permettre un clonage parfait d'un état quelconque (théorème de non-clonage [1]). Le problème est donc de s'interroger sur les ressources que nous pouvons utiliser afin de rendre ce clonage optimal. De la même façon, un ordinateur quantique doit savoir lire un état quantique de façon efficace si l'on souhaite pouvoir un jour tirer parti de la puissance de ce dernier. Dans le cas particulier d'un ordinateur quantique qui utiliserait le spin comme bit quantique, nous nous retrouvons alors avec ce problème que tant la simple détection que la mesure d'un spin unique restent encore aujourd'hui de véritables challenges, appelant à des solutions alternatives comme l'amplification de spin qui vise à retranscrire l'état d'un spin unique sur un ensemble macroscopique de spins.

Dans le premier chapitre, après une justification historique de la naissance de l'information quantique, nous faisons de rapides rappels utiles pour la suite. Dans le second chapitre nous nous intéressons au clonage quantique et notamment aux ressources quantiques qui rendent ce dernier supérieur au clonage classique. Enfin dans la dernière partie, nous nous intéressons au phénomène d'amplification de spin, à sa grande sensibilité aux conditions aux frontières, et à la possibilité d'en réaliser une approche semi-classique dans certains cas.

Chapitre 1

Introduction à l'information quantique et rappels utiles

1.1 Un peu d'histoire

1.1.1 Genèse de l'information quantique et conjecture de Moore

Depuis le début des années 70, date à laquelle est commercialisé le premier microprocesseur Intel 4004 (doté alors de 2300 transistors à 4 bits), les microprocesseurs n'ont eu de cesse d'augmenter leur puissance de calcul par l'augmentation de leur densité de transistors. En 1965, Gordon Moore publie dans la revue *Electronics Magazine* un article célèbre dans lequel il postule une augmentation exponentielle du nombre de transistors dans les microprocesseurs tous les deux ans environ. Lorsqu'il postule cette conjecture [2], Moore ne se base que sur 5 observations étalées de 1959 à 1965 (comme l'on peut l'observer sur la figure 1.1 de l'article d'origine).

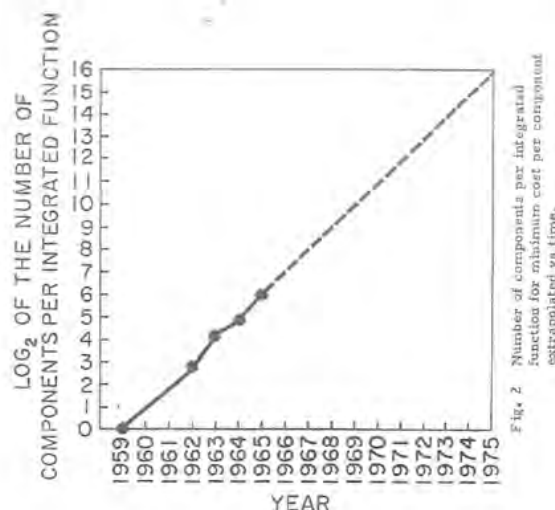


FIGURE 1.1 – Conjecture de Moore d'une évolution exponentielle de la densité de transistors des microprocesseurs (cf. [2]).

Cependant de façon remarquable, cette conjecture a continué de se vérifier jusqu'à nos jours, montrant certes un écart à la loi postulée originellement par Moore (le doublement de la densité de transistors se faisant entre 1.3 et 1.8 ans), mais témoignant cependant de la justesse de son intuition (cf. figure 1.2).



FIGURE 1.2 – Observation empirique de la loi de Moore.

1.1.2 Naissance de l'idée d'un ordinateur quantique

La conjecture de Moore porte en elle-même une limitation intrinsèque, puisque l'on ne peut envisager de dépasser une valeur de densité limite, qui correspondrait alors à la limite inférieure que l'on est capable d'atteindre en terme de miniaturisation des transistors (de l'ordre de la dizaine d'atomes). Il s'est donc rapidement avéré indispensable de réfléchir à d'autres ressources que la miniaturisation pour améliorer la puissance des microprocesseurs.

En 1982, Richard Feynman constatant à quel point il est complexe de simuler des systèmes quantiques sur des ordinateurs classiques, est le tout premier à proposer de construire des ordinateurs quantiques qui seraient capables de tirer parti de ce qu'offre la mécanique quantique comme ressources (superposition d'états, interférence, intrication, etc.). C'est à la même époque que David Benioff propose au contraire d'utiliser ces ressources pour obtenir une accélération exponentielle des calculs classiques. De tels exemples d'accélération du calcul quantique sur le calcul classique existent, le plus célèbre étant celui de l'algorithme de Shor [3]. Ce dernier permet de factoriser un entier N en $\mathcal{O}(\log(N)^3)$ opérations, alors qu'aujourd'hui le meilleur algorithme classique ne sait faire mieux qu'en un nombre $\mathcal{O}(e^{P^{1/3} \log(P)^{2/3}})$ d'opérations, où $P = \log(N)$ (c'est à dire en un nombre exponentiel d'opérations par rapport à la taille du système). Même si aujourd'hui les applications pratiques restent modestes (on ne sait encore factoriser que de petits nombres), la crainte qu'un ordinateur quantique soit au moins par la théorie capable de déchiffrer des messages cryptés par la méthode RSA en un temps polynomial, a provoqué l'intérêt de nombreux acteurs (gouvernementaux notamment), et entraîné dans son sillage un développement inespéré de tout le domaine de l'information quantique. D'autres

exemples d'accélération existent : l'algorithme de Grover par exemple [4], est capable de retrouver un élément parmi N , en un nombre \sqrt{N} d'opérations alors que le meilleur algorithme classique ne sait faire mieux qu'en un nombre N d'opérations. On peut également citer le problème de Simon [5] dans lequel on cherche pour une fonction $f : \{0, 1\}^m \rightarrow \{0, 1\}^m$, à trouver s tel que $\forall x \neq y : f(x) = f(y) \Leftrightarrow y = x \oplus s$, et pour lequel on obtient une accélération d'un nombre exponentiel d'opérations (pour le meilleur algorithme classique connu), à un nombre polynomial d'opérations (pour l'algorithme quantique). Enfin on peut citer les travaux récents de Lloyd, Harrow et Hassidim [6], sur la résolution de systèmes d'équations linéaires, où l'on observe pour N équations une accélération d'un nombre $\mathcal{O}(N)$ d'opérations pour le meilleur algorithme classique connu, à un nombre $poly(\log(N))$.

Nous le voyons donc, utiliser une approche quantique de certains algorithmes classiques, peut conduire à de véritables accélérations salvatrices, ouvrant au moins dans la théorie, la possibilité de résoudre toute une nouvelle classe de problèmes de complexité inaccessible aux ordinateurs classiques. Cependant, nous restons encore aujourd'hui dans l'ignorance des limitations qui seraient celles d'un ordinateur quantique. Ignorance qui s'ajoute à la difficulté de trouver quels algorithmes quantiques sont exponentiellement plus efficaces que leurs homologues classiques.

1.1.3 Naissance du traitement quantique de l'information

L'expérience sensible qu'il a du monde, a conduit l'homme à subdiviser l'univers en des catégories distinctes, et à construire une représentation relativement manichéenne de son environnement existentiel : froid/chaud, lent/rapide, mort/vivant, ouvert/fermé, etc. On peut dire sans trop de crainte, que c'est de cette expérience quotidienne d'un univers où existent des états classiques exclusifs l'un de l'autre qu'est née un jour la logique binaire dans le domaine du traitement de l'information. Cependant, avec le temps, l'homme s'est rendu compte de la difficulté qu'il y avait à réduire l'existant à de simples catégories, et que bien souvent, tout était question de points de vue. Ainsi la relativité lui a par exemple révélé que le cadre même dans lequel il existe (l'espace, le temps) n'est en rien absolu, et que l'essence profonde des choses lui est dissimulée. La mécanique quantique quant à elle, lui a enseigné que les constituants élémentaires de la matière (atomes, électrons, photons, etc.) étaient décrits par des fonctions d'onde donnant la probabilité lors d'une mesure de trouver le système dans tel ou tel état quantique, l'obligeant à se détacher de cette intuition classique naturelle qu'il a du monde au travers de ses sens. Cette étrangeté du monde quantique qui choque la connaissance que nous avons du monde, a été particulièrement bien illustrée par l'expérience de pensée de Schrödinger dans laquelle un dispositif dépendant de l'état quantique d'un atome (qui a 50% de chance d'être dans un état A où dans un état B), doit déclencher tout un processus conduisant à la mort d'une pauvre chat innocent, entraînant ce raisonnement absurde que tant qu'aucun observateur n'observe le système, le chat se retrouve dans un état quantique de superposition cohérente : $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\text{mort}\rangle + |\text{vivant}\rangle)$ (cf. figure 1.3).

Bien évidemment l'expérience quotidienne nous prouve que les objets macroscopiques n'existent pas dans de tels états de superposition quantique (en raison de phénomènes de décohérence (d'autant plus rapides que le système est important) qui entraînent la disparition quasi-immédiate des cohérences de la matrice densité du système macroscopique et ne laissent subsister qu'une distribution de probabilités délocalisée). De ce constat qu'un objet quantique peut exister dans une superposition cohérente d'états qui seraient classiquement exclusifs les uns des

autres, nous pouvons dire qu'est née un jour l'idée d'un traitement quantique de l'information.

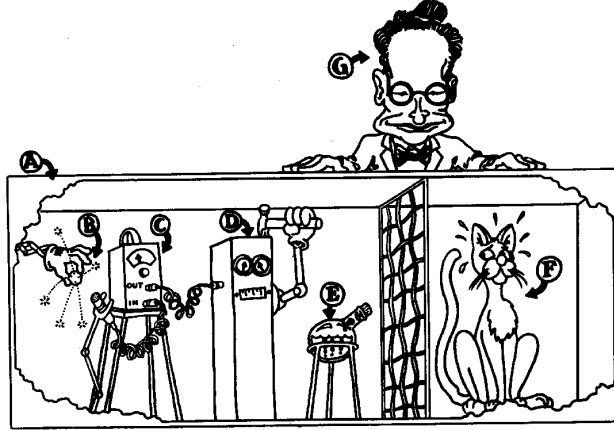


FIGURE 1.3 – Expérience du chat de Schrödinger : Une boîte fermée et isolée (A), contient une source radioactive (B) qui a 50% de chance de déclencher un compteur Geiger (C) qui active un mécanisme (D), entraînant alors un marteau à casser une fiole remplie de poison (E), tuant ainsi le chat (F). Un observateur extérieur (G) doit alors ouvrir la boîte s'il souhaite réduire l'état du système à un seul des deux états classiques possibles : $|\text{chat mort}\rangle$ ou $|\text{chat vivant}\rangle$.

1.2 Le bit quantique ou qubit

1.2.1 Paramétrisation d'un qubit - Sphère de Bloch

Considérons tout d'abord un système physique comportant deux niveaux distincts tels que : un atome comportant un niveau fondamental et un niveau excité ; un photon pouvant présenter un état de polarisation horizontal ou vertical ; un électron pouvant être dans un état de spin up ou down. De tels systèmes constituent des qubits dont l'état est donné par

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1,$$

où $|\alpha|^2$ et $|\beta|^2$ sont les probabilités que les systèmes soient mesurés dans l'état $|0\rangle$ ou dans l'état $|1\rangle$. Comme les facteurs de phase n'affectent pas l'état physique d'un système, nous pouvons sans perte de généralité supposer α réel positif et récrire

$$|\Psi\rangle = \cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\phi} \sin(\theta/2)|1\rangle,$$

où $\theta \in [0, \pi]$ et $\phi \in [0, 2\pi]$. Cette réécriture montre qu'il est possible de représenter de façon unique l'état $|\Psi\rangle$ par le point de coordonnées (x, y, z) sur une sphère de rayon unité dans \mathbb{R}^3 avec

$$\begin{aligned} x &= \sin(\theta) \cos(\phi) \\ y &= \sin(\theta) \sin(\phi) \\ z &= \cos(\theta). \end{aligned}$$

Cette sphère (cf. figure 1.4) est la représentation géométrique de l'ensemble des états purs d'un système quantique à deux niveaux, et porte le nom de sphère de Bloch. Sur cette sphère, les pôles représentent les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ et deux points antipodaux représentent des états orthogonaux, i.e. $\langle\Psi(-x, -y, -z)|\Psi(x, y, z)\rangle = 0$.

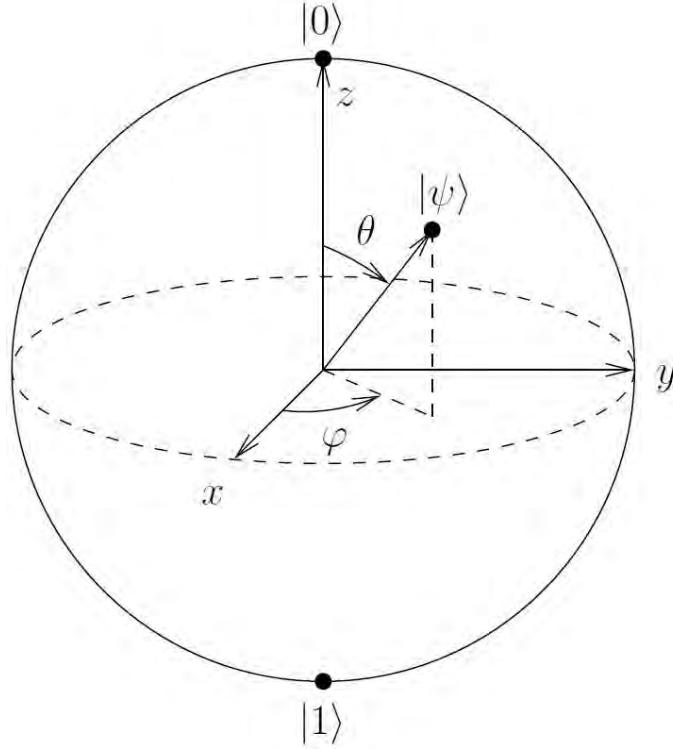


FIGURE 1.4 – Paramétrisation d'un état $|\Psi\rangle$ sur la sphère de Bloch.

1.2.2 Action d'une opération unitaire sur un état pur

Supposons que nous disposons d'un système dans l'état pur $|\psi\rangle$. Une opération unitaire sur ce dernier a pour propriété de conserver le caractère pur de l'état de départ, i.e. de donner comme état d'arrivée, un état qui appartient à nouveau à la sphère de Bloch. De façon générale, une transformation unitaire conduisant d'un état $|\psi\rangle$ à un état $|\psi'\rangle$ obtenu en tournant d'un angle θ autour d'un vecteur $\vec{n} = (n_X, n_Y, n_Z)$ est donnée par l'opérateur $\hat{U} = e^{i\alpha\hat{R}_{\vec{n}}(\theta)}$ où $\hat{R}_{\vec{n}}(\theta) = e^{-i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}/2}$, $\vec{\sigma} = (\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$, et $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$ sont les opérateurs de Pauli. Nous donnons ci-dessous l'expression du cas particulier des opérateurs de rotation autour des axes Ox , Oy , et Oz :

$$\begin{aligned}\hat{R}_X(\theta) &= e^{-i\theta\hat{X}/2} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -i\sin(\theta/2) \\ -i\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}, \\ \hat{R}_Y(\theta) &= e^{-i\theta\hat{Y}/2} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}, \\ \hat{R}_Z(\theta) &= e^{-i\theta\hat{Z}/2} = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

1.2.3 Base computationnelle

Supposons que l'on dispose d'un système de N qubits et désignons par \mathcal{H}_k le sous-espace de Hilbert associé au $k^{\text{ème}}$ qubit, i.e. engendré par les états $\{|0_k\rangle, |1_k\rangle\}$. L'espace de Hilbert total est défini par $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$, et les états de la base computationnelle sont les 2^N états $|i_1\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle$ avec $|i_k\rangle \in \{|0_k\rangle, |1_k\rangle\}$. Par exemple pour $N = 2$, les états de la base computationnelle sont :

$$|0\rangle \otimes |0\rangle, |0\rangle \otimes |1\rangle, |1\rangle \otimes |0\rangle, |1\rangle \otimes |1\rangle.$$

1.2.4 Convention d'écriture

Dans toute la suite de ce manuscrit, nous utiliserons certaines conventions afin de ne pas alourdir les notations. Tout d'abord un état sous la forme $|\psi_1 \dots \psi_N\rangle$ désignera l'état $|\psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle$ défini dans l'espace de Hilbert total. Enfin si nous appelons \hat{A}_k un opérateur n'agissant que dans \mathcal{H}_k , nous adopterons la convention suivante :

$$\forall k < l : \hat{A}_k \hat{A}_l = \hat{1}_1 \otimes \dots \otimes \hat{1}_{k-1} \otimes \hat{A}_k \otimes \hat{1}_{k+1} \otimes \dots \otimes \hat{1}_{l-1} \otimes \hat{A}_l \otimes \hat{1}_{l+1} \otimes \dots \otimes \hat{1}_N .$$

Chapitre 2

Rôle de l'interférence dans le clonage quantique d'un qubit

Dans cette section, nous nous intéressons au rôle de l'interférence dans le processus de clonage quantique d'un unique qubit (se reporter notamment à l'article [7] pour plus de détails). Nous montrons qu'afin d'atteindre une fidélité moyenne de clonage supérieure à la valeur maximale qu'il est possible d'atteindre classiquement, l'interférence n'est pas une ressource nécessaire. En particulier, nous montrons que toute une classe de cloneurs symétriques et universels existe (dont fait parti le célèbre cloneur de Buzek-Hillery), pour laquelle il est possible d'atteindre une fidélité moyenne de clonage optimale de $5/6$, et ce à interférence nulle.

2.1 Présentation des cloneurs quantiques

2.1.1 Théorème de non-clonage

Énoncé en 1982 par Wootters et Zurek [1], le célèbre théorème de non-clonage, montre qu'il est impossible de concevoir un cloneur quantique qui puisse cloner de façon parfaite (avec une fidélité de 1), n'importe quel état, i.e. qui puisse réaliser l'opération $|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle$ quel que soit $|\psi\rangle$. La démonstration en est très simple. En effet, supposons qu'un tel cloneur existe. Un état $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ est alors cloné de la façon suivante :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle|0\rangle \rightarrow |\psi\rangle|\psi\rangle &= (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \\ &= \alpha^2|00\rangle + \alpha\beta|01\rangle + \alpha\beta|10\rangle + \beta^2|11\rangle. \end{aligned}$$

Or si l'on clone l'expansion de $|\psi\rangle$, nous obtenons : $(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|0\rangle \rightarrow \alpha|00\rangle + \beta|11\rangle$, achevant de démontrer qu'un tel cloneur ne peut exister. Ce théorème est à la base de la sécurité des systèmes de distribution de clefs quantiques et a donc des implications technologiques particulièrement importantes (même s'il ne s'agit là que d'une simple conséquence de la linéarité de l'évolution temporelle d'un système quantique).

2.1.2 Différence entre clonage classique et clonage quantique

Par clonage classique on entend communément la reproduction exacte de l'état classique d'un système en autant d'exemplaires qu'on le souhaite. Cependant, le théorème de non-clonage nous empêche de transposer cette définition au cas du clonage quantique. A cette impossibilité d'un clonage parfait d'un état quantique quelconque (qui est la première différence de taille entre clonage classique et clonage quantique), se rajoutent d'autres différences portant sur la nature de l'information que l'on souhaite reproduire.

En effet, si pour des systèmes classiques nous avons (au moins en principe) un accès complet aux quantités physiques caractérisant ces derniers (e.g. les positions et impulsions de particules), pour les systèmes quantiques un tel accès nous est en effet interdit par les relations d'incertitude de Heisenberg. Ces dernières postulent par exemple dans le cas d'une particule, que toute précision supplémentaire que l'on est capable d'acquérir sur son impulsion, se fait au détriment de celle que l'on peut espérer obtenir sur sa position (et vice versa), ce qu'illustrent les relations bien connues

$$\begin{aligned}\Delta x \Delta p_x &\gtrsim \hbar, \\ \Delta y \Delta p_y &\gtrsim \hbar, \\ \Delta z \Delta p_z &\gtrsim \hbar.\end{aligned}$$

A cette impossibilité intrinsèque de la mécanique quantique, qui nous interdit de pouvoir connaître de façon exacte l'état quantique d'un système dans toutes les propriétés qui le définissent (position, impulsion, ...), se rajoute également ce fait que l'état classique d'un système quantique ne pré-existe pas à sa mesure comme l'a montré Alain Aspect dans une fameuse expérience (réalisée entre 1980 et 1982), où la violation observée des inégalités de Bell a démontré qu'il n'était pas possible d'obtenir une description classique de la nature qui puisse être à la fois réaliste et locale.

2.1.3 Définition d'une fidélité de clonage

Dans le langage courant, nous entendons par clonage classique la capacité d'un système (le cloneur) à reproduire de façon rigoureusement identique un objet initial en autant de copies souhaitées, possédant chacune exactement les mêmes caractéristiques physiques que le modèle initial. Pour les raisons que nous venons d'évoquer précédemment, nous nous rendons compte de la difficulté qui est celle de réaliser le clonage d'un système quantique, laissant naturellement émerger la notion de fidélité avec laquelle un système quantique est reproduit par un cloneur quantique.

Imaginons que l'on dispose de deux qubits A et B , A se trouvant dans l'état pur $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ (représentant le qubit que l'on souhaite cloner), B se trouvant dans l'état pur $|0\rangle$ (la *page blanche* sur laquelle l'on souhaite réaliser la copie). A l'issue du clonage, le système $A + B$ (initialement dans l'état $\rho_{AB}^N = |\psi\rangle\langle\psi| \otimes |0\rangle\langle 0|$) peut se retrouver dans un état intriqué ρ_{AB}^{OUT} (ne pouvant être mis sous la forme $\rho_{AB}^{OUT} = \tilde{\rho}_A^{OUT} \otimes \tilde{\rho}_B^{OUT}$). Nous définissons alors pour chaque sous-système les fidélités de clonage

$$F_A(\psi) = \langle\psi|Tr_B(\rho_{AB}^{OUT})|\psi\rangle \quad (2.1)$$

$$F_B(\psi) = \langle\psi|Tr_A(\rho_{AB}^{OUT})|\psi\rangle \quad (2.2)$$

avec $\rho_{AB}^{OUT} = |\Psi_{AB}^{OUT}\rangle\langle\Psi_{AB}^{OUT}|$ et $|\Psi_{AB}^{OUT}\rangle = \hat{U}|\Psi_{AB}^{IN}\rangle$ (où \hat{U} désigne l'évolution unitaire que suit le système total $A + B$ durant le processus de clonage).

2.1.4 Définition d'une fidélité moyenne de clonage

Dans le cas de cloneurs non-universels, les fidélités

$$F_j(\theta, \phi) = \langle\psi(\theta, \phi)|\rho_j^{OUT}|\psi(\theta, \phi)\rangle : j \in \{A, B\}, \quad (2.3)$$

pour lesquelles nous avons défini les matrices densités réduites :

$$\begin{aligned} \rho_A^{OUT} &= Tr_B(\rho_{AB}^{OUT}), \\ \rho_B^{OUT} &= Tr_A(\rho_{AB}^{OUT}), \end{aligned}$$

dépendent de l'état initial $|\psi(\theta, \phi)\rangle$ (paramétrisés par les angles θ et ϕ sur la sphère de Bloch).

Afin de pouvoir déterminer l'efficacité de clonage de tels cloneurs, il nous est donc nécessaire d'introduire la notion de fidélités moyennes de clonage définies par

$$\bar{F}_j = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) F_j(\theta, \phi) : j \in \{A, B\}. \quad (2.4)$$

2.1.5 Cloneur de Buzek et Hillery

Buzek et Hillery ont montré qu'il était possible de concevoir un cloneur quantique à 2 qubits universel (même fidélité de clonage quelque soit $|\psi\rangle$) et symétrique ($F_A(\psi) = F_B(\psi)$ pour tout $|\psi\rangle$) qui atteint des fidélités $F_A(\psi) = F_B(\psi) = 5/6$, valeur maximale qu'il est possible d'atteindre pour de tels cloneurs [8, 9]. Cette valeur est également la valeur maximale qui reste compatible avec la condition qu'aucun signal ne peut dépasser la vitesse de la lumière [10].

Dans leur article [11], partant d'un système constitué d'un qubit A (dans l'état $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$) et d'un qubit B (dans l'état $|0\rangle$), les auteurs construisent un cloneur qui produit deux états mélangés

$$\rho_A^{OUT} = \rho_B^{OUT} = \frac{5}{6}|\psi\rangle\langle\psi| + \frac{1}{6}|\psi^\perp\rangle\langle\psi^\perp|, \quad (2.5)$$

où $|\psi^\perp\rangle = \alpha^*|1\rangle - \beta^*|0\rangle$ est l'état orthogonal à $|\psi\rangle$. Dans ce cloneur un seul qubit auxiliaire (représenté par l'état $|Q\rangle_X$ du cloneur) est nécessaire pour rendre possible cette opération de clonage. De façon plus détaillée, le cloneur de Buzek et Hillery réalise les opérations suivantes :

$$\begin{aligned} |0\rangle_A|0\rangle_B|Q\rangle_X &\rightarrow |0\rangle_A|0\rangle_B|Q_0\rangle_X + (|0\rangle_A|1\rangle_B + |1\rangle_A|0\rangle_B) |Y_0\rangle_X \\ |1\rangle_A|0\rangle_B|Q\rangle_X &\rightarrow |1\rangle_A|1\rangle_B|Q_1\rangle_X + (|0\rangle_A|1\rangle_B + |1\rangle_A|0\rangle_B) |Y_1\rangle_X. \end{aligned} \quad (2.6)$$

2.1.6 Cloneurs universels atteignant la valeur optimale classique

Il a été montré que la valeur optimale qu'il est possible d'atteindre classiquement pour des cloneurs universels symétriques (au sens des fidélités moyennes) est telle que $\overline{F}_A = \overline{F}_B = 2/3$ [12]. Le clonage est classique dans le sens où il agit comme une application stochastique sur les probabilités de l'état initial (éléments diagonaux de la matrice densité initiale) sans aucun accès aux cohérences (éléments hors-diagonaux de la matrice densité initiale). Il est très simple de construire des cloneurs quantiques atteignant la valeur maximale classique. Par exemple, il est possible de construire un cloneur quantique à 2 qubits universel et symétrique pour lequel $\overline{F}_A = \overline{F}_B = 2/3$ tout simplement en mesurant le premier qubit dans une base orthogonale choisie de façon aléatoire et uniformément sur la sphère de Bloch, et en préparant le second qubit dans l'état trouvé lors de la mesure [13]. Un autre exemple trivial de cloneur à 2 qubits symétrique et universel consiste à laisser le premier qubit, à mettre le second dans un état pur aléatoire, puis à échanger les deux avec une probabilité de 1/2 ce qui conduit à des fidélités moyennes $\overline{F}_A = \overline{F}_B = 3/4$.

2.2 Clonage quantique et interférence

2.2.1 Intérêt de l'interférence

Lorsqu'un processus quantique présente de meilleures performances que le meilleur de ses homologues classiques, il est naturel de s'interroger sur la nature des ressources physiques qui sont à même de pouvoir expliquer ces différences : l'intrication et l'interférence (au sens de la définition que nous en donnons dans la section 2.2.2) sont les deux ressources potentielles les plus évidentes [14].

Le fait que le clonage quantique prenne en compte les cohérences des matrices densités (à la différence du clonage classique), conduit naturellement à cette hypothèse que l'interférence doit jouer un rôle important dans le processus de clonage. Tourné d'une d'autre façon, il semblerait vraisemblable qu'un cloneur n'utilisant pas du tout d'interférence ne soit pas capable de dépasser la valeur maximale atteinte classiquement. Cependant, de façon contre-intuitive, nous montrons que le contraire est vrai, i.e. qu'il est possible de construire toute une classe de cloneurs quantiques n'utilisant pas d'interférence, dépassant non seulement la valeur maximale classique, mais encore atteignant la valeur maximale possible pour la fidélité moyenne dans le cas symétrique et universel ($\overline{F}_A(\psi) = \overline{F}_B(\psi) = 5/6$).

Afin de pouvoir présenter le résultat de nos travaux il est nécessaire dans un premier temps de définir de façon précise le concept d'interférence (développé dans la section 2.2.2). Une mesure quantitative de cette dernière a été introduite dans [15] et utilisée pour étudier l'interférence dans certains algorithmes quantiques, conduisant notamment à l'hypothèse qu'une quantité exponentielle d'interférence est nécessaire dans un algorithme quantique unitaire si l'on souhaite que ce dernier offre une accélération exponentielle par rapport aux algorithmes classiques correspondants. Cette hypothèse a notamment été étayée par des simulations numériques lors de l'étude de l'interférence au sein de versions perturbées des algorithmes de Grover et de Shor [16]. Dans [17] il a été montré que l'interférence d'algorithmes quantiques aléatoires est avec une grande probabilité proche de sa valeur maximale, tandis que dans [18] il a été montré que

l'interférence jouait au plus un rôle mineur dans le transfert d'information quantique dans des chaînes de spins.

Dans la section 2.2.2, nous introduisons une mesure d'interférence. Puis nous donnons une formulation générale des cloneurs quantiques en terme de matrices dynamiques et récrivons la mesure d'interférence dans ce formalisme (section 2.2.3). Les fidélités moyennes de clonage étant des fonctions linéaires relativement aux éléments des matrices densités, nous pouvons reformuler la condition d'interférence nulle par des contraintes linéaires. Trouver les systèmes atteignant une fidélité moyenne de clonage optimale en absence d'interférence, revient alors à résoudre un problème d'optimisation convexe que nous traitons dans le cas asymétrique $\bar{F}_A \neq \bar{F}_B$ et dans le cas symétrique $\bar{F}_A = \bar{F}_B$. Ce dernier cas nous conduit à toute une classe de cloneurs (dont le cloneur de Buzek et Hillery) atteignant des fidélités moyennes optimale de 5/6 et ce en absence d'interférence.

2.2.2 Définition d'une mesure d'interférence

Propagateur d'une matrice dynamique

La propagation d'un système quantique traduit comment un système initialement dans un état ρ^{IN} évolue vers un état final ρ^{OUT} . Nous appelons propagateur P , le super-opérateur qui traduit l'évolution (qui peut être non unitaire) $\rho^{OUT} = P\rho^{IN}$. Exprimée dans la base computationnelle des états $|k\rangle$ ($k \in [1, 2^N]$), nous obtenons (cf. [19] et [7]) la formule suivante qui traduit le lien qu'il existe entre les éléments matriciels de ρ^{IN} , de ρ^{OUT} et de P (on note $\langle i|\rho|j\rangle = \rho_{ij}$) :

$$\rho_{ij}^{OUT} = \sum_{k,l} P_{ij,kl} \rho_{kl}^{IN} . \quad (2.7)$$

Propriétés attendues d'une mesure d'interférence

Nous allons maintenant définir une mesure d'interférence qui s'applique à n'importe quelle propagation . Remarquons que cette dernière n'est pas définie de façon unique, mais nous utiliserons dans la suite de ce manuscrit la définition que nous allons en donner ci-dessous. D'une mesure d'interférence nous attendons plusieurs propriétés :

1. Tout d'abord qu'elle mesure le degré de cohérence d'une propagation quantique donnée, i.e. quelle soit capable de déterminer dans quelle mesure les cohérences de la matrice densité initiale contribuent aux cohérences et aux probabilités de la matrice densité finale.
2. Ensuite qu'elle mesure l'équipartition de cette propagation : par exemple une propagation cohérente qui ne ferait que permuter les amplitudes de l'état initial ne crée pas d'interférence. Pour créer de l'interférence, il est nécessaire qu'au moins deux états se retrouvent superposés de façon cohérente. Nous attendons de la mesure d'interférence qu'elle traduise la contribution de chaque amplitude de l'état initial relativement à chaque amplitude de l'état final, et qu'elle soit maximisée si chacun des états de base pris comme état de départ produit un état de sortie équipartitionné (i.e. qui a la même densité de probabilité d'être dans chacun des états de la base).

3. Enfin qu'elle soit dépendante de la base dans laquelle nous nous plaçons. Par exemple, dans le cas de l'expérience des fentes d'Young, si l'on observe le résultat à la sortie des fentes dans la base des vecteurs d'onde, aucun motif d'interférence n'est observé (juste une distribution de probabilité).

Une mesure d'interférence doit donc mesurer la cohérence d'une propagation, son équipartition, et dépendre de la base dans laquelle elle est effectuée. La définition que nous en donnons ci-dessous associe à chaque propagateur P un nombre réel compris entre 0 et $M - 1$, où M est la dimension de l'espace de Hilbert dans lequel agissent ρ^{IN} et ρ^{OUT} . Pour un état pur initial $\rho^{IN} = |\psi\rangle\langle\psi|$, avec $|\psi\rangle = \sum_{k=1}^M a_k |k\rangle$, les amplitudes $a_k = |a_k|e^{i\phi_k}$ de phase ϕ_k conduisent à des probabilités finales

$$p_i^{OUT} = |\rho_{ii}^{OUT}| = \sum_{j,k} P_{ii,jk} e^{i(\phi_j - \phi_k)} |a_j a_k|. \quad (2.8)$$

Définition d'une mesure de cohérence $\mathcal{C}(P)$

Si l'on définit la matrice réelle de sensibilité de phase S par $S_{il} = \partial p_i^{OUT} / \partial \phi_l$ et la matrice semi-définie positive SS^T , avec $SS^T = 0$ ssi $\partial p_i^{OUT} / \partial \phi_l = 0$ pour $i, l \in [1, M]$, la mesure de cohérence $\mathcal{C}(P)$ peut être définie en moyennant sur toutes les phases initiales ϕ_k et en prenant la trace de SS^T , i.e.

$$\mathcal{C}(P) = \frac{1}{(2\pi)^M} \int_0^{2\pi} d\phi_1 \dots d\phi_M \text{tr}(SS^T), \quad (2.9)$$

qui après quelques calculs conduit à l'équation

$$\mathcal{C}(P) = 2 \sum_{i,k} \sum_{l \neq k} |P_{ii,lk} a_k a_l|^2. \quad (2.10)$$

Forme finale de la mesure d'interférence

La mesure de cohérence (2.10) dépend encore des amplitudes de l'état initial. Dans [15] les auteurs décident de donner une définition de l'interférence qui prend comme état de départ un état équipartitionné pour lequel $\forall k \in [1, M] : |a_k| = \frac{1}{\sqrt{M}}$. Ainsi, après une dernière multiplication par un terme $M^2/2$ nous obtenons la mesure d'interférence

$$\mathcal{I}(P) = \sum_{i,k,l} |P_{ii,kl}|^2 - \sum_{i,k} |P_{ii,kk}|^2. \quad (2.11)$$

Nous pouvons voir facilement que $\mathcal{I}(P)$ possède effectivement la propriété d'être de valeur nulle dans le cas d'une propagation classique stochastique pour laquelle $P_{ij,kl} = M_{ik} \delta_{ij} \delta_{kl}$ (où M est une matrice stochastique telle que $p_i^{OUT} = \sum_k M_{ik} p_k^{IN}$). Une telle propagation présente un caractère classique puisque les probabilités finales sont déterminées par les seules probabilités initiales.

Cas particulier d'une propagation unitaire

Dans le cas où tous les états purs initiaux restent purs durant la propagation la cohérence est par définition parfaite. Dans ce cas $\rho^{OUT} = |\psi^{OUT}\rangle\langle\psi^{OUT}|$ avec $|\psi^{OUT}\rangle = \hat{U}|\psi^{IN}\rangle$ (où \hat{U} est un opérateur unitaire), et P peut alors s'écrire comme $P(U)$ avec : $P_{ii,kl} = U_{ik}U_{il}^*$. En utilisant que $\sum_{i,k,l=1}^M |U_{il}U_{ik}|^2 = M$ en raison de l'unitarité de \hat{U} , nous obtenons alors :

$$\mathcal{I}(P(U)) = \left(M - \sum_{i,k} |U_{ik}|^4 \right). \quad (2.12)$$

2.2.3 Clonage quantique en terme de matrice dynamique

Opération de reshuffling

Afin de pouvoir faire la transition entre le formalisme du propagateur et celui de la matrice dynamique, il est nécessaire de définir une transformation agissant dans l'espace des matrices carrées : l'opération de reshuffling.

Considérons dans un premier temps que l'on dispose d'une base \mathcal{B} de $2^{2N} = 4^N$ états $|ij\rangle$, avec $i, j \in [0, 2^N - 1]$ (par exemple pour $N = 1$: $\mathcal{B}_1 = \{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$, pour $N = 2$: $\mathcal{B}_2 = \{|00\rangle, \dots, |03\rangle, \dots, |30\rangle, \dots, |33\rangle\}$, etc.). Si l'on considère une matrice A dans la base \mathcal{B} (donc de dimension $4^N \times 4^N$), l'opération de reshuffling de cette matrice permet d'obtenir une nouvelle matrice A^R où les éléments matriciels sont reliés par la relation : $A_{ij,kl}^R = A_{ik,jl}$. Afin d'illustrer cette opération, nous en observons sur la figure 2.1 l'effet sur une matrice 4×4 (correspondant donc à $N = 1$). Nous constatons que cette opération a pour effet de réorganiser chaque ligne de 4^N éléments de A en un sous-bloc carré de dimension $2^N \times 2^N$ de la matrice A^R .

$$A = \begin{pmatrix} \begin{array}{cccc} A_{00,00} & A_{00,01} & A_{00,10} & A_{00,11} \\ A_{01,00} & A_{01,01} & A_{01,10} & A_{01,11} \\ A_{10,00} & A_{10,01} & A_{10,10} & A_{10,11} \\ A_{11,00} & A_{11,01} & A_{11,10} & A_{11,11} \end{array} \\ \end{pmatrix} \longrightarrow A^R = \begin{pmatrix} \begin{array}{cc|cc} A_{00,00} & A_{00,01} & A_{01,00} & A_{01,01} \\ A_{00,10} & A_{00,11} & A_{01,10} & A_{01,11} \\ \hline A_{10,00} & A_{10,01} & A_{11,00} & A_{11,01} \\ A_{10,10} & A_{10,11} & A_{11,10} & A_{11,11} \end{array} \end{pmatrix}$$

FIGURE 2.1 – Opération de reshuffling sur une matrice 4×4 (correspondant à $N = 1$). Les éléments en rouges sont les éléments différents entre A et A^R .

Matrice dynamique

Dans la présente section, nous donnons une reformulation des cloneurs quantiques à 2 qubits dans le cadre du formalisme de la matrice dynamique introduit par Choi [20] et Zyczkowski [21]. La matrice dynamique D associée au super-opérateur P , s'obtient par un simple reshuffling de ce dernier, i.e. $D_{ik,jl} = P_{ij,kl}$, ce qui conduit à

$$\rho_{ij}^{OUT} = \sum_{k,l} D_{ik,jl} \rho_{kl}^{IN}. \quad (2.13)$$

Étant donné que l'on considère un cloneur à 2 qubits, la matrice dynamique correspondante est de taille 16×16 : en effet, la base computationnelle comprend les 4 éléments $|00\rangle = |0\rangle$, $|01\rangle = |1\rangle$, $|10\rangle = |2\rangle$, $|11\rangle = |3\rangle$, et la matrice dynamique D traduit comment sont obtenus les 4×4 éléments $\rho_{i,j}^{OUT}$ à partir des 4×4 éléments $\rho_{i,j}^{IN}$. L'avantage de cette reformulation est que si l'on considère ik et jl comme des indices uniques I et J ($I, J \in \{0, \dots, 15\}$ correspondant à des valeurs de $ik, jl \in \{00, \dots, 03, \dots, 30, \dots, 33\}$), nous obtenons alors que $D_{ik,jl} \equiv D_{IJ}$ et la matrice D acquiert alors certaines propriétés pratiques, héritées des propriétés de ρ^{OUT} . Il peut être montré notamment que D est hermitienne ($D_{IJ} = D_{JI}^*$) et bloc-positive ($\forall |\psi\rangle = |u\rangle \otimes |v\rangle : \langle \psi | D | \psi \rangle \geq 0$, où $|u\rangle$ et $|v\rangle$ sont des états arbitraires purs à 1 qubit).

La bloc-positivité de D et la condition de normalisation de ρ^{OUT} [21], impliquent respectivement les conditions suivantes sur les éléments matriciels de la matrice dynamique :

$$0 \leq D_{ij,ij} \leq 1, \quad (2.14)$$

$$\forall j : \sum_{i=0}^3 D_{ij,ij} = 1. \quad (2.15)$$

Étant donnée la nature linéaire de la propagation de la matrice densité (cf. équation (2.13)), la moyenne sur tous les états initiaux pour les fidélités \bar{F}_A et \bar{F}_B peut être réalisée une fois pour toute (cf. l'annexe A pour le calcul détaillé), et conduit à

$$\begin{aligned} \bar{F}_A = \frac{1}{6} & \left(2D_{00,00} + D_{00,22} + D_{02,02} + 2D_{10,10} + D_{10,32} + D_{12,12} \right. \\ & \left. + D_{20,20} + D_{22,00} + 2D_{22,22} + D_{30,30} + D_{32,10} + 2D_{32,32} \right), \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned} \bar{F}_B = \frac{1}{6} & \left(2D_{00,00} + D_{00,12} + D_{02,02} + D_{10,10} + D_{12,00} + 2D_{12,12} \right. \\ & \left. + 2D_{20,20} + D_{20,32} + D_{22,22} + D_{30,30} + D_{32,20} + 2D_{32,32} \right). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Seuls 12 éléments matriciels de D déterminent donc la fidélité moyenne des clones A et B . Les équations (2.16) et (2.17) peuvent être réécrites sous la forme

$$\bar{F}_A = \mathcal{A} \cdot D, \quad \bar{F}_B = \mathcal{B} \cdot D, \quad (2.18)$$

où \mathcal{A} et \mathcal{B} sont des matrices hermitiennes extraites des équations (2.16) et (2.17), la multiplication dans (2.18) étant comprise comme un produit scalaire entre deux matrices 16×16 ,

i.e.

$$\mathcal{A} \cdot D = \sum_{I,J=0}^{15} \mathcal{A}_{IJ} \cdot D_{IJ}. \quad (2.19)$$

De même pour l'interférence, l'équation (2.11) est réécrite comme

$$\mathcal{I}(D) = \sum_{i,k,l} |D_{ik,il}|^2 - \sum_{i,k} |D_{ik,ik}|^2. \quad (2.20)$$

Afin d'avoir une interférence nulle, il est donc clair que nous devons respecter la condition

$$\forall k \neq l : D_{ik,il} = 0. \quad (2.21)$$

En d'autres mots, si nous souhaitons avoir une interférence nulle, D doit avoir la forme d'une matrice dont les éléments matriciels hors-diagonaux des blocs diagonaux sont nuls (en raison de l'équation (2.21)), et dont les éléments matriciels respectent les équations (2.14) (qui traduit la condition que D est bloc-positive), et (2.15) (qui traduit la condition que ρ^{OUT} soit normalisée). Toutes ces conditions conduisent à une forme générale pour une telle matrice dynamique, dont une représentation est donnée dans la figure 2.2.

$\begin{matrix} 2/3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4+w_{99} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4+w_{88} \end{matrix}$	\tilde{D}_{01}^{opt}	\tilde{D}_{02}^{opt}	\tilde{D}_{03}^{opt}
\tilde{D}_{01}^{opt+}	$\begin{matrix} 1/6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4+w_{77} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4+w_{66} \end{matrix}$	\tilde{D}_{12}^{opt}	\tilde{D}_{13}^{opt}
\tilde{D}_{02}^{opt+}	\tilde{D}_{12}^{opt+}	$\begin{matrix} 1/6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4+w_{55} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4+w_{44} \end{matrix}$	\tilde{D}_{23}^{opt}
\tilde{D}_{03}^{opt+}	\tilde{D}_{13}^{opt+}	\tilde{D}_{23}^{opt+}	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4+w_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4+w_{22} \end{matrix}$

FIGURE 2.2 – Forme générale d'une matrice dynamique D d'interférence nulle. Les sous-blocs $D_{I,J}$, $I \neq J$, sont des matrices 4×4 d'éléments complexes. Les termes a_i, b_i, c_i, d_i vérifient les relations $\sum_{i=1}^4 a_i = \sum_{i=1}^4 b_i = \sum_{i=1}^4 c_i = \sum_{i=1}^4 d_i = 1$.

Propagation classique

Comme il a été précisé précédemment, nous entendons par clonage classique d'une distribution de probabilités, la propagation de ces dernières par une application classique stochastique, i.e.

$$\rho_{ii}^{OUT} = \sum_k D_{ik,ik} \rho_{kk}^{IN}, \quad (2.22)$$

où seuls les éléments matriciels diagonaux $D_{ik,ik}$ contribuent. Ce clonage peut être qualifié de classique dans le sens où les cohérences des matrices densités initiale ou finale n'interviennent

pas dans la propagation. En utilisant en plus l'équation (2.15), nous obtenons alors les fidélités classiques moyennes

$$\overline{F}_A^{cl} = \frac{1}{6} (3 + D_{00,00} + D_{10,10} - D_{02,02} - D_{12,12}) , \quad (2.23)$$

$$\overline{F}_B^{cl} = \frac{1}{6} (3 + D_{00,00} + D_{20,20} - D_{02,02} - D_{22,22}) . \quad (2.24)$$

La bloc-positivité de la matrice dynamique D (cf. équation (2.14)) imposant : $0 \leq D_{00,00} + D_{10,10} \leq 1$, $0 \leq D_{02,02}, D_{12,12} \leq 1$, $0 \leq D_{00,00} + D_{20,20} \leq 1$, et $0 \leq D_{02,02}, D_{22,22} \leq 1$, nous obtenons immédiatement des limites pour \overline{F}_A^{cl} et \overline{F}_B^{cl} , à savoir

$$\frac{1}{3} \leq \overline{F}_A^{cl}, \overline{F}_B^{cl} \leq \frac{2}{3} . \quad (2.25)$$

La limite supérieure reproduit celle trouvée dans [12]. Un état pur inconnu à un qubit ne peut être par conséquent cloné classiquement avec une fidélité moyenne supérieure à $2/3$. Il est à noter que la limite supérieure est saturée par une application classique identité (pour laquelle $D_{ik,ik} = \delta_{ik}$), qui copie parfaitement les probabilités, mais non pas les cohérences quantiques.

2.2.4 Optimisation convexe

Les équations (2.16) et (2.17), nous montrent que les fidélités moyennes \overline{F}_A et \overline{F}_B sont des fonctions linéaires (et par conséquent convexes) des éléments matriciels $D_{ik,jl}$. La matrice dynamique D quant à elle, possède 12 éléments matriciels indépendants $D_{ij,ij}$ sur la diagonale (en raison des 4 conditions de normalisation issues de l'équation (2.15)), et six sous-blocs 4×4 (cf. la figure 2.2) avec des éléments matriciels non nuls complexes, de telle façon que D contient in fine 204 variables réelles indépendantes.

Le problème d'optimisation auquel nous nous intéressons est donc le suivant : étant données les matrices hermitiennes \mathcal{A} , \mathcal{B} , et D telles que $\overline{F}_A = \mathcal{A} \cdot D$ et $\overline{F}_B = \mathcal{B} \cdot D$ au sens du produit matriciel défini par l'équation (2.19) (avec D comportant 204 paramètres indépendants, et \overline{F}_A et \overline{F}_B définis par les équations (2.16) et (2.17)), nous recherchons les valeurs des éléments $D_{ik,jl}$ pour lesquels les fonctions \overline{F}_A et \overline{F}_B atteignent des valeurs minimales ou maximales, dans les cas $\overline{F}_A \neq \overline{F}_B$ (cloneurs asymétriques) et $\overline{F}_A = \overline{F}_B$ (cloneurs symétriques).

L'optimisation est réalisée sur l'ensemble de toutes les matrices dynamiques satisfaisant aux contraintes mentionnées précédemment (hermiticité, bloc-positivité, traces partielles unitaires, éléments matriciels hors-diagonaux des blocs diagonaux nuls afin d'avoir une interférence nulle). Le grand nombre de variables indépendantes dans ce problème d'optimisation appelle à une résolution numérique. Heureusement, le problème appartient à la classe des problèmes d'optimisation convexe, puisque les deux fonctions qui doivent être optimisées (\overline{F}_A et \overline{F}_B) sont convexes, de même que le domaine autorisé pour D (en effet l'ensemble des matrices bloc-positives est convexe, et toutes les autres contraintes sont linéaires, i.e. ne changent pas la convexité du domaine autorisé).

On peut noter que si l'on impose la condition plus forte de positivité, le problème se réduit à un exemple de programmation semi-définie (i.e. d'optimisation d'une fonction convexe sur une matrice hermitienne positive, avec d'éventuelles contraintes linéaires). Des routines pour

résoudre de tels problèmes de programmation semi-définie sont à disposition dans la communauté. Alors que l'on pourrait s'inquiéter qu'imposer une condition de positivité plutôt que de bloc-positivité conduise à une perte de généralité, nous montrons que pour un cloneur symétrique avec interférence nulle, la fidélité maximale autorisée de $5/6$ est atteinte dans l'espace des matrices positives, de telle façon qu'étendre l'espace des matrices à celles qui sont blocs-positives, mais non positives, n'améliore pas le résultat.

Dans la suite nous appellerons \mathcal{D} l'ensemble convexe de toutes les matrices dynamiques positives donnant lieu à une interférence nulle. Afin de résoudre ce problème d'optimisation convexe, nous avons utilisé la routine Sedumi du package Yalmip sous Matlab, et trouvé que pour le cas symétrique $\overline{F}_A = \overline{F}_B$, la matrice dynamique optimale D^{opt} donnée par la figure 2.3 conduit à des fidélités moyennes maximales $\overline{F}_A = \overline{F}_B = 5/6$, c'est à dire à la fidélité moyenne maximale pour un cloneur universel symétrique [8, 9, 10], et ce en absence d'interférence.

$$D^{\text{opt}} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

FIGURE 2.3 – Matrice dynamique optimale D^{opt} (cf. [7]).

Il est simple de vérifier que le cloneur quantique que nous avons trouvé est universel, i.e. que tout état initial pur est copié avec la même fidélité $F_A = F_B = 5/6$. Sur la figure 2.4, nous traçons (courbe noire) les valeurs maximales et minimales de \overline{F}_B (ou de \overline{F}_A) pour un \overline{F}_A (ou \overline{F}_B) donné. Nous voyons tout d'abord que la fidélité moyenne minimale pour de tels cloneurs est de $1/3$. Ensuite, nous observons que les fidélités moyennes peuvent atteindre dans le cas asymétrique $\overline{F}_A \neq \overline{F}_B$ une valeur unitaire lorsque l'un des qubits est dans un état complètement aléatoire (i.e. $\overline{F} = 1/2$). La figure montre également qu'il existe tout un domaine de cloneurs asymétriques pour lesquels \overline{F}_A et \overline{F}_B sont tous les deux supérieurs à la limite classique de $2/3$

(zone gris-foncé). Enfin nous retrouvons le résultat que le meilleur cloneur symétrique ne peut excéder des fidélités moyennes de $5/6$ (point rouge).

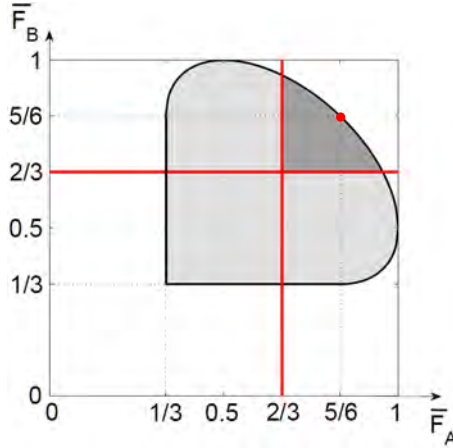


FIGURE 2.4 – Fidélités moyennes minimale et maximale $\overline{F}_B(\overline{F}_A)$ et $\overline{F}_A(\overline{F}_B)$ d'un cloneur sans interférence (lignes noires continues) enfermant le domaine convexe (régions grises) de tous les cloneurs sans interférence possédant une matrice dynamique D positive (cf. [7]).

2.2.5 Classe générale de cloneurs symétriques optimaux sans interférence

Traiter ce problème d'optimisation dans le cadre de la programmation semi-définie nous garantit qu'un extremum local est également un extremum global. Cependant, il n'est pas exclu qu'il puisse exister d'autres machines avec la même fidélité. En effet, nous allons montrer qu'il existe toute une classe de cloneurs symétriques qui atteignent tous la fidélité maximale de $5/6$ sans utiliser d'interférence.

Tout d'abord, remarquons que la matrice dynamique D^{opt} a les valeurs propres 1 (2 fois dégénérée), $1/4$ (8 fois dégénérée), et 0 (6 fois dégénérée). Comme D^{opt} est réelle et symétrique, ses vecteurs propres forment une matrice réelle orthogonale O . L'idée est alors d'ajouter une perturbation hermitienne W à D^{opt} dans le sous-espace des vecteurs propres de D^{opt} qui correspond aux valeurs propres non nulles, et qui laisse les traces partielles inchangées. Si la perturbation est suffisamment faible, la positivité de D^{opt} ne peut être compromise immédiatement. De plus, une perturbation peut être facilement construite de telle façon qu'elle soit orthogonale à la fois à \mathcal{A} et \mathcal{B} dans le sens du produit scalaire (2.19).

Soit w_{IJ} les éléments matriciels de W ($0 \leq I, J \leq 15$) dans la base propre de D^{opt} . En se remplaçant dans la base computationnelle, $\widetilde{W} = OWO^T$, nous trouvons $\mathcal{A} \cdot \widetilde{W} = \mathcal{B} \cdot \widetilde{W} = 5(w_{00} + w_{11})/12$. Les fidélités moyennes $\overline{F}_A = \overline{F}_B$ restent donc inchangées pour

$$w_{11} = -w_{00}. \quad (2.26)$$

Si l'on tient compte de l'obligation que les traces partielles restent inchangées, nous obtenons les conditions supplémentaires

$$w_{00} = w_{11} = 0, \quad (2.27)$$

$$w_{33} + w_{55} + w_{77} + w_{99} = 0, \quad (2.28)$$

$$w_{22} + w_{44} + w_{66} + w_{88} = 0. \quad (2.29)$$

La dernière chose qu'il nous reste à imposer, est que de retour dans la base computationnelle, la perturbation ait toujours les termes hors-diagonaux de ses blocs diagonaux nuls, de façon à conserver l'interférence nulle. Cela implique que $w_{01}, w_{02}, w_{03}, w_{04}, w_{05}, w_{06}, w_{07}, w_{14}, w_{15}, w_{16}, w_{17}, w_{18}, w_{19}, w_{23}, w_{45}, w_{67}, w_{89}$ soient nuls.

Il nous reste donc une large classe de matrices dynamiques \tilde{D}^{opt} qui peuvent être écrites comme 4×4 sous-blocs $\tilde{D}_{IJ}^{\text{opt}}$ de 4×4 éléments complexes avec $\tilde{D}_{IJ}^{\text{opt}} = \left(\tilde{D}_{JI}^{\text{opt}}\right)^\dagger$ et $I, J \in \{0, \dots, 3\}$ où nous obtenons pour les blocs diagonaux les formes suivantes :

$$\tilde{D}_{00}^{\text{opt}} = \text{diag} \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{4} + w_{99}, 0, \frac{1}{4} + w_{88} \right),$$

$$\tilde{D}_{11}^{\text{opt}} = \text{diag} \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{4} + w_{77}, \frac{1}{6}, \frac{1}{4} + w_{66} \right),$$

$$\tilde{D}_{22}^{\text{opt}} = \text{diag} \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{4} + w_{55}, \frac{1}{6}, \frac{1}{4} + w_{44} \right),$$

$$\tilde{D}_{33}^{\text{opt}} = \text{diag} \left(0, \frac{1}{4} + w_{33}, \frac{2}{3}, \frac{1}{4} + w_{22} \right),$$

et pour les blocs hors-diagonaux :

$$\tilde{D}_{01}^{\text{opt}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{w_{09}^*}{\sqrt{6}} & w_{79}^* & 0 & w_{69}^* \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{w_{08}^*}{\sqrt{6}} & w_{78}^* & 0 & w_{68}^* \end{pmatrix}, \quad \tilde{D}_{02}^{\text{opt}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{w_{09}^*}{\sqrt{6}} & w_{59}^* & 0 & w_{49}^* \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{w_{08}^*}{\sqrt{6}} & w_{58}^* & 0 & w_{48}^* \end{pmatrix},$$

$$\tilde{D}_{03}^{\text{opt}} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{2}{3}}w_{13} & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}}w_{12} \\ 0 & w_{39}^* & \sqrt{\frac{2}{3}}w_{09}^* & w_{29}^* \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_{38}^* & \sqrt{\frac{2}{3}}w_{08}^* & w_{28}^* \end{pmatrix}, \quad \tilde{D}_{12}^{\text{opt}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_{57}^* & 0 & w_{47}^* \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} & 0 \\ 0 & w_{56}^* & 0 & w_{46}^* \end{pmatrix},$$

$$\tilde{D}_{13}^{\text{opt}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & w_{37}^* & 0 & w_{27}^* \\ 0 & \frac{w_{13}}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{w_{12}}{\sqrt{6}} \\ 0 & w_{36}^* & 0 & w_{26}^* \end{pmatrix}, \quad \tilde{D}_{23}^{\text{opt}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & w_{35}^* & 0 & w_{25}^* \\ 0 & \frac{w_{13}}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{w_{12}}{\sqrt{6}} \\ 0 & w_{34}^* & 0 & w_{24}^* \end{pmatrix}.$$

Les matrices \tilde{D}^{opt} dépendent donc de 64 paramètres réels qui, lorsqu'ils sont pris suffisamment faibles, laissent ces dernières positives. Nous avons donc trouvé une vaste classe continue de cloneurs quantiques symétriques et sans interférence, atteignant la fidélité moyenne maximale de $5/6$. Il s'avère également que toutes ces machines sont universelles, l'imposition d'une interférence nulle entraînant des conditions sur les éléments w_{ij} qui conduisent à ce résultat supplémentaire.

2.2.6 Cas du cloneur de Buzek et Hillery

Dans la définition de leur cloneur, Buzek et Hillery spécifient seulement ce qu'il arrive à l'état $|\psi\rangle \otimes |0\rangle$ (cf. équation (2.6)), laissant le sort de l'état $|\psi\rangle \otimes |1\rangle$ inconnu (en d'autres mots seule une partie de la matrice dynamique est définie). Si l'on souhaite pouvoir comparer nos cloneurs sans interférence de matrices dynamiques \tilde{D}^{opt} avec celui de Buzek-Hillery, sur la base de la matrice dynamique, nous devons donc étendre la définition de ce dernier afin qu'il détermine également le devenir de l'état initial $|1\rangle$ pour le second qubit. Si nous choisissons comme extension naturelle,

$$\begin{aligned} |0\rangle_A |1\rangle_B |Q\rangle_X &\rightarrow |0\rangle_A |1\rangle_B |Q_2\rangle_X + (|0\rangle_A |0\rangle_B + |1\rangle_A |1\rangle_B) |Y_2\rangle_X, \\ |1\rangle_A |1\rangle_B |Q\rangle_X &\rightarrow |1\rangle_A |0\rangle_B |Q_3\rangle_X + (|0\rangle_A |0\rangle_B + |1\rangle_A |1\rangle_B) |Y_3\rangle_X, \end{aligned} \quad (2.30)$$

on peut montrer que le cloneur de Buzek-Hillery est un membre de la classe de cloneurs de matrices dynamiques \tilde{D}^{opt} .

2.3 Conclusion partielle

Nous avons donc montré l'existence en absence d'interférence de toute une classe de cloneurs universels et symétriques dont les fidélités moyennes de clonage atteignent la valeur maximale de $5/6$. En étudiant la structure de la matrice dynamique D , nous comprenons comment il est possible que des cloneurs quantiques surpassent en absence d'interférence l'efficacité des cloneurs classiques : le clonage classique correspond à une matrice dynamique diagonale ; le clonage quantique à une matrice dynamique potentiellement pleine ; le clonage quantique sans interférence à une matrice dynamique dont les éléments non diagonaux des blocs diagonaux sont nuls. En d'autres mots, en absence d'interférence, la propagation d'une matrice densité ne relie aucune probabilité aux cohérences. Ce dernier point influence les fidélités, et les éléments correspondants de la matrice dynamique peuvent être utilisés pour optimiser ces dernières au delà de la valeur maximale classique. Il reste intrigant de trouver que pour un clonage quantique optimal nous observons finalement que seules les probabilités contribuent aux probabilités, tandis que les cohérences ne les modifient pas. Il serait intéressant de trouver si ce résultat peut être généralisé à des dimensions d'ordre plus élevé ou à du clonage faisant intervenir un plus grand nombre de qubits.

Chapitre 3

Amplification de spin

Dans ce manuscrit, nous désignons par S_k le $k^{\text{ème}}$ spin d'une chaîne et par \hat{I}_k , \hat{X}_k , \hat{Y}_k et \hat{Z}_k , l'opérateur identité et les opérateurs de Pauli agissant sur le spin S_k .

3.1 Intérêt des chaînes de spins

3.1.1 Problème du transfert de spin

Le transfert d'un état quantique d'un bout à l'autre d'une chaîne de spins, a attiré une attention considérable depuis le papier de Bose [22]. Dans ce dernier, un état quantique initial est stocké sur un spin situé à l'un des bouts de la chaîne, tandis que tous les autres spins sont dans l'état down. On laisse par la suite ce système évoluer librement, et après un certain temps, suffisant pour que l'onde de spin qui est déclenchée atteigne le bout de la chaîne, l'état du dernier spin est lu. De façon générale, le dernier spin se retrouve intriqué avec le reste de la chaîne, et si l'on ignore le reste de la chaîne, on se retrouve avec un état mélangé (cf. figure 3.1).

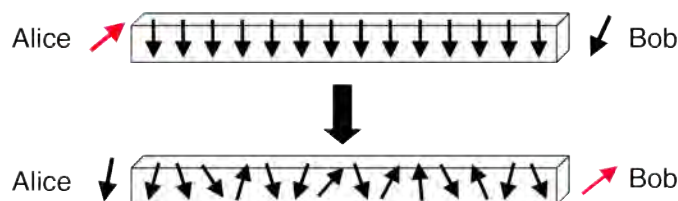


FIGURE 3.1 – Transfert d'un spin d'un bout à l'autre d'une chaîne linéaire.

Bose a montré que la fidélité d'un tel transfert à travers une chaîne de spins avec des couplages de Heisenberg fixes entre plus proches voisins, excède la valeur maximale de $2/3$ qu'il est possible d'atteindre classiquement (cf. [12]), et ce pour des chaînes allant jusqu'à 80 spins (cf. figure 3.2, où est représentée en fonction de la longueur N de la chaîne la valeur maximale \overline{F}_{\max} atteinte au cour du temps par la fidélité de transfert le long de la chaîne

(définie par $\overline{F}_{\max}(t) = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \langle \psi_{in} | \rho^{OUT}(t) | \psi_{in} \rangle$) pour une fenêtre temporelle fixe suffisamment importante).

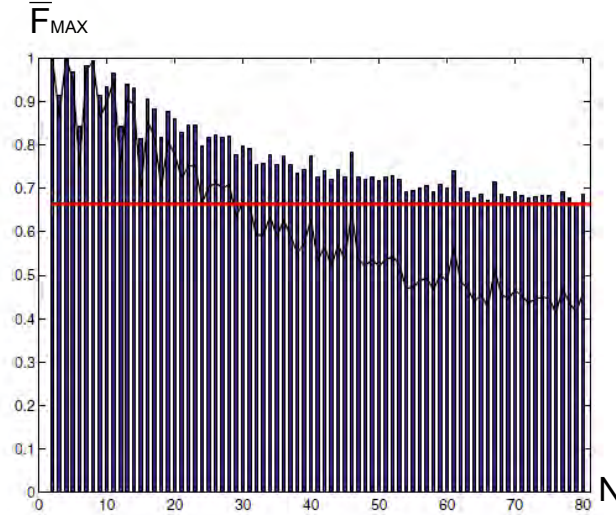


FIGURE 3.2 – Fidélités maximales de transfert d’un spin d’un bout à l’autre d’une chaîne linéaire, en fonction de la taille de la chaîne (cf. [22]). Le trait horizontal rouge représente la valeur classique maximale pour un tel transfert de $2/3$.

3.1.2 Transfert d’état parfait

Ce travail a été généralisé dans plusieurs directions [23, 24, 25, 26, 27, 28, 18, 29, 30]. Des efforts substantiels ont notamment été faits pour accroître la fidélité du transfert d’état. Un transfert d’état parfait a même été prédit pour des chaînes dont les couplages augmentent comme la racine carrée de la position le long de la chaîne (relativement à son centre) conduisant de façon effective à la rotation d’un spin collectif large [31] (cf. figure 3.3, où sont montrés les couplages entre plus proches voisins pour une chaîne de 6 spins). Il a également été montré comment la diminution du couplage entre les spins terminaux et le reste de la chaîne, permet de réaliser un transfert d’état parfait, au prix cependant d’un ralentissement du transfert [32].

$$J_n \propto \begin{array}{cccccc} \sqrt{1 \cdot 5} & \sqrt{2 \cdot 4} & \sqrt{3 \cdot 3} & \sqrt{4 \cdot 2} & \sqrt{5 \cdot 1} & \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ n = & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{array}$$

FIGURE 3.3 – Couplages entre plus proches voisins permettant un transfert de spin parfait pour une chaîne de 6 spins (cf. [23]).

3.1.3 Détection d'un spin unique

Grâce aux techniques actuelles d'imagerie à résonance magnétique (I.R.M.), nous sommes capables de sonder la structure interne tridimensionnelle de la matière. Cependant, descendre en dessous de résolutions de l'ordre du micromètre, reste encore aujourd'hui un véritable challenge. Communément, le plus petit élément de volume détectable contient 10^{12} spins nucléaires (pour des techniques de microscopie I.R.M.) ou 10^7 spins électroniques (pour des techniques de microscopie à résonance de spin électronique). On le voit, détecter de faibles quantités de spins, voire de façon ultime, la présence d'un spin unique, s'avère particulièrement difficile et nécessite la mise en place de méthodes plus puissantes. La microscopie à force de résonance magnétique (M.F.R.M.) est capable d'une telle prouesse, et apparaît comme un dispositif de lecture idéal pour un ordinateur quantique qui utiliserait le spin comme bit quantique.

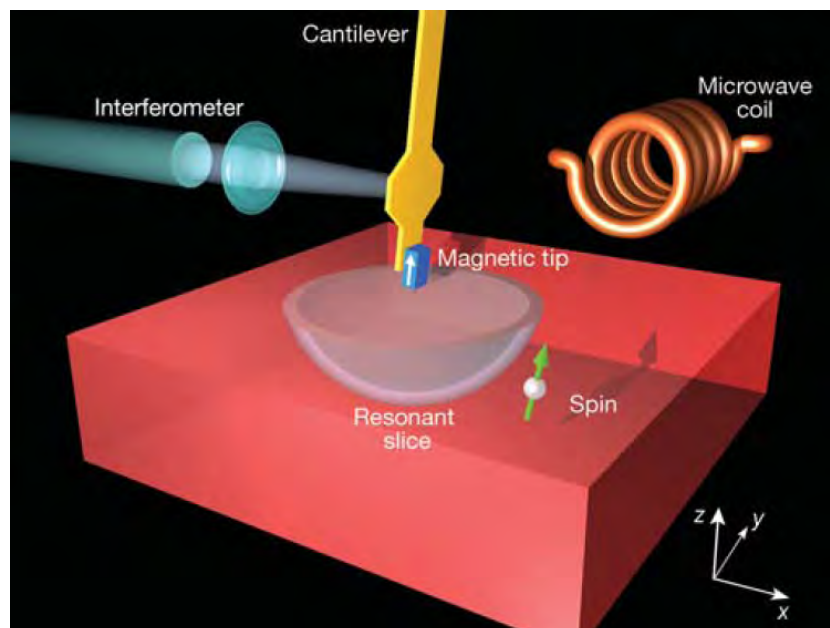


FIGURE 3.4 – Procédé de détection d'un spin unique (cf. [33]).

Une telle expérience de M.F.R.M. a été proposée par Rugar, Budakian, Mamin et Chui dans un article de Nature de Juillet 2004 (cf. figure 3.4). Les auteurs utilisent tout d'abord un échantillon d'oxyde de silicium (SiO_2) irradié par rayons γ , procédé qui entraîne la localisation de spins électroniques en des points précis du matériau. Puis ils disposent une tige en silicium, possédant en son extrémité une pointe ferromagnétique (de SmCo , située 125 nm au dessus de l'oxyde de silicium). Le champs magnétique engendré par la pointe ferromagnétique, ajouté à un champs magnétique externe, définissent alors un domaine de résonance magnétique pour le spin électronique (en forme de bol, comme cela apparaît sur le schéma), où est vérifiée la relation $B(x, y, z) = \frac{\omega}{\gamma}$, où ω est la pulsation du champs externe, et γ le rapport gyromagnétique de l'électron. La tige est par la suite mise en oscillation, entraînant un déplacement d'avant en arrière de la région de résonance. Si le spin est rencontré, il se retrouve alors inversé, exerçant en retour une force sur la tige qui se traduit par un décalage de la fréquence d'oscillation de cette dernière, écart que l'on peut mesurer, traduisant ainsi la présence de l'électron. Cependant,

la force exercée par l'électron sur la pointe ferromagnétique est extrêmement faible : pour un gradient de champs de l'ordre du gauss par nanomètre pour la pointe, la force est de l'ordre de l'atto-newton ($10^{-18}N$), ce qui est approximativement un million de fois plus faible que les forces mises en jeu dans les expériences de microscopie à force atomique (M.F.A.). Détecter un spin unique reste donc encore aujourd'hui un véritable challenge.

3.1.4 Mesure d'un spin unique

Les points quantiques (quantum dots en anglais) sont des boîtes de semi-conducteurs de l'ordre du nanomètre capables de confiner en leur sein un nombre donné d'électrons (1, 2, etc.). Il a été montré [34] que la lecture de l'état de spin up ou down d'un électron unique confiné dans un tel système était possible. Une mesure directe du spin électronique est particulièrement difficile en raison de la faiblesse du moment magnétique de l'électron, et une méthode ingénieuse a donc été proposée qui consiste à corrélérer l'état du spin électronique, à différents états de charges du point quantique. Mesurer la charge du point quantique (chose beaucoup plus aisée à réaliser) permet alors de déterminer dans quel état (up ou down) est le spin. Ce procédé (appelé conversion spin-charge) fonctionne sur le principe suivant : supposons que notre point quantique ne comporte qu'un unique électron, et qu'il existe une différence d'énergie entre l'état de spin down et l'état de spin up de ce dernier (nous désignons par $|ES\rangle$ (excited-state) l'état le plus énergétique des deux, et par $|GS\rangle$ (ground-state) l'état fondamental). Supposons que notre point quantique se situe à côté d'un réservoir de potentiel électrochimique μ_{res} , de telle façon que l'électron puisse par effet tunnel sortir du point quantique lorsqu'il est dans l'état $|ES\rangle$ uniquement (cf. figure 3.5). Selon que nous mesurons ou non un électron en sortie du point quantique, l'électron est alors respectivement dans l'état $|ES\rangle$ ou dans l'état $|GS\rangle$. Nous voyons donc qu'avec un tel procédé nous disposons d'une méthode nous permettant de discriminer entre les deux états de spins up ou down d'un électron unique.

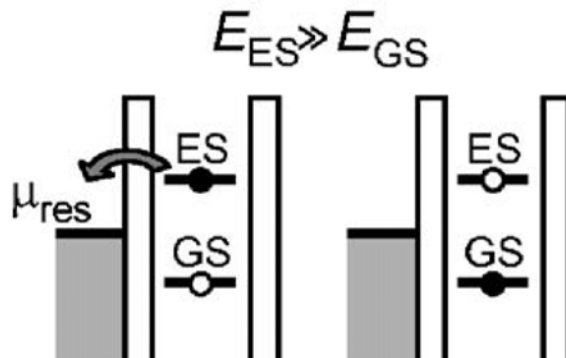


FIGURE 3.5 – Diagramme énergétique du procédé de conversion spin-charge (cf. [34]).

3.1.5 Philosophie de l'amplification de spin

Comme nous venons de le voir détecter la présence d'un spin unique n'est pas chose aisée, mais en effectuer la mesure ne l'est pas plus. En effet si l'utilisation des points quantiques rend possible de discerner l'état de spin up de celui de spin down, il ne permet pas pour autant de déterminer l'état d'un système qui serait dans une superposition des deux. Il s'avère donc indispensable de trouver une solution à ce problème de la mesure d'un spin unique. Le phénomène d'amplification de spin propose de contourner le problème en convertissant l'information initialement portée par le spin dont on souhaite mesurer l'état, en un état de polarisation d'un ensemble macroscopique de spins.

Supposons que le spin dont on souhaite réaliser la mesure soit dans un état

$$|\Lambda_1\rangle = \alpha |\downarrow_1\rangle + \beta |\uparrow_1\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1,$$

et que l'on dispose d'un ensemble supplémentaire de $N - 1$ spins initialement dans l'état down $|\Lambda_A\rangle = |\downarrow_2 \dots \downarrow_N\rangle = |\downarrow_A\rangle$, que l'on qualifera de système amplificateur. Notre objectif est d'agir sur le système total initial

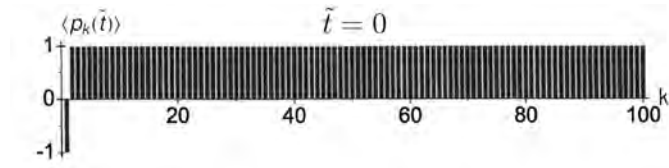
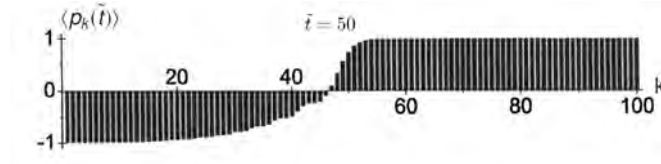
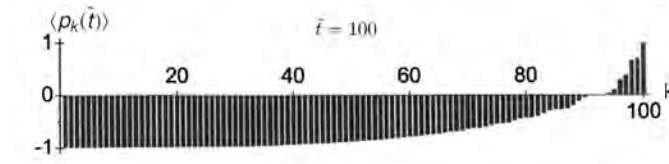
$$|\Lambda^{IN}\rangle = |\Lambda_1\rangle|\Lambda_A\rangle = \alpha |\downarrow_1\rangle|\downarrow_A\rangle + \beta |\uparrow_1\rangle|\downarrow_A\rangle$$

au moyen d'une transformation unitaire \hat{U} , afin de faire évoluer ce dernier vers un état de Greenberger-Horne-Zeilinger (état GHZ)

$$\begin{aligned} |\Lambda^{OUT}\rangle &= \hat{U}|\Lambda^{IN}\rangle \\ &= \alpha |\downarrow_1\rangle|\downarrow_A\rangle + \beta |\uparrow_1\rangle|\uparrow_A\rangle. \end{aligned}$$

Une réalisation possible de cette transformation \hat{U} est une porte quantique CNOT entre deux qubits représentés respectivement par le spin objet de notre mesure et notre dispositif de mesure (le système amplificateur), flippant l'état du second qubit lorsque le premier qubit est dans l'état $|\uparrow_1\rangle$, et ne faisant rien lorsque le premier qubit est dans l'état $|\downarrow_1\rangle$. Il est important de souligner que \hat{U} n'est pas définie de façon unique. Lee et Khitrin [35] ont montré qu'une telle opération unitaire pouvait s'écrire sous la forme $\hat{U} = \text{CNOT}_{N-1,N} \dots \text{CNOT}_{1,2}$, où $\text{CNOT}_{m,n}$ est une porte CNOT agissant sur le $n^{\text{ème}}$ qubit avec comme qubit de contrôle le $m^{\text{ème}}$ qubit. L'avantage d'une telle transformation unitaire est que si notre système se trouve initialement dans l'état $|\downarrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle \dots |\uparrow_N\rangle$, $\text{CNOT}_{1,2}$ fait tout d'abord flipper le $2^{\text{ème}}$ spin, puis $\text{CNOT}_{2,3}$ le $3^{\text{ème}}$ spin, etc., et nous observons alors la propagation d'un front de spins. Une telle évolution unitaire a pour avantage de ne faire intervenir que des relations entre plus proches voisins indépendamment de la taille du système qui peut dès lors être arbitrairement grand.

Lee et Khitrin ont été les premiers à proposer un système physique présentant un tel effet de *Domino quantique*, où un spin initialement flippé dans un état donné, conduit à la propagation d'un front de spins. Sur les figures 3.6, 3.7 et 3.8 (extraites de [35]), nous pouvons observer les résultats trouvés par Lee et Khitrin pour une chaîne linéaire de 100 spins où sont représentées pour différentes valeurs de $\tilde{t} = \omega_1 t$ (où $\hbar\omega_1$ est l'amplitude du champs dans lequel est plongé la chaîne), les polarisations individuelles moyennes de chaque spin de la chaîne. Nous constatons bien la propagation d'un front de spins du début de la chaîne vers la fin de cette dernière qui concoure à amplifier l'état initial de S_1 sur l'ensemble de la chaîne.

FIGURE 3.6 – Polarisations individuelles moyennes pour $\tilde{t} = 0$.FIGURE 3.7 – Polarisations individuelles moyennes pour $\tilde{t} = 50$.FIGURE 3.8 – Polarisations individuelles moyennes pour $\tilde{t} = 100$.

3.1.6 Équivalence entre transfert de spin et amplification de spin

Kay a montré qu'il existait une équivalence profonde entre le problème de transfert de spin et celui d'amplification de spin, permettant ainsi de transférer les connaissances acquises dans l'étude de l'un des domaines à l'autre domaine [36]. En effet, dans les deux cas, la même représentation de l'opérateur de Hamilton peut être obtenue en changeant les couplages et les fonctions de base en même temps. Pour l'amplification de spin, on considère une base de fonctions dont les k premiers spins sont down (les autres up), et un hamiltonien qui flippe seulement le spin adjacent au domaine défini par les spins down, induisant ainsi un effet de domino. Pour le transfert de spin, les fonctions de base intéressantes correspondent aux états possédant une unique excitation localisée sur l'un des N spins, et l'hamiltonien consiste uniquement en des couplages d'échange entre plus proches voisins. Nous présentons plus en détail cette équivalence dans la section 3.2.2.

3.1.7 Influence de la topologie, de la géométrie et des conditions aux frontières

Récemment, un grand intérêt s'est porté sur les effets géométriques et topologiques dans les réseaux de spins. Le transfert d'état quantique a été étendu à des réseaux plus compliqués, comme par exemple des hypercubes [23], des réseaux étoilés à 1D [36], des réseaux étoilés à 3D [37] (cf. figure 3.9). Des portes quantiques topologiques ont été également proposées dans laquelle la chaîne est fermée en une boucle, et traversée par un flux de Aharonov-Bohm approprié [38]. Très récemment, les effets de la topologie ont été exploités pour contrôler localement la dynamique dans des réseaux de spins [39].

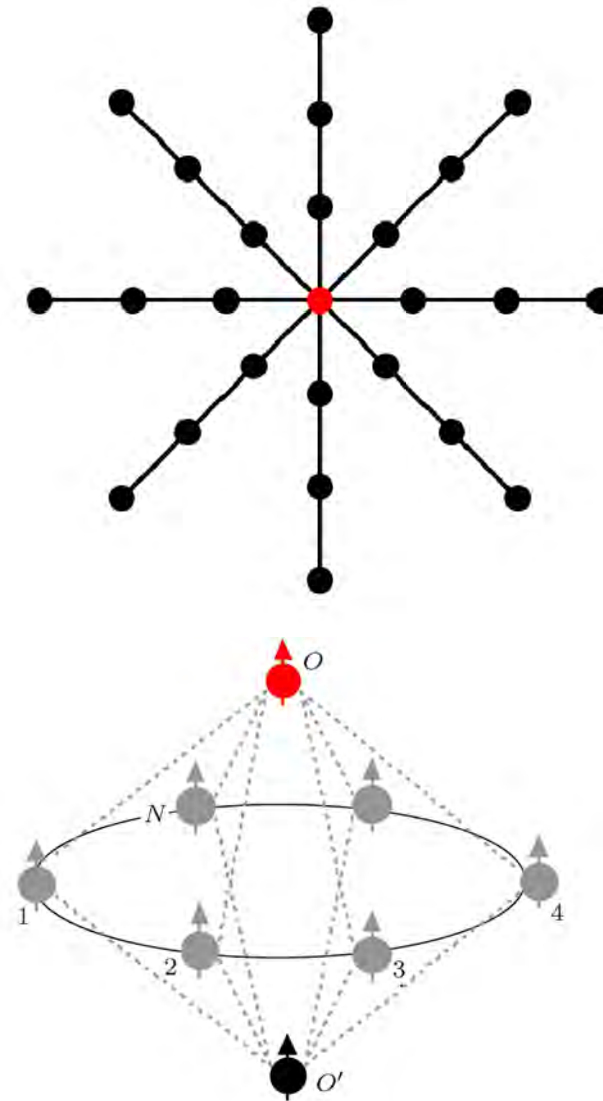


FIGURE 3.9 – Réseaux de spins 1D et 3D effectuant la mesure du spin en rouge (cf. [36] et [37]).

Dans ce chapitre, nous étudions l'influence des conditions aux frontières sur l'amplification de spin dans les chaînes de spins. Par conditions aux frontières nous entendons dans ce manuscrit à la fois le fait qu'une chaîne soit ouverte (chaînes linéaires) ou fermée (chaînes circulaires), mais également les différentes façons que nous avons de fermer une chaîne linéaire en une chaîne circulaire (fermeture qui dépend de la nature des couplages que l'on autorise entre les premiers et derniers spins de la chaîne linéaire de départ une fois celle-ci refermée).

On pourrait penser que ces conditions aux frontières jouent un rôle négligeable dans la limite des très longues chaînes (i.e. pour $N \rightarrow \infty$). En effet, l'effet de ces dernières s'évanouit dans la limite thermodynamique dans la plupart des situations en physique. Cependant des exceptions bien connues existent en la présence de corrélations à longue portée, comme par exemple lors d'une transition de phase quantique [40]. Mais de façon surprenante, il s'avère que dans les chaînes de spins, bien loin de toute transition de phase, les conditions aux frontières peuvent modifier de façon drastique le comportement de la dynamique. La présence ou l'absence d'un simple couplage entre le premier et le dernier spin peut conduire à des polarisations totales moyennes (fonctions du temps) macroscopiquement différentes, même dans la limite de chaînes arbitrairement longues. Nous montrons qu'il s'opère une *bifurcation* dans l'espace de Hilbert qui explique ce comportement macroscopiquement différent. Dépendant des conditions aux frontières, des fonctions de base peuvent être atteintes qui diffèrent tant par leurs propriétés physiques que par la dimension de leur base en fonction de N . Nous montrons également qu'il existe différentes façons de fermer une chaîne linéaire en une chaîne circulaire, qui non seulement modifient de façon drastique le comportement physique de la chaîne, mais encore conduit à des représentations matricielles non équivalentes de l'hamiltonien, et à des dynamiques différentes ne parcourant pas la même partie de l'espace de Hilbert total.

3.1.8 Approche semi-classique de l'amplification de spin

Il est bien connu que les calculs quantiques et classiques sont très différents. Cette situation se retrouve notamment dans les manifestations du chaos sur un système quantique qui montrent de profondes différences avec celles du chaos classique. Néanmoins, il a été possible d'acquérir une bonne compréhension du chaos quantique à partir du chaos classique en utilisant des méthodes semi-classiques. Celles-ci permettent de remplacer les propagateurs quantiques exacts par des sommes sur des chemins classiques, pondérées par un facteur de phase et un poids approprié (cf. le livre de Fritz Haake [41]). Ces techniques semi-classiques sont d'autant plus précises que les actions accumulées le long des chemins sont larges devant \hbar . Un critère pratique est souvent la valeur des nombres quantiques comme la valeur absolue du moment cinétique en unité de \hbar (que l'on peut relier à la dimension de l'espace de Hilbert). En ajustant cette dimension, une description semi-classique peut faire le pont entre le monde quantique et le monde classique.

Pour étudier les chaînes dans la limite des grands N , nous introduisons une telle approche semi-classique, dont la précision augmente avec N (se reporter notamment à l'article [42] pour plus de détails). Celle-ci nous permet notamment de dériver une expression analytique des polarisations totales moyennes dans le cas de systèmes pour lesquels la dimension des bases dans lesquelles se déroule la dynamique évolue linéairement avec la taille de la chaîne (voir section 3.2.6 et 3.3.3).

3.1.9 Introduction de la base des $|\Gamma_{k,l}\rangle$

Dans toute la suite de ce chapitre sur l'amplification de spin, nous allons étudier différents systèmes et caractériser les bases dans lesquelles se déroule la dynamique. A cette fin, nous prenons le temps d'introduire pour une chaîne de N spins la base des états $|\Gamma_{k,l}\rangle$ ($k \in [1, N-1]$, $l \in [1, N]$), définis comme les états comportant k spins down consécutifs (on considère dans le cadre de cette définition que S_1 et S_N sont consécutifs) dont le dernier (en tournant dans le sens des aiguilles d'une montre) correspond au spin S_k . Ci-dessous nous donnons par exemple pour une chaîne de 5 spins, les différents états $|\Gamma_{k,l}\rangle$ (dans l'ordre $|\Gamma_{1,1}\rangle, \dots, |\Gamma_{1,5}\rangle, \dots, |\Gamma_{4,1}\rangle, \dots, |\Gamma_{4,5}\rangle$) :

$$\begin{array}{cccccc}
|\downarrow_1\uparrow_2\uparrow_3\uparrow_4\uparrow_5\rangle & |\uparrow_1\downarrow_2\uparrow_3\uparrow_4\uparrow_5\rangle & |\uparrow_1\uparrow_2\downarrow_3\uparrow_4\uparrow_5\rangle & |\uparrow_1\uparrow_2\uparrow_3\downarrow_4\uparrow_5\rangle & |\uparrow_1\uparrow_2\uparrow_3\uparrow_4\downarrow_5\rangle \\
|\downarrow_1\uparrow_2\uparrow_3\uparrow_4\downarrow_5\rangle & |\downarrow_1\downarrow_2\uparrow_3\uparrow_4\uparrow_5\rangle & |\uparrow_1\downarrow_2\downarrow_3\uparrow_4\uparrow_5\rangle & |\uparrow_1\uparrow_2\downarrow_3\downarrow_4\uparrow_5\rangle & |\uparrow_1\uparrow_2\uparrow_3\downarrow_4\downarrow_5\rangle \\
|\downarrow_1\uparrow_2\uparrow_3\downarrow_4\downarrow_5\rangle & |\downarrow_1\downarrow_2\uparrow_3\uparrow_4\downarrow_5\rangle & |\downarrow_1\downarrow_2\downarrow_3\uparrow_4\uparrow_5\rangle & |\uparrow_1\downarrow_2\downarrow_3\downarrow_4\uparrow_5\rangle & |\uparrow_1\uparrow_2\downarrow_3\downarrow_4\downarrow_5\rangle \\
|\downarrow_1\uparrow_2\downarrow_3\downarrow_4\downarrow_5\rangle & |\downarrow_1\downarrow_2\uparrow_3\downarrow_4\downarrow_5\rangle & |\downarrow_1\downarrow_2\downarrow_3\uparrow_4\downarrow_5\rangle & |\downarrow_1\downarrow_2\downarrow_3\downarrow_4\uparrow_5\rangle & |\uparrow_1\downarrow_2\downarrow_3\downarrow_4\downarrow_5\rangle .
\end{array}$$

Chacun des systèmes étudiés dans les sections à venir possède une base qui est un sous-ensemble de l'ensemble des $N(N-1)$ états $|\Gamma_{k,l}\rangle$ que nous venons de définir. Cependant, comme nous le verrons dans les sections 3.2 (pour le système $\hat{H}^{(L)}$) et 3.3.3 (pour le système $\hat{H}_3^{(C)}$), pour certains systèmes le nombre d'états parcourus par la dynamique est linéaire par rapport à la taille de la chaîne (i.e. les bases sont de dimension $\mathcal{O}(N)$). Pour ces derniers nous préférons utiliser comme base de référence, la base des états $|\Lambda_k\rangle$ ($k \in [1, N-1]$) définis comme les états possédant k spins down consécutifs en partant de S_1 , i.e. $|\Lambda_k\rangle = |\downarrow_1 \dots \downarrow_k \uparrow_{k+1} \dots \uparrow_N\rangle$ qui ne sont autres que les éléments $|\Gamma_{k,k}\rangle$ ($k \in [1, N-1]$) de la base précédente.

3.2 Chaîne linéaire

3.2.1 Modèle physique de Lee et Khitrin

Lee et Khitrin dans un article de 2005 [35], ont présenté un exemple de modèle physique permettant d'implémenter l'amplification de spin au moyen d'une chaîne linéaire d'Ising unidimensionnelle de N_L spins possédant des interactions constantes entre plus proches voisins et irradiée à résonance par un champs faible transverse monochromatique. Initialisant le système dans l'état où tous les spins sont up, le flip du spin S_1 permet de déclencher la propagation d'un front de spins (on parle d'effet *domino quantique*) conduisant à l'amplification de l'état de S_1 sur l'ensemble des autres spins de la chaîne. Ce système est décrit par l'hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega_0}{2} \sum_{k=1}^{N_L} \hat{Z}_k + \hbar\omega_1 \sum_{k=1}^{N_L} \hat{X}_k \cos(\omega_0 t) + \frac{J}{4} \sum_{k=1}^{N_L} \hat{Z}_k \hat{Z}_{k+1}, \quad (3.1)$$

où $\hbar\omega_0$ est la différence d'énergie entre les niveaux excité et au repos d'un spin isolé, J est la constante d'interaction entre plus proches voisins, et $\hbar\omega_1 \ll J \ll \hbar\omega_0$ est l'amplitude de l'irradiation. Si l'on considère la dynamique dans un référentiel tournant à la fréquence $\omega_0/2\pi$ autour de l'axe Oz , nous obtenons un nouvel hamiltonien $\hat{H}_{\text{rot}} = \hat{U}_{\text{rot}}^+ \hat{H} \hat{U}_{\text{rot}} - \hat{H}_0$, où

$\hat{U}_{rot} = \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar)$ avec $\hat{H}_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \sum_{k=1}^{N_L} \hat{Z}_k$. En utilisant l'approximation des ondes tournantes (approximation RWA) qui nous permet de ne conserver que les termes faiblement oscillants dans l'expression de \hat{H}_{rot} , nous obtenons

$$\hat{H}_{rot} = \hat{H}_x + \hat{H}_{zz} = \frac{\hbar\omega_1}{2} \sum_{k=1}^{N_L} \hat{X}_k + \frac{J}{4} \sum_{k=1}^{N_L} \hat{Z}_k \hat{Z}_{k+1} \quad (3.2)$$

qui n'est autre que l'hamiltonien d'une chaîne de Ising unidimensionnelle placée dans un champ transverse monochromatique de pulsation ω_1 . Afin de mieux comprendre la dynamique associée à ce système, nous nous plaçons en représentation d'interaction, i.e.

$$\hat{H}_I(t) = \exp(-i\hat{H}_{zz}t/\hbar) \hat{H}_x \exp(i\hat{H}_{zz}t/\hbar) .$$

Pour $\hbar\omega_1 \ll J$, on peut ne considérer que la partie indépendante du temps de l'hamiltonien $\hat{H}_I(t)$, une procédure appelée *approximation séculaire* et adoptée par Lee et Khitrin [35]. Cette dernière approximation nous conduit à l'hamiltonien effectif séculaire

$$\hat{H}^{LK} = \frac{\hbar\omega_1}{4} \sum_{k=2}^{N_L-1} \hat{X}_k (\hat{1}_{k-1} \hat{1}_{k+1} - \hat{Z}_{k-1} \hat{Z}_{k+1}) . \quad (3.3)$$

Cet hamiltonien a la signification physique suivante : lorsque le spin S_k est entouré par deux voisins (S_{k-1} et S_{k+1}) de signes opposés, c'est seulement alors que l'opérateur $(\hat{1}_{k-1} \hat{1}_{k+1} - \hat{Z}_{k-1} \hat{Z}_{k+1})$ prend une valeur non nulle, permettant l'action de l'opérateur \hat{X}_k qui flippe alors le spin S_k . Nous pouvons observer sur la figure 3.10 le comportement d'une chaîne linéaire placée dans les conditions décrites par Lee et Khitrin, et initialisée dans l'état $|\Lambda_1\rangle = |\downarrow_1 \uparrow_2 \dots \uparrow_{N_L}\rangle$. Pour un tel système, la dynamique n'évolue plus dans l'espace de Hilbert total (engendré par les 2^{N_L} vecteurs de la base computationnelle) mais dans un sous-espace de ce dernier de taille $N_L - 1$. En effet, si nous désignons par $|\Lambda_k\rangle = |\downarrow_1 \dots \downarrow_k \uparrow_{k+1} \dots \uparrow_{N_L}\rangle$, avec $k \in [0, N_L]$, l'état dont les k premiers spins sont dans l'état down et tous les autres dans l'état up, nous voyons que \hat{H}^{LK} couple $|\Lambda_1\rangle$ à $|\Lambda_2\rangle$, puis de façon générale, $|\Lambda_k\rangle$ à $|\Lambda_{k-1}\rangle$ et $|\Lambda_{k+1}\rangle$ pour $k \in [2, N_L - 2]$, et enfin $|\Lambda_{N_L-1}\rangle$ à $|\Lambda_{N_L-2}\rangle$. La dynamique repart ensuite dans le sens opposé (avec $|\Lambda_k\rangle$ couplé à $|\Lambda_{k-1}\rangle$ et $|\Lambda_{k+1}\rangle$ pour k allant cette fois de $N_L - 2$ à 2), jusqu'à revenir à $|\Lambda_2\rangle$ qui n'est couplé en retour qu'avec l'état $|\Lambda_1\rangle$. Il est à noter que les états où tous les spins sont dans l'état up ou dans l'état down sont des états propres de \hat{H}^{LK} de valeur propre 0 et sont donc stationnaires. L'action de \hat{H}^{LK} est résumé par l'équation (3.4) ci-dessous

$$\hat{H}^{LK} |\Lambda_k\rangle = \begin{cases} 0 & \text{si } k = 0 \text{ ou } k = N_L \\ \frac{\hbar\omega_1}{2} |\Lambda_2\rangle & \text{si } k = 1 \\ \frac{\hbar\omega_1}{2} (|\Lambda_{k-1}\rangle + |\Lambda_{k+1}\rangle) & \text{si } k \in [2, N_L - 2] \\ \frac{\hbar\omega_1}{2} |\Lambda_{N_L-2}\rangle & \text{si } k = N_L - 1 \end{cases} . \quad (3.4)$$

Nous pouvons donc déclencher la propagation d'un front de spins en flipant uniquement le spin initial d'une chaîne dont tous les spins sont initialement dans le même état (up ou down). En d'autres mots, le système agit comme un amplificateur de spin qui amplifie l'état

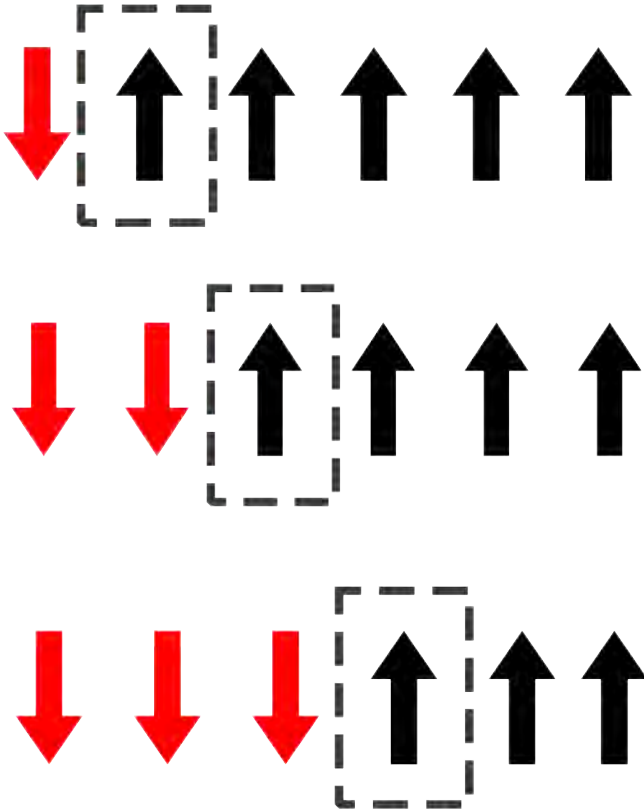


FIGURE 3.10 – Chaîne unidimensionnelle d’Ising sous condition d’irradiation résonnante. Le spin entouré, en résonance, se voit flipé dans l’état down.

initial d’un spin en début de chaîne en un état macroscopique de polarisation de la chaîne toute entière. Il est à noter que la restriction de la dynamique au sous-espace des $N_L - 1$ états $|\Lambda_k\rangle$, est conséquente au fait que le spin initialement excité se trouve en début de chaîne. Un même spin situé en milieu de chaîne conduit en effet à une dynamique complètement différente dans laquelle la base visitée est de taille quadratique relativement à la taille du système (en $\mathcal{O}(N_L^2)$). Nous renvoyons le lecteur aux sections 3.3.1 et 3.3.2 où sont étudiées des chaînes circulaires (décrites par les hamiltoniens $\hat{H}_1^{(C)}$ et $\hat{H}_2^{(C)}$) dans lesquelles la propagation simultanée de deux fronts de spins à droite et à gauche du spin S_1 (seul spin initialement dans l’état down) équivaut à implémenter cette condition.

3.2.2 Équivalence entre le problème d’amplification de spin et le problème de transfert de spin

Modèle de Lee-Khitrin généralisé

Dans la présente section nous nous intéressons au cas plus général d’un système dans lequel les couplages entre plus proches voisins ne sont pas nécessairement identiques entre tous les spins. Dans un tel système, l’hamiltonien d’une chaîne linéaire a alors pour expression (J_k

$$\hat{H}_T^{(L)}|\Phi_k\rangle = \begin{cases} J_1|\Phi_2\rangle & \text{si } k = 1 \\ J_{k-1}|\Phi_{k-1}\rangle + J_k|\Phi_{k+1}\rangle & \text{si } k \in [2, N_L - 2] \\ J_{N_L-2}|\Phi_{N_L-2}\rangle & \text{si } k = N_L - 1 \end{cases} . \quad (3.9)$$

Équivalence entre les deux systèmes

La dynamique observée pour $\hat{H}_T^{(L)}$ est donc la même que pour $\hat{H}_G^{(L)}$ et les deux problèmes suivants sont donc équivalents : étudier l'amplification de spin dans une chaîne linéaire de N_L spins, ou le transfert de spin dans une chaîne linéaire de $N_L - 1$ spins [36]. Cette connexion profonde entre deux types de problèmes apparemment différents, que l'on rencontre souvent dans des domaines variés de la physique où des systèmes différents se retrouvent gouvernés par des lois identiques, est particulièrement intéressante car elle permet de transposer certains des résultats obtenus dans un autre domaine au domaine étudié et de développer certaines intuitions qui n'auraient pas émergé aisément sans cela.

3.2.3 Propagateur quantique en terme de fonctions de Bessel

A partir de cette section nous ne nous intéressons plus qu'au cas d'une chaîne linéaire de N_L spins avec couplages constants entre plus proches voisins ($J_k = J$, $k \in [1, N_L - 2]$), i.e.

$$\hat{H}^{(L)} = \frac{J}{2} \sum_{k=2}^{N_L-1} \hat{X}_k (\hat{1}_{k-1} \hat{1}_{k+1} - \hat{Z}_{k-1} \hat{Z}_{k+1}) . \quad (3.10)$$

Dans la base des $|\Lambda_k\rangle$, $k \in [1, N_L - 1]$, nous obtenons par exemple dans le cas $N_L = 9$ la représentation matricielle de $\hat{H}^{(L)}$ suivante

$$\tilde{H}^{(L)} = J \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

FIGURE 3.12 – Représentation matricielle de $\hat{H}^{(L)}$ dans la base des $|\Lambda_k\rangle$, $k \in [1, N_L - 1]$, pour $N_L = 9$.

Vecteurs propres et valeurs propres de $\hat{H}^{(L)}$

Dans le sous-espace de Hilbert dans lequel se déroule la dynamique, $\hat{H}^{(L)}$ est équivalent à un modèle de liaisons fortes pour une chaîne unidimensionnelle ouverte (*tight-binding model*) avec couplages constants entre plus proches voisins. Les fonctions propres de $\hat{H}^{(L)}$ sont donc les ondes de Bloch (3.11) et les valeurs propres sont donnés par (3.12).

$$|\psi_p^{(L)}\rangle = \sqrt{\frac{2}{N_L}} \sum_{k=1}^{N_L-1} \sin\left(\frac{p\pi k}{N_L}\right) |\Lambda_k\rangle \quad (3.11)$$

$$\lambda_p^{(L)} = 2J \cos\left(\frac{p\pi}{N_L}\right), p \in [1, N_L - 1] \quad (3.12)$$

La connaissance des valeurs propres et des vecteurs propres de $\hat{H}^{(L)}$ nous permet d'obtenir une expression analytique des éléments matriciels du propagateur quantique (dans la base des $|\Lambda_k\rangle$), à savoir

$$\begin{aligned} U_{k,k_0}^{(L)}(t) &= \langle \Lambda_k | e^{-i\hat{H}^{(L)}t/\hbar} | \Lambda_{k_0} \rangle \\ &= \sum_{p=1}^{N_L-1} \langle \Lambda_k | \psi_p^{(L)} \rangle e^{-i\lambda_p^{(L)}t/\hbar} \langle \psi_p^{(L)} | \Lambda_{k_0} \rangle \\ &= \sum_{p=1}^{N_L-1} F_{k,k_0}^{(L)}(p, \tilde{t}) \\ F_{k,k_0}^{(L)}(p, \tilde{t}) &\equiv \frac{2}{N_L} \sin\left(\frac{p\pi k}{N_L}\right) \sin\left(\frac{p\pi k_0}{N_L}\right) e^{-i\tilde{t} \cos\left(\frac{p\pi}{N_L}\right)}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

où nous avons défini $\tilde{t} = 2Jt/\hbar$ (que l'on peut assimiler à une variable temporelle que l'on aurait adimensionnée). Dans toute la suite du manuscrit, les différentes grandeurs physiques observées, telles que les polarisations individuelles ou totales moyennes et les fidélités de polarisation, seront toujours tracées en fonction de \tilde{t} . En dépit de la simplification exponentielle du problème (la dynamique ne se déroulant non pas dans l'espace de Hilbert total de dimension 2^{N_L} , mais uniquement dans un sous-espace de ce dernier de dimension $N_L - 1$), les $(N_L - 1)^2$ éléments matriciels du propagateur $\hat{U}^{(L)}(\tilde{t})$ contiennent toujours chacun une somme de $\mathcal{O}(N_L)$ termes (cf. l'équation (3.13)). Nous montrons dans les sections suivantes qu'une approximation très précise de $\hat{U}^{(L)}(\tilde{t})$ peut être obtenue ne faisant intervenir qu'un nombre très restreint de termes de cette somme (le nombre augmentant avec le domaine temporel pour lequel on souhaite étudier la dynamique).

Représentation de $\hat{U}^{(L)}(\tilde{t})$ en terme de fonctions de Bessel

Nous pouvons remarquer dans un premier temps que $F_{k,k_0}^{(L)}(p, \tilde{t}) = F_{k,k_0}^{(L)}(-p, \tilde{t})$, et que $F_{k,k_0}^{(L)}(0, \tilde{t}) = F_{k,k_0}^{(L)}(N_L, \tilde{t}) = 0$. Ces propriétés nous permettent de doubler le domaine de sommation qui apparaît dans l'expression du propagateur $\hat{U}^{(L)}(\tilde{t})$ de l'équation (3.13) et d'utiliser la formule de sommation de Poisson, obtenant

$$\begin{aligned} U_{k,k_0}^{(L)}(\tilde{t}) &= \frac{1}{2} \sum_{p=-N_L}^{N_L-1} F_{k,k_0}^{(L)}(p, \tilde{t}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-N_L-\frac{1}{2}}^{N_L-\frac{1}{2}} e^{2i\pi mp} F_{k,k_0}^{(L)}(p, \tilde{t}) dp . \end{aligned} \quad (3.14)$$

En utilisant que $F_{k,k_0}^{(L)}(p, \tilde{t}) = F_{k,k_0}^{(L)}(2N_L + p, \tilde{t})$, i.e. que tous les éléments de matrice ont une $2N_L$ périodicité en p , et que les intégrales sont donc sur une période de l'intégrande, il nous est possible de décaler le domaine d'intégration comme nous le souhaitons. En utilisant que la fonction de Bessel est définie par

$$J_k(\tilde{t}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i(kp - \tilde{t} \sin(p))} dp ,$$

et en posant $x = p\pi/N_L$, nous arrivons à une expression des éléments matriciels du propagateur en terme de fonctions de Bessel, à savoir

$$\begin{aligned} U_{k,k_0}^{(L)}(\tilde{t}) &= \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{2N_L} e^{2i\pi mp} F_{k,k_0}^{(L)}(p, \tilde{t}) dp \\ &= -\frac{1}{4\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} e^{2iN_L mx - i\tilde{t} \cos x} [e^{i(k+k_0)x} + e^{-i(k+k_0)x}] dx \\ &\quad + \frac{1}{4\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} e^{2iN_L mx - i\tilde{t} \cos x} [e^{i(k-k_0)x} + e^{-i(k-k_0)x}] dx \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^{k+k_0+2N_L m} J_{k+k_0+2N_L m}(\tilde{t}) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^{-(k+k_0+2N_L m)} J_{-(k+k_0+2N_L m)}(\tilde{t}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^{k-k_0+2N_L m} J_{k-k_0+2N_L m}(\tilde{t}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^{-(k-k_0+2N_L m)} J_{-(k-k_0+2N_L m)}(\tilde{t}) . \end{aligned}$$

Si nous utilisons l'égalité $J_{-k}(\tilde{t}) = (-1)^k J_k(\tilde{t})$, nous pouvons simplifier ce résultat, et obtenons

$$U_{k,k_0}^{(L)}(\tilde{t}) = (-i)^{k-k_0} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^{N_L m} J_{k-k_0+2N_L m}(\tilde{t}) - (-i)^{k-k_0} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^{k_0+N_L m} J_{k+k_0+2N_L m}(\tilde{t}). \quad (3.15)$$

Dans le cas particulier où $k_0 = 1$ (i.e. le système démarre dans l'état $|\Lambda_1\rangle$), et en utilisant l'identité $J_{k-1}(\tilde{t}) + J_{k+1}(\tilde{t}) = 2(k/\tilde{t}) J_k(\tilde{t})$, nous obtenons pour tout $k \in [1, N_L - 1]$

$$U_{k,1}^{(L)}(\tilde{t}) = \frac{2(-i)^{k-1}}{\tilde{t}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^{N_L m} (k + 2N_L m) J_{k+2N_L m}(\tilde{t}). \quad (3.16)$$

L'équation (3.16) satisfait la condition initiale $U_{k,1}^{(L)}(0) = \delta_{k,1}$. Pour des temps inférieurs ou égaux à N_L (une unique propagation de gauche à droite), et en utilisant que $|J_k(\tilde{t})| \ll 1$ lorsque $k \gg |\tilde{t}|$ et $k \gg 1$, $U_{k,1}^{(L)}(\tilde{t})$ peut être approximé par le terme $m = 0$, i.e.

$$U_{k,1}^{(L)}(\tilde{t}) \simeq \frac{2(-i)^{k-1}}{\tilde{t}} k J_k(\tilde{t}). \quad (3.17)$$

La figure 3.13, montre un exemple de la dépendance temporelle de $U_{k,1}^{(L)}(\tilde{t})$ pour $N_L = 20$ et $k = 5$. Des désaccords visibles (de l'ordre de 5%) entre le propagateur exact (obtenu numériquement à partir de l'équation (3.13)) et son approximation par une unique fonction de Bessel (équation (3.17)) n'apparaissent qu'à partir de $\tilde{t} \gtrsim 27$.

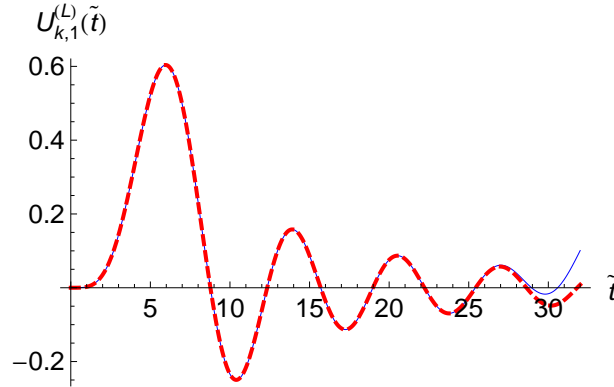


FIGURE 3.13 – Approximation par une unique fonction de Bessel ($m = 0$ dans l'équation (3.16), courbe rouge pointillée) de $U_{k,1}^{(L)}(\tilde{t})$ (équation (3.13), courbe bleue continue) pour $k = 5$, $N_L = 20$.

Chaque terme additionnel dans l'équation (3.16) augmente la largeur du domaine où l'approximation est valide de N_L (si on considère k termes dans la somme de l'équation (3.16), l'approximation est valide pour $\tilde{t} \lesssim kN_L$). Par exemple, toujours avec $N_L = 20$ et $k = 5$, si l'on

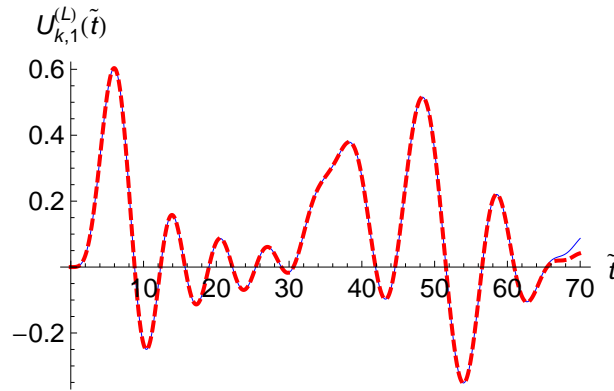


FIGURE 3.14 – Approximation avec trois fonctions de Bessel ($m = -1, 0, 1$ dans l'équation (3.16), courbe rouge pointillée) de $U_{k,1}^{(L)}(\tilde{t})$ (équation (3.13), courbe bleue continue) pour $k = 5, N_L = 20$.

considère deux fonctions de Bessel supplémentaires (termes $m = \pm 1$), nous n'observons cette fois de déviations par rapport au propagateur exact qu'à partir de $\tilde{t} \gtrsim 65$ comme nous pouvons le constater sur la figure 3.14.

Physiquement, ces termes ($m = \pm 1, \pm 2, \dots$, dans l'équation (3.16)) correspondent à des fronts de spins réfléchis par les frontières droite et gauche de la chaîne. Nous comprenons donc pourquoi pour des temps pour lesquels les fronts de spins n'ont pas le temps d'atteindre ces frontières, ces termes ne sont pas nécessaires à la description de la dynamique.

3.2.4 Approximation semi-classique du propagateur : l'approximation WKB

Afin de pouvoir obtenir une expression analytique de la polarisation totale moyenne (pour des temps suffisamment faibles pour que le front de spins n'atteigne pas la fin de la chaîne, i.e. pour $\tilde{t} \lesssim N_L$), une autre simplification de l'équation (3.17) s'impose. A partir de [43] (terme principal de la formule 9.3.15), nous obtenons une approximation de la fonction de Bessel (que nous qualifions d'approximation WKB), donnée par l'équation (3.18)

$$J_k^{WKB}(\tilde{t}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{\tilde{t}^2 - k^2}} \cos(\phi_k(\tilde{t})) : k < \tilde{t} \quad (3.18)$$

$$\phi_k(\tilde{t}) = k \arccos\left(\frac{k}{\tilde{t}}\right) - \sqrt{\tilde{t}^2 - k^2} + \frac{\pi}{4} .$$

Ce nom d'approximation WKB (pour Wentzel-Kramers-Brillouin) est motivé par le fait que la fonction de Bessel est approximée par une somme de deux fonctions exponentielles dont l'amplitude et la phase varient lentement, de façon analogue avec la méthode bien connue de l'approximation WKB (une autre approximation de $U_{k,1}^{(L)}(\tilde{t})$ peut également être obtenue en considérant une solution semi-classique à l'équation de Schrödinger, i.e. en calculant un propagateur de Van Vleck, résultat présenté dans la section 3.3.3 pour des chaînes circulaires). L'approximation WKB présente cependant le défaut de s'effondrer au voisinage du point tournant

(qui correspond ici à $k = \tilde{t}$). Dans la figure 3.15 nous pouvons constater que l'approximation WKB de la fonction de Bessel $J_k(100)$, tracée comme fonction de k (courbe rouge pointillée), ne coïncide avec la fonction exacte (courbe bleue continue) que jusqu'à une certaine valeur $k_m = \tilde{t} - \Delta$ pour ensuite diverger au voisinage de $k = \tilde{t} = 100$.

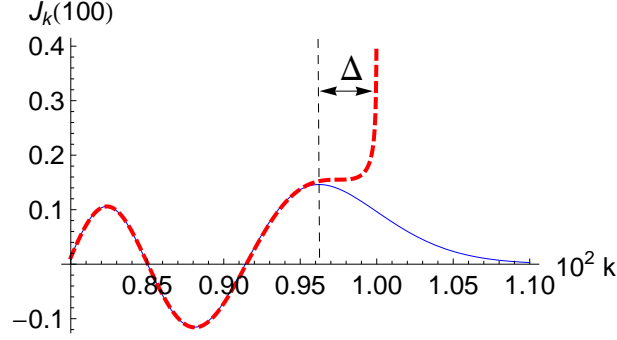


FIGURE 3.15 – Comparaison de la fonction de Bessel exacte (courbe bleue continue) avec son approximation WKB (courbe rouge pointillée) issue de l'équation (3.18).

Pour $k > \tilde{t}$, $\phi_k(\tilde{t})$ devient complexe et l'équation (3.18) doit être remplacée par une fonction décroissant exponentiellement. Une nouvelle approximation de la fonction de Bessel est donc nécessaire si nous souhaitons faire le lien entre les deux régimes, et nous utilisons qu'au voisinage du point tournant, les fonctions de Bessel peuvent être approximées par une fonction de Airy ([43] : équation 9.3.23) suivant

$$J_k(\tilde{t}) \approx \left(\frac{2}{\tilde{t}}\right)^{\frac{1}{3}} Ai(z), \quad z = \left(\frac{2}{\tilde{t}}\right)^{\frac{1}{3}} (k - \tilde{t}). \quad (3.19)$$

Cette nouvelle approximation nous permet de déterminer précisément le domaine pour lequel l'approximation WKB est valide, et celui pour lequel elle ne l'est pas. Comme nous pouvons le voir sur la figure 3.15, la fonction de Bessel exacte et son approximation WKB coïncident pratiquement jusqu'au dernier maximum de $J_k(\tilde{t})$. Après cela, l'approximation WKB tend vers l'infini comme $(\tilde{t} - k)^{-\frac{1}{4}}$ alors que $J_k(\tilde{t})$ tend vers 0. La valeur maximale k_m pour laquelle l'approximation WKB est valide est par conséquent donnée par la position du dernier maximum de la fonction de Airy $Ai(z)$, lequel a lieu pour $z_m = 1.01879$ (et donc pour $k_m \approx 96.25$ dans le cas de $J_k(100)$). La largeur de la *mauvaise* région où l'approximation WKB n'est pas valable, est donc donnée par $\Delta(\tilde{t}) = \tilde{t} - k_m = (\tilde{t}/2)^{\frac{1}{3}} z_m \approx 0.8 \tilde{t}^{\frac{1}{3}}$, qui croît avec le temps mais lentement comparé à \tilde{t} .

3.2.5 Comportement des polarisations individuelles moyennes

Avant de s'intéresser à la polarisation totale moyenne de la chaîne, il est intéressant d'observer le comportement des polarisations individuelles moyennes de chaque spin. La polarisation individuelle du spin S_k est définie par l'action de l'opérateur \hat{Z}_k sur les états $|\Lambda_m\rangle$, à savoir

$$p_k^m = \langle \Lambda_m | \hat{Z}_k | \Lambda_m \rangle = \begin{cases} 1 & \text{si } k > m \\ -1 & \text{si } k \leq m \end{cases} \quad (3.20)$$

$$|\Lambda_m\rangle = |\downarrow_1 \dots \downarrow_m \uparrow_{m+1} \dots \uparrow_{N_L}\rangle.$$

Si notre système est initialement dans l'état $|\Lambda_1\rangle = |\Lambda_1(0)\rangle$, à l'instant \tilde{t} ce dernier a évolué dans l'état $|\Lambda_1(\tilde{t})\rangle = \sum_{m=1}^{N_L-1} c_m^{(L)}(\tilde{t})|\Lambda_m\rangle = \sum_{m=1}^{N_L-1} U_{m,1}^{(L)}(\tilde{t})|\Lambda_m\rangle$ (étant donné que $c_m^{(L)}(\tilde{t}) = \sum_{l=1}^{N_L-1} U_{m,l}^{(L)}(\tilde{t})c_l^{(L)}(0)$ et $c_l^{(L)}(0) = \delta_{l,1}$). Finalement nous obtenons la dépendance temporelle des polarisations individuelles moyennes donnée par

$$\begin{aligned} \langle p_k(\tilde{t}) \rangle &= \langle \Lambda_1(\tilde{t}) | \hat{Z}_k | \Lambda_1(\tilde{t}) \rangle \\ &= \sum_{m=1}^{N_L-1} \left| U_{m,1}^{(L)}(\tilde{t}) \right|^2 \langle \Lambda_m | \hat{Z}_k | \Lambda_m \rangle \\ &= \sum_{m=1}^{N_L-1} \left| U_{m,1}^{(L)}(\tilde{t}) \right|^2 p_k^m . \end{aligned} \quad (3.21)$$

Sur la figure 3.16, nous pouvons observer l'évolution temporelle des polarisations individuelles moyennes pour une chaîne de $N_L = 20$ spins. Nous constatons que la dynamique observée est bien celle d'un front de spins se propageant du début de la chaîne vers la fin de cette dernière, contribuant ainsi à amplifier sur l'ensemble de la chaîne l'état du spin initial et réalisant donc par là l'amplification de spin souhaitée.

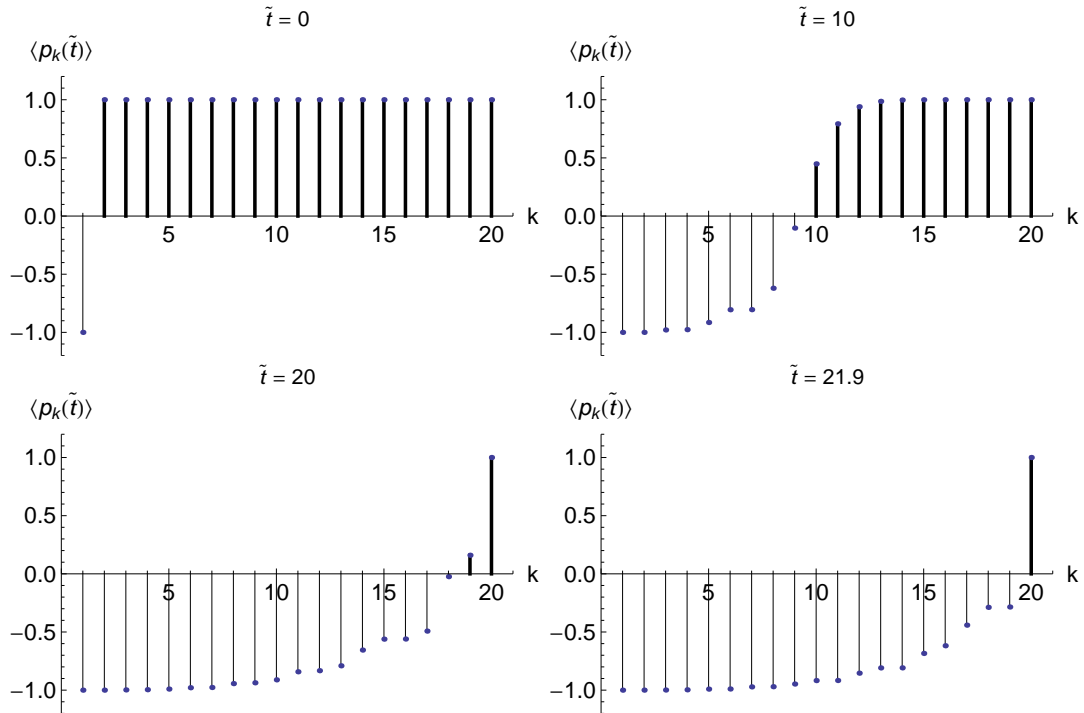


FIGURE 3.16 – Evolution temporelle des polarisations individuelles moyennes pour une chaîne de $N_L = 20$ spins, pour $\tilde{t} = 0, 10, 20$ et 21.9 où le changement de la polarisation totale est maximal.

3.2.6 Comportement linéaire de la polarisation totale moyenne

Nous nous intéressons maintenant à la polarisation non plus d'un spin individuel mais de la chaîne prise dans son ensemble. L'observation temporelle de la polarisation totale moyenne a pour intérêt particulier de nous montrer la vitesse avec laquelle se propage la polarisation du spin S_1 sur l'ensemble de la chaîne. L'opérateur de polarisation totale est défini par $\hat{P}^{(L)} = \sum_{k=1}^{N_L} \hat{Z}_k$. Avec un système initialement dans l'état $|\Lambda_1\rangle$, et en utilisant que $\langle \Lambda_m | \hat{P}^{(L)} | \Lambda_m \rangle = N_L - 2m$ (puisque $|\Lambda_m\rangle$ possède m spins down et $N_L - m$ spins up), nous obtenons alors une polarisation totale moyenne dont la dépendance temporelle est donnée par

$$\begin{aligned} \langle P^{(L)}(\tilde{t}) \rangle &= \langle \Lambda_1(\tilde{t}) | \hat{P}^{(L)} | \Lambda_1(\tilde{t}) \rangle \\ &= \sum_{m=1}^{N_L-1} \langle \Lambda_m | \hat{P}^{(L)} | \Lambda_m \rangle \left| U_{m,1}^{(L)}(\tilde{t}) \right|^2 \\ &= \sum_{m=1}^{N_L-1} (N_L - 2m) \left| U_{m,1}^{(L)}(\tilde{t}) \right|^2. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Afin d'obtenir une approximation de l'expression (3.22), nous utilisons les résultats obtenus précédemment (équations (3.17) et (3.18)) pour obtenir une approximation WKB du propagateur et donc de $\langle P^{(L)}(\tilde{t}) \rangle$. Ce faisant, nous devons faire attention de n'utiliser cette dernière que dans son domaine de validité (i.e. pour $m \lesssim \tilde{t} - \Delta(\tilde{t})$). En définissant $[x]$ comme la partie entière de x , nous obtenons alors l'équation (3.23)

$$\begin{aligned} \langle P_{WKB}^{(L)}(\tilde{t}) \rangle &= \sum_{m < \tilde{t}} (N_L - 2m) \left| U_{m,1}^{(L)}(\tilde{t}) \right|^2 \\ &= \sum_{m=1}^{[\tilde{t}-\Delta(\tilde{t})]} (N_L - 2m) \left| U_{m,1}^{(L)}(\tilde{t}) \right|^2 \\ &\quad + \sum_{m=[\tilde{t}-\Delta(\tilde{t})+1]}^{[\tilde{t}]} (N_L - 2m) \left| U_{m,1}^{(L)}(\tilde{t}) \right|^2 \\ &= \frac{8}{\pi \tilde{t}^2} \sum_{m=1}^{[\tilde{t}-\Delta(\tilde{t})]} (N_L - 2m) \frac{m^2}{\sqrt{\tilde{t}^2 - m^2}} \frac{1 + \cos(2\phi_m(\tilde{t}))}{2} \\ &\quad + \sum_{m=[\tilde{t}-\Delta(\tilde{t})+1]}^{[\tilde{t}]} (N_L - 2m) \left| U_{m,1}^{(L)}(\tilde{t}) \right|^2 \end{aligned} \quad (3.23)$$

En utilisant que dans l'intervalle où l'approximation WKB est valide les termes de la somme de (3.23) sont des fonctions lisses de m , et que la somme peut dès lors être approximée par une intégrale, nous obtenons la réécriture suivante

$$\langle P_{WKB}^{(L)}(\tilde{t}) \rangle \simeq \frac{4}{\pi \tilde{t}^2} \int_0^{\tilde{t}} (N_L - 2m) \frac{m^2}{\sqrt{\tilde{t}^2 - m^2}} dm$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{4}{\pi\tilde{t}^2} \int_{\tilde{t}-\Delta(\tilde{t})}^{\tilde{t}} (N_L - 2m) \frac{m^2}{\sqrt{\tilde{t}^2 - m^2}} dm \\
& + \frac{4}{\pi\tilde{t}^2} \sum_{m=1}^{[\tilde{t}-\Delta(\tilde{t})]} (N_L - 2m) \frac{m^2}{\sqrt{\tilde{t}^2 - m^2}} \cos(2\phi_m(\tilde{t})) \\
& + \sum_{m=[\tilde{t}-\Delta(\tilde{t})+1]}^{[\tilde{t}]} (N_L - 2m) \left| U_{m,1}^{(L)}(\tilde{t}) \right|^2 .
\end{aligned} \tag{3.24}$$

La première intégrale dans (3.24) est proportionnelle à \tilde{t} et vaut $N_L - \frac{16\tilde{t}}{3\pi}$. La seconde intégrale est de l'ordre $\sqrt{\tilde{t}\Delta(\tilde{t})} \approx \tilde{t}^{2/3}$ (rappelons que $\Delta(\tilde{t}) \propto \tilde{t}^{1/3}$), qui est petit comparé à \tilde{t} dès que \tilde{t} est suffisamment important. La somme contenant $\cos(2\phi_m(\tilde{t}))$ contient beaucoup de termes de signes opposés qui s'annulent mutuellement et nous pouvons donc la négliger. Enfin, la dernière somme peut être majorée par le nombre de termes $\Delta(\tilde{t})$ fois la valeur maximale des termes de la somme $(N_L - 2\tilde{t}) \left[2 \left(\frac{2}{\tilde{t}} \right)^{1/3} Ai(z_m) \right]^2 \propto \tilde{t}^{1/3}$. Le résultat est à nouveau $\propto \tilde{t}^{2/3}$ et peut à nouveau être négligé relativement à \tilde{t} quand \tilde{t} est suffisamment important. L'erreur relative qui est faite si l'on néglige les trois derniers termes de l'équation (3.24) décroît alors comme $\tilde{t}^{-1/3}$, pour \tilde{t} suffisamment large (ce qui est le cas si l'on considère des chaînes arbitrairement longues), et finalement nous obtenons l'approximation suivante

$$\left\langle P_{WKB}^{(L)}(\tilde{t}) \right\rangle \simeq N_L - \frac{16\tilde{t}}{3\pi} . \tag{3.25}$$

Alors que cette approximation pourrait sembler grossière, elle montre un très bon accord avec le résultat exact (pour des temps suffisamment importants pour que $\tilde{t}^{1/3} \ll \tilde{t}^{2/3} \ll \tilde{t}$, mais suffisamment faibles pour ne pas permettre pas au front de spins d'atteindre la fin de la chaîne). E.g., pour $N_L = 50$ et $\tilde{t} = 40$, la représentation de Bessel (qui est exacte ici) donne $\langle P^{(L)}(\tilde{t}) \rangle = -17.922$ tandis que le résultat WKB donne $\langle P_{WKB}^{(L)}(\tilde{t}) \rangle \approx N_L - \frac{16\tilde{t}}{3\pi} \approx -17.9601$, i.e. reproduit le résultat de Bessel à 3 chiffres significatifs prêts. Dans la figure 3.17, nous comparons la polarisation totale moyenne exacte (issue de l'équation (3.22)) avec son approximation semi-classique (issue de l'équation (3.25)) pour une chaîne de 50 spins. De l'équation (3.25) nous dérivons pour des temps $\tilde{t} \lesssim N_L$ la vitesse de spin-flip : $|v^{(L)}| = \frac{16}{3\pi} \approx 1.70$.

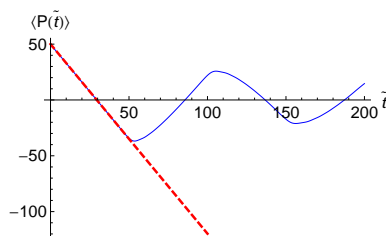


FIGURE 3.17 – Comparaison entre les polarisations totales moyennes : résultat exact (équation (3.22), courbe bleue continue) et terme linéaire de l'approximation WKB (équation(3.25), courbe rouge pointillée), pour $N_L = 50$.

3.3 Chaînes circulaires

Nous nous penchons maintenant sur le cas des chaînes circulaires, et nous interrogeons sur les différentes façons qu'il existe de les obtenir à partir d'une chaîne linéaire, en implémentant des conditions particulières de fermeture. Une chaîne linéaire de N_L spins peut être fermée de plusieurs façons en une chaîne circulaire :

1. Par identification des spins S_{N_L+1} et S_1 : dans ce système, seuls les spins S_2 à S_{N_L} sont susceptibles de flipper, le spin S_1 restant dans l'état down (cf. équation (3.26)),
2. Par identification de S_{N_L+1} et S_1 , et introduction d'un terme additionnel autorisant S_1 à flipper également : dans ce système, tous les spins peuvent flipper (cf. équation (3.28)),
3. Par introduction d'un couplage particulier entre les premiers et les derniers spins de la chaîne linéaire : deux tels exemples sont développés dans les sections 3.3.3 (cf. équation (3.30)) et 3.3.4 (cf. équation (3.39)).

Dans tous les systèmes étudiés par la suite, S_1 désigne le spin à partir duquel tous les autres sont numérotés (en tournant dans le sens des aiguilles d'une montre). De plus lorsque nous parlons de chaînes circulaires, nous noterons N_C le nombre de spins.

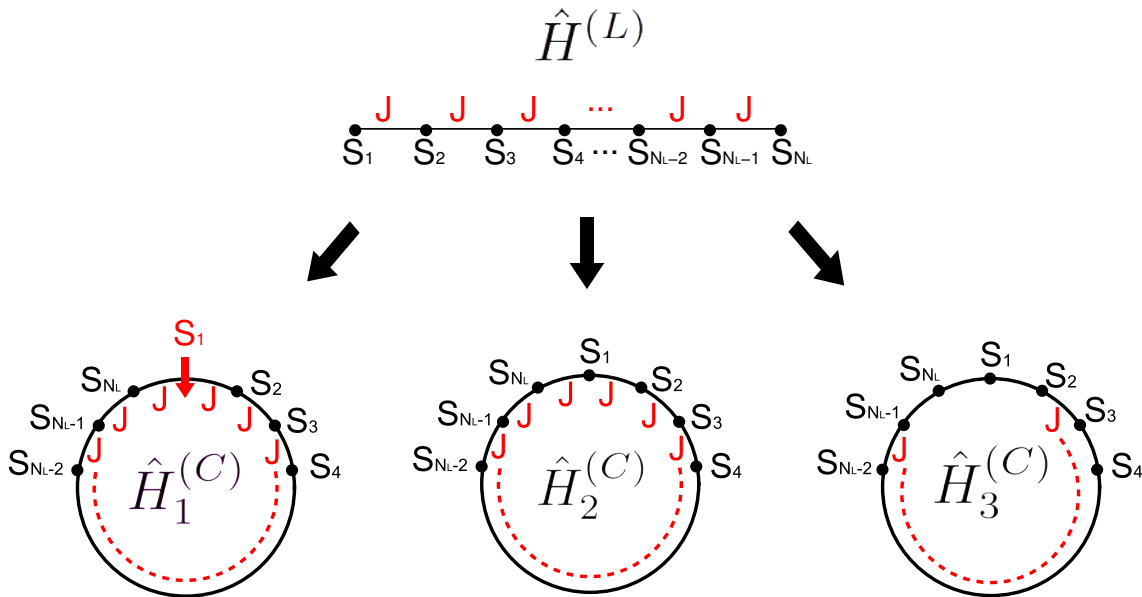


FIGURE 3.18 – Fermeture de la chaîne linéaire (correspondant à $\hat{H}^{(L)}$) en des chaînes circulaires (correspondant de gauche à droite à $\hat{H}_1^{(C)}$, $\hat{H}_2^{(C)}$ et $\hat{H}_3^{(C)}$).

3.3.1 $\hat{H}_1^{(C)}$: Fermeture par identification de S_{N_L+1} et S_1

La façon la plus simple de fermer une chaîne linéaire en une chaîne circulaire consiste à identifier S_{N_L+1} avec S_1 (obtenant ainsi une chaîne circulaire de $N_C = N_L$ spins). Cela impose des conditions aux frontières équivalentes sur la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger mais également implique l'apparition d'un terme supplémentaire par rapport à l'hamiltonien de la chaîne linéaire (puisque nous autorisons S_{N_C} à flipper en fonction des états de S_{N_C-1} et de $S_{N_C+1} = S_1$). Nous devons donc ajouter le terme $k = N_C$ à l'hamiltonien $\hat{H}^{(L)}$, i.e.

$$\hat{H}_1^{(C)} = \frac{J}{2} \sum_{k=2}^{N_C} \hat{X}_k \left(\hat{1}_{k-1} \hat{1}_{k+1} - \hat{Z}_{k-1} \hat{Z}_{k+1} \right). \quad (3.26)$$

Il est à noter que S_1 ne peut toujours pas flipper puisque aucun terme ne contient \hat{X}_1 (dans la section 3.3.2 nous considérons la situation d'une symétrie de rotation implémentée au niveau de l'hamiltonien où l'introduction d'un terme de flip additionnel permet également à S_1 de flipper).

Étude de la dynamique et couplages entre états

Si nous initialisons le système dans l'état $|\Gamma_{1,1}\rangle = |\downarrow_1 \uparrow_2 \dots \uparrow_{N_C}\rangle$, la dynamique se retrouve restreinte à l'intérieur d'un sous-espace comportant $N_C(N_C - 1)/2$ états de base $|\Gamma_{k,l}\rangle$ ($k \in [1, N_C - 1]$ et $l \leq k$), où les $|\Gamma_{k,l}\rangle$ sont les états définis dans la section 3.1.9.

Nous ordonnons les états $|\Gamma_{k,l}\rangle$ dans l'ordre lexicographique : $|\Gamma_{1,1}\rangle = |\tilde{\Gamma}_1\rangle$, $|\Gamma_{2,1}\rangle = |\tilde{\Gamma}_2\rangle$, $|\Gamma_{2,2}\rangle = |\tilde{\Gamma}_3\rangle$, $|\Gamma_{3,1}\rangle = |\tilde{\Gamma}_4\rangle$, etc., i.e. nous introduisons un indice unique $L(k, l) = k(k - 1)/2 + l$. Les états $|\tilde{\Gamma}_L\rangle$, $L \in [1, N_C(N_C - 1)/2]$, peuvent être arrangés sous la forme d'un triangle (voir figure 3.19 pour une chaîne circulaire de $N_C = 5$ spins) dont les liens traduisent les états reliés les uns aux autres par la dynamique.

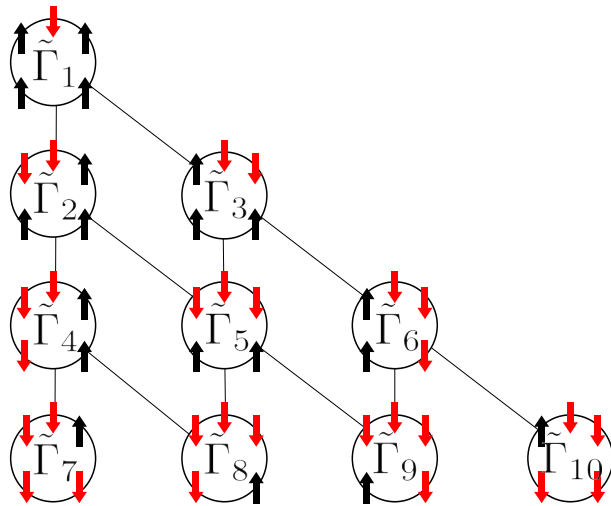


FIGURE 3.19 – Couplages des états $|\Gamma_{k,l}\rangle$ pour $N_C = 5$.

$\hat{H}_1^{(C)}$ couple un état $|\tilde{\Gamma}_L\rangle$ à au plus 4 voisins dans le triangle : celui au dessus, celui au dessus et à gauche, celui en dessous, celui en dessous et à droite. Selon la région du triangle, ces 4 états n'existent pas forcément. De façon générale nous obtenons pour une chaîne circulaire de N_C spins (et donc une base de $N_C(N_C - 1)/2$ états) les couplages suivants :

- l'état $|\tilde{\Gamma}_1\rangle$ situé en haut du triangle est couplé aux états $|\tilde{\Gamma}_2\rangle$ et $|\tilde{\Gamma}_3\rangle$
- l'état dans le coin en bas à gauche $|\tilde{\Gamma}_{(N_C-1)(N_C-2)/2+1}\rangle$ est couplé à l'état $|\tilde{\Gamma}_{(N_C-2)(N_C-3)/2+1}\rangle$
- l'état en bas à droite $|\tilde{\Gamma}_{N_C(N_C-1)/2}\rangle$ est couplé à l'état $|\tilde{\Gamma}_{(N_C-1)(N_C-2)/2}\rangle$
- les états $|\tilde{\Gamma}_L\rangle$ situés sur la frontière gauche, avec $L = k(k-1)/2 + 1$ et $k \in [2, N_C - 2]$, sont couplés aux états $|\tilde{\Gamma}_{L-k+1}\rangle$, $|\tilde{\Gamma}_{L+k}\rangle$, $|\tilde{\Gamma}_{L+k+1}\rangle$
- les états $|\tilde{\Gamma}_L\rangle$ situés sur la frontière droite, avec $L = k(k-1)/2 + k$ et $k \in [2, N_C - 2]$, sont couplés aux états $|\tilde{\Gamma}_{L-k}\rangle$, $|\tilde{\Gamma}_{L+k}\rangle$, $|\tilde{\Gamma}_{L+k+1}\rangle$
- les états $|\tilde{\Gamma}_L\rangle$ situés sur la base du triangle, avec $L = (N_C - 1)(N_C - 2)/2 + l$ et $l \in [2, N_C - 2]$, sont couplés aux états $|\tilde{\Gamma}_{L-N_C+1}\rangle$, $|\tilde{\Gamma}_{L-N_C+2}\rangle$
- les états $|\tilde{\Gamma}_L\rangle$ situés strictement à l'intérieur du triangle, avec $L = k(k-1)/2 + l$, $k \in [3, N_C - 2]$ et $1 < l < k$, sont couplés aux états $|\tilde{\Gamma}_{L-k}\rangle$, $|\tilde{\Gamma}_{L-k+1}\rangle$, $|\tilde{\Gamma}_{L+k}\rangle$, $|\tilde{\Gamma}_{L+k+1}\rangle$

Étude de la structure matricielle

$$\tilde{H}_1^{(C)} = J \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

FIGURE 3.20 – Représentation matricielle de $\hat{H}_1^{(C)}$ pour $N_C = 5$ et disposition des éléments non-nuls suivant des structures en escaliers.

Dans la base des $|\tilde{\Gamma}_L\rangle$ nous obtenons une représentation matricielle de $\hat{H}_1^{(C)}$ dont les termes non-nuls se disposent selon une structure en escaliers. Par exemple pour $N_C = 5$ (correspondant à 10 états de base), nous obtenons la représentation matricielle de la figure 3.20. La structure générale de la matrice d'un système de N_C spins peut être facilement dérivée. Tout d'abord la matrice est réelle et symétrique, et il est donc suffisant de décrire comment se construit la partie triangulaire supérieure $(\tilde{H}_1^{(C)})_{L,L'}$ avec $L' > L$. Pour remplir cette partie de la matrice nous devons savoir pour un état de la base, à quels états situés en dessous de lui dans le triangle des états il est connecté. Chacun des états (de la première ligne à l'avant-dernière ligne du triangle) n'est connecté qu'à deux états consécutifs situés en dessous de lui dans le triangle

(l'état directement en dessous et celui en dessous et à droite), et par conséquent chaque ligne du triangle supérieur droit de $\tilde{H}_1^{(C)}$ ne comporte que deux états consécutifs non nuls. Ensuite, chaque ligne k du triangle des états comporte k éléments, et pour deux états consécutifs $|\tilde{\Gamma}_L\rangle$ et $|\tilde{\Gamma}_{L+1}\rangle$, il existe un unique élément couplé à la fois aux deux états, ce qui explique que l'on observe des structures en escaliers à k marches. De plus, comme le triangle des états ne comporte que $N_C - 1$ lignes et que chaque ligne à l'exception de la dernière donne un escalier, il y a en tout $N_C - 2$ escaliers (à 1, 2, 3, ... marches). Enfin, d'une structure en escaliers à la suivante, il y a un décalage d'une ligne et d'une colonne, étant donné que le dernier élément d'une ligne n'est pas connecté au premier élément de la ligne suivante.

Une remarque est nécessaire concernant la structure globale de la distribution des éléments non-nuls de $\tilde{H}^{(L)}$. Considérons pour chaque structure en escaliers le premier élément, i.e. $(\tilde{H}_1^{(C)})_{1,2}$, $(\tilde{H}_1^{(C)})_{2,4}$, $(\tilde{H}_1^{(C)})_{4,7}$, etc. Les coordonnées matricielles (ligne, colonne) de ces éléments sont données par l'index L des éléments de la frontière gauche du triangle des états $X_k = \frac{k(k-1)}{2} + 1$ et des éléments situés en-dessous de ces derniers $Y_k = \frac{k(k+1)}{2} + 1$. Si nous traçons les points (X_k, Y_k) dans un plan, nous obtenons une droite dont la pente $\frac{Y_{k+1}-Y_k}{X_{k+1}-X_k} = 1 + \frac{1}{k}$ converge pour $k \rightarrow \infty$ vers 1. Cela signifie que pour $N_C \gg 1$, la représentation matricielle de $\tilde{H}_1^{(C)}$ est très proche d'une matrice comportant 4 diagonales d'éléments non nuls parallèles à la diagonale principale, même si une courbure demeure pour ces 4 diagonales pour tout k fini (dans la section suivante où nous étudions une autre façon de fermer la chaîne linéaire, nous observons pour la représentation matricielle de $\hat{H}_2^{(C)}$ dans la base de la dynamique des diagonales parfaitement droites et parallèles à la diagonale principale).

Expression des éléments matriciels du propagateur

Ne disposant pas d'une méthode analytique évidente permettant de diagonaliser $\hat{H}_1^{(C)}$, nous diagonalisons ce dernier par des méthodes numériques, et dérivons le propagateur en utilisant que ce dernier s'exprime par

$$U_{L,L_0}^{(C1)}(\tilde{t}) = \sum_{p=1}^{N_C(N_C-1)/2} e^{-i\tilde{t}\lambda_p^{(C1)}} \langle \tilde{\Gamma}_L | \psi_p^{(C1)} \rangle \langle \psi_p^{(C1)} | \tilde{\Gamma}_{L_0} \rangle, \quad (3.27)$$

avec $\lambda_m^{(C1)}$ et $|\psi_m^{(C1)}\rangle$ les valeurs propres et vecteurs propres de $\hat{H}_1^{(C)}/2J$ trouvés numériquement (en posant toujours $\tilde{t} = 2Jt/\hbar$).

3.3.2 $\hat{H}_2^{(C)}$: Chaîne circulaire complètement périodique

Une autre façon de fermer le système est d'imposer des conditions aux frontières périodiques $S_{N_C+k} = S_k$, $k \in [1, N_C]$. Cela nécessite entre autres que S_1 puisse flipper comme tous les autres spins, et que soit donc ajouté un terme de flip supplémentaire \hat{X}_1 contrôlé par S_{N_C} et S_2 . L'hamiltonien de ce système devient alors

$$\hat{H}_2^{(C)} = \frac{J}{2} \sum_{k=1}^{N_C} \hat{X}_k \left(\hat{1}_{k-1} \hat{1}_{k+1} - \hat{Z}_{k-1} \hat{Z}_{k+1} \right). \quad (3.28)$$

En autorisant S_1 à flipper la dynamique accède à toute une base d'états supplémentaires (par rapport à ceux caractérisant la dynamique de $\hat{H}_1^{(C)}$). Plus exactement, la nouvelle dynamique visite l'ensemble des états comportant k spins down consécutifs ($k \in [1, N_C - 1]$), où pour chaque k nous avons la liberté de choisir le point de départ de la séquence des spins down parmi les N_C spins, ce qui a pour conséquence de porter la dimension de la partie accessible de l'espace de Hilbert à $N_C(N_C - 1)$ états, c'est à dire à la base complète des états $|\Gamma_{k,l}\rangle$ de la section 3.1.9.

Couplages entre les états de la dynamique

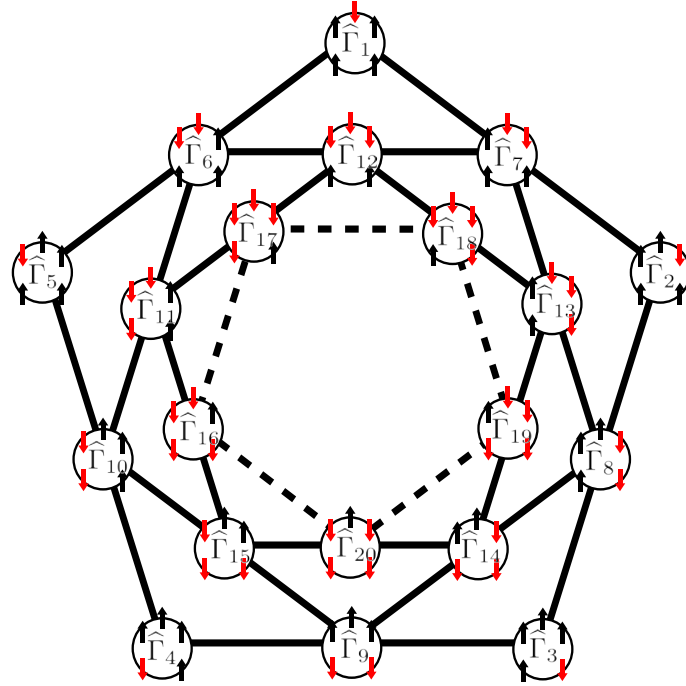


FIGURE 3.21 – Couplages entre les états $|\hat{\Gamma}_L\rangle$, $L \in [1, N_C(N_C - 1)]$ pour $N_C = 5$.

Il est intéressant de noter que les couplages entre les états de base peuvent être obtenus en arrangeant les états sur les sommets de $(N_C - 1)$ polygones à N_C côtés imbriqués comme l'on peut l'observer sur la figure 3.21 pour $N_C = 5$. Sur cette figure une ligne pleine représente le couplage entre deux états. Nous numérotions les états selon l'ordre lexicographique, i.e. $|\Gamma_{1,1}\rangle = |\hat{\Gamma}_1\rangle$, $|\Gamma_{1,2}\rangle = |\hat{\Gamma}_2\rangle, \dots, |\Gamma_{1,5}\rangle = |\hat{\Gamma}_5\rangle$, $|\Gamma_{2,1}\rangle = |\hat{\Gamma}_6\rangle$, etc. Les états sont disposés sur les polygones de la façon suivante : en partant de l'état situé sur le sommet supérieur du polygone le plus extérieur, on parcourt chaque sommet du polygone. Puis l'on se déplace sur le polygone suivant, situé plus à l'intérieur, en se déplaçant sur son premier sommet situé au centre du dernier lien parcouru sur le précédent polygone, et ainsi de suite.

Étude de la structure matricielle

En utilisant la numérotation lexicographique précédente, nous obtenons une représentation matricielle de $\hat{H}_2^{(C)}$ dans la base des $|\hat{\Gamma}_L\rangle$, $L \in [1, N_C(N_C - 1)]$ qui dévoile une structure très

de $\hat{H}_1^{(C)}$ (par exemple $|\tilde{\Gamma}_1\rangle = |\hat{\Gamma}_1\rangle$, $|\tilde{\Gamma}_2\rangle = |\hat{\Gamma}_6\rangle$, $|\tilde{\Gamma}_3\rangle = |\hat{\Gamma}_7\rangle$, etc.), et ceux encadrés en bleu, aux états symétriques de ces derniers.

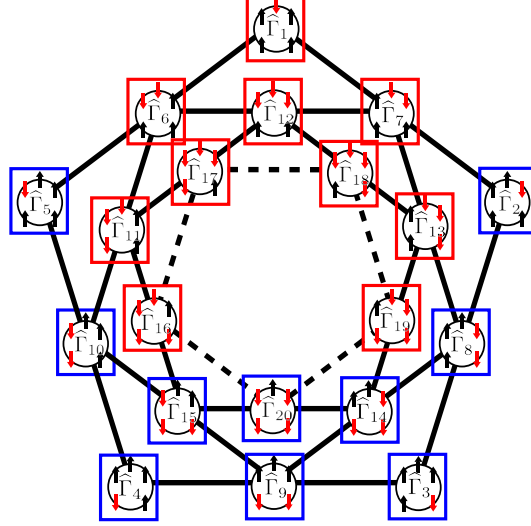


FIGURE 3.23 – Couplages entre les états $|\hat{\Gamma}_L\rangle$, $L \in [1, N_C(N_C - 1)]$, pour $N_C = 5$. Les états entourés en rouge sont les symétriques des états entourés en bleu.

Expression des éléments matriciels du propagateur

De façon identique à $\hat{H}_1^{(C)}$, ne disposant toujours pas d'une méthode analytique évidente permettant de diagonaliser $\hat{H}_2^{(C)}$, nous diagonalisons ce dernier par des méthodes numériques et dérivons les éléments matriciels du propagateur $\hat{U}^{(C2)}(\tilde{t})$ en utilisant que

$$U_{L,L_0}^{(C2)}(\tilde{t}) = \sum_{p=1}^{N_C(N_C-1)} e^{-i\tilde{t}\lambda_p^{(C2)}} \langle \hat{\Gamma}_L | \psi_p^{(C2)} \rangle \langle \psi_p^{(C2)} | \hat{\Gamma}_{L_0} \rangle, \quad (3.29)$$

avec $\lambda_m^{(C2)}$ et $|\psi_m^{(C2)}\rangle$ les valeurs propres et vecteurs propres de $\hat{H}_2^{(C)}/2J$ trouvés numériquement.

Motivation de l'étude de $\hat{H}_3^{(C)}$

Le fait que les deux façons les plus intuitives de fermer une chaîne linéaire en une chaîne circulaire conduisent à des sous-espaces effectifs de l'espace de Hilbert de dimension $\mathcal{O}(N_C^2)$ au lieu de $\mathcal{O}(N_L)$ est particulièrement intéressant et sera exploré plus en détail dans les sections suivantes. Dans le même temps, on se demande naturellement s'il n'existe pas des façons de fermer la chaîne linéaire qui conduisent à une dynamique possédant une base effective d'états propres de dimension $\mathcal{O}(N_C)$. Dans les sections 3.3.3 et 3.3.4, nous étudions deux tels systèmes.

3.3.3 $\hat{H}_3^{(C)}$: Fermeture par un couplage particulier entre S_{N_C-1} , S_{N_C} , S_1 , S_2

Dans cette section nous montrons qu'il existe une façon de fermer la chaîne linéaire pour laquelle le système évolue dans un sous-espace de Hilbert dont la dimension croît linéairement avec la taille du système. Nous considérons un système avec les mêmes interactions entre plus proches voisins que $\hat{H}_2^{(C)}$ pour les spins S_2 à S_{N_C-1} , et possédant un couplage additionnel entre les spins S_{N_C-1} , S_{N_C} , S_1 et S_2 qui induit l'action suivante : si les spins S_{N_C-1} et S_2 sont identiques, alors les spins S_{N_C} et S_1 sont flippés, sinon rien ne se passe. L'hamiltonien d'un tel système s'écrit

$$\begin{aligned} \hat{H}_3^{(C)} = & \frac{J}{2} \sum_{k=2}^{N_C-1} \hat{X}_k \left(\hat{1}_{k-1} \hat{1}_{k+1} - \hat{Z}_{k-1} \hat{Z}_{k+1} \right) \\ & + \frac{J}{2} \hat{X}_{N_C} \hat{X}_1 \left(\hat{1}_{N_C-1} \hat{1}_2 + \hat{Z}_{N_C-1} \hat{Z}_2 \right). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Étude de la dynamique

Notons $|\overline{\Lambda}_k\rangle = |\uparrow_1 \dots \uparrow_k \downarrow_{k+1} \dots \downarrow_{N_C}\rangle$ avec $k \in [1, N_C - 1]$ les états miroirs des états $|\Lambda_k\rangle$ (dans le sens où tous les spins sont inversés). Si nous supposons à nouveau notre système initialisé dans l'état $|\Lambda_1\rangle = |\downarrow_1 \uparrow_2 \dots \uparrow_{N_C}\rangle$, ce dernier évolue vers les états $|\Lambda_2\rangle = |\downarrow_1 \downarrow_2 \uparrow_3 \dots \uparrow_{N_C}\rangle$ et $|\overline{\Lambda}_{N_C-1}\rangle = |\uparrow_1 \uparrow_2 \dots \uparrow_{N_C-1} \downarrow_{N_C}\rangle$. Ensuite, de façon générale, pour $k \in [2, N_C - 2]$, $|\Lambda_k\rangle$ est couplé à $|\Lambda_{k-1}\rangle$ et $|\Lambda_{k+1}\rangle$, et $|\overline{\Lambda}_k\rangle$ est couplé à $|\overline{\Lambda}_{k-1}\rangle$ et $|\overline{\Lambda}_{k+1}\rangle$. Enfin l'état $|\Lambda_{N_C-1}\rangle$ est couplé à l'état $|\Lambda_{N_C-2}\rangle$ et à l'état $|\overline{\Lambda}_1\rangle$. La dynamique se déroule donc dans la base fermée des $2(N_C - 1)$ états $|\Lambda_k\rangle$ et $|\overline{\Lambda}_k\rangle$. Afin de mieux appréhender la dynamique de ce système, nous observons cette dernière dans la figure 3.24 pour une chaîne de $N_C = 5$ spins.

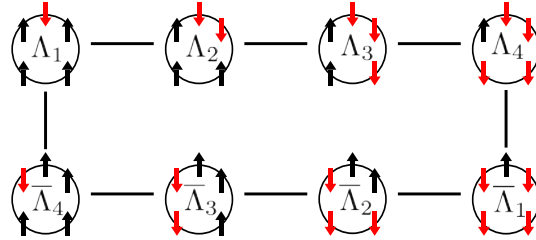


FIGURE 3.24 – Couplages entre les états $|\Lambda_k\rangle$ et $|\overline{\Lambda}_k\rangle$ pour $N_C = 5$.

Il est important de remarquer une différence fondamentale avec la dynamique des systèmes précédemment étudiés ($\hat{H}_1^{(C)}$ et $\hat{H}_2^{(C)}$), à savoir que cette fois-ci l'état avec tous les spins up et l'état avec tous les spins down ne sont pas des états propres de $\hat{H}_3^{(C)}$, ce qui a une conséquence sur l'amplification de spin qui sera discutée dans la section 3.4. Si nous numérotions à présent les états dans l'ordre lexicographique (en ordonnant les $|\overline{\Lambda}_k\rangle$ après les $|\Lambda_k\rangle$, i.e. $|\Lambda_1\rangle = |\tilde{\Lambda}_1\rangle, \dots, |\Lambda_{N_C-1}\rangle = |\tilde{\Lambda}_{N_C-1}\rangle, \dots, |\overline{\Lambda}_1\rangle = |\tilde{\Lambda}_{N_C}\rangle, \dots, |\overline{\Lambda}_{N_C-1}\rangle = |\tilde{\Lambda}_{2(N_C-1)}\rangle$), la représentation matricielle de $\hat{H}_3^{(C)}$ dans la base des $|\tilde{\Lambda}_k\rangle$ présente une forme très similaire à celle de $\hat{H}^{(L)}$ dans la base des $|\Lambda_k\rangle$ (si l'on s'arrange pour que les bases soient de même taille, i.e.

$N_L - 1 = 2(N_C - 1)$). Nous en donnons un exemple dans la figure 3.25 pour $N_C = 5$ (à comparer avec la représentation matricielle de $\hat{H}^{(L)}$ de la figure 3.12 pour $N_L = 9$).

$$\tilde{H}_3^{(C)} = J \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1} & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & \mathbf{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} \end{pmatrix}$$

FIGURE 3.25 – Représentation matricielle de $\hat{H}_3^{(C)}$ dans la base des $|\tilde{\Lambda}_k\rangle$, $k \in [1, 2(N_C - 1)]$, pour $N_C = 5$.

Vecteurs propres et valeurs propres de $\hat{H}_3^{(C)}$

De façon générale pour une chaîne de N_C spins, les valeurs propres et vecteurs propres de $\hat{H}_3^{(C)}$ sont donnés pour $p \in [1, 2(N_C - 1)]$ par

$$\begin{aligned} \lambda_p^{(C3)} &= 2J \cos\left(\frac{p\pi}{N_C - 1}\right) \\ |\psi_p^{(C3)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2(N_C - 1)}} \sum_{k=1}^{2(N_C - 1)} e^{i\frac{pk}{N_C - 1}} |\tilde{\Lambda}_k\rangle. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Finalement nous obtenons l'expression des éléments matriciels du propagateur quantique dans la base des $|\tilde{\Lambda}_k\rangle$

$$\begin{aligned} U_{k,k_0}^{(C3)}(t) &= \langle \tilde{\Lambda}_k | e^{-i\hat{H}_3^{(C)}t/\hbar} | \tilde{\Lambda}_{k_0} \rangle \\ &= \sum_{p=1}^{2(N_C - 1)} \langle \tilde{\Lambda}_k | \psi_p^{(C3)} \rangle e^{-it\lambda_p^{(C3)}/\hbar} \langle \psi_p^{(C3)} | \tilde{\Lambda}_{k_0} \rangle \\ &= \sum_{p=1}^{2(N_C - 1)} F_{k,k_0}^{(C3)}(p, \tilde{t}), \end{aligned}$$

avec $F_{k,k_0}^{(C3)}(p, \tilde{t}) \equiv \frac{1}{2(N_C - 1)} e^{i\frac{p\pi(k-k_0)}{N_C - 1}} e^{-i\tilde{t} \cos \frac{p\pi}{N_C - 1}}$ et toujours $\tilde{t} = 2Jt/\hbar$.

Représentation de $\hat{U}_3^{(C)}(\tilde{t})$ en terme de fonctions de Bessel

En utilisant que $F_{k,k_0}^{(C3)}(p + 2(N_C - 1), \tilde{t}) = F_{k,k_0}^{(C3)}(p, \tilde{t})$, nous pouvons utiliser à nouveau la formule de sommation de Poisson

$$U_{k,k_0}^{(C3)}(\tilde{t}) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{2(N_C - 1)} e^{2i\pi mp} F_{k,k_0}^{(C3)}(p, \tilde{t}) dp$$

$$= \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^{k-k_0+2m(N_C-1)} J_{k-k_0+2m(N_C-1)}(\tilde{t}), \quad (3.32)$$

et dans le cas particulier où le système commence dans l'état $|\tilde{\Lambda}_1\rangle$ nous obtenons

$$U_{k,1}^{(C3)}(\tilde{t}) = (-i)^{k-1} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^{m(N_C-1)} J_{k-1+2m(N_C-1)}(\tilde{t}). \quad (3.33)$$

Approximation semi-classique du propagateur : l'approximation WKB

La fonction de Bessel s'évanouissant exponentiellement rapidement lorsque son index est grand devant son argument, si nous décidons d'étudier la dynamique sur une fenêtre temporelle donnée, la somme infinie (3.33) se réduit dès lors aux seuls termes qui demeurent non négligeables. En particulier, si $\tilde{t} < N_C - 1$, seul le terme $m = 0$ survit pour $k \in [1, N_C - 1]$ (propagation d'un front de spins vers la droite couplant les états $|\Lambda_k\rangle$), et seul le terme $m = -1$ survit pour $k \in [N_C, 2(N_C - 1)]$ (propagation d'un front de spins vers la gauche couplant les états $|\overline{\Lambda}_k\rangle$). Nous obtenons dès lors les simplifications suivantes

$$\begin{aligned} U_{k,1}^{(C3)}(\tilde{t}) &\approx (-i)^{k-1} J_{k-1}(\tilde{t}), \quad k \in [1, N_C - 1] \\ U_{k,1}^{(C3)}(\tilde{t}) &\approx (-1)^{N_C-1} (i)^{k-1} J_{2N_C-k-1}(\tilde{t}), \quad k \in [N_C, 2(N_C - 1)]. \end{aligned}$$

Si $k \gg 1$ (respectivement $2N_C - k - 1 \gg 1$) ces fonctions de Bessel peuvent être alors remplacées par leurs approximations WKB (cf. équation (3.18)), de façon équivalente à ce qui a été fait dans le cas de la chaîne linéaire.

Approche alternative : propagateur de Van Vleck

Avant de s'intéresser au phénomène d'amplification de spin (au travers de l'étude de la polarisation totale moyenne) nous présentons une approche différente et davantage physique, qui permet de dériver la même approximation semi-classique du propagateur quantique pour $k \in [1, N_C - 1]$ et $k-1 < \tilde{t}$. Dans cette approche nous cherchons à dériver l'hamiltonien classique associé à $\hat{H}_3^{(C)}$. L'action de $\hat{H}_3^{(C)}$ sur un état de base, donné par $\hat{H}_3^{(C)}|\tilde{\Lambda}_k\rangle = J(|\tilde{\Lambda}_{k-1}\rangle + |\tilde{\Lambda}_{k+1}\rangle)$, peut être réécrite en terme d'opérateurs de décalage en faisant passer la variable d'index k d'une variable discrète à une variable continue, i.e.

$$\begin{aligned} \hat{H}_3^{(C)}|\tilde{\Lambda}(k)\rangle &= J(|\tilde{\Lambda}(k-1)\rangle + |\tilde{\Lambda}(k+1)\rangle) \\ &= J(e^{-\partial/\partial k}|\tilde{\Lambda}(k)\rangle + e^{\partial/\partial k}|\tilde{\Lambda}(k)\rangle). \end{aligned}$$

Le fait de passer à une variable continue est raisonnable dans la limite des chaînes très longues qui peuvent être considérées comme la limite classique. Si nous notons $\phi = -i\hbar \partial/\partial k$ le moment canoniquement conjugué à la coordonnée k , nous pouvons écrire $H_3^{Cl}|\tilde{\Lambda}(k)\rangle = J(e^{-i\phi/\hbar} + e^{i\phi/\hbar})|\tilde{\Lambda}(k)\rangle = 2J \cos(\phi)|\tilde{\Lambda}(k)\rangle$, où nous avons défini $\tilde{\phi} \equiv \phi/\hbar$. Dans la limite classique nous obtenons donc l'hamiltonien classique correspondant $H_3^{Cl} = 2J \cos(\tilde{\phi})$. H_3^{Cl} ne dépendant pas de k , le moment est une intégrale du mouvement reliée à l'énergie classique du

système par $E = cte = 2J \cos(\tilde{\phi})$. La trajectoire du mouvement suit alors l'équation canonique $\dot{k}(t) = \frac{\partial H_3^{C1}}{\partial \tilde{\phi}} = -\frac{2J}{\hbar} \sin(\tilde{\phi})$, et nous obtenons finalement que $k(\tilde{t}) = k_0 - \tilde{t} \sin(\tilde{\phi})$ avec $\tilde{t} = 2Jt/\hbar$. Nous trouvons dès lors deux chemins classiques

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}_1(k, k_0, \tilde{t}) &= -\arcsin\left(\frac{k - k_0}{\tilde{t}}\right) \\ \tilde{\phi}_2(k, k_0, \tilde{t}) &= \pi + \arcsin\left(\frac{k - k_0}{\tilde{t}}\right),\end{aligned}$$

dont les énergies classiques associées, en définissant $\tilde{E}(k, k_0, \tilde{t}) \equiv E(k, k_0, \tilde{t})/2J$, sont

$$\begin{aligned}\tilde{E}_1(k, k_0, \tilde{t}) &= \cos(\tilde{\phi}_1(k, k_0, \tilde{t})) = \sqrt{1 - \left(\frac{k - k_0}{\tilde{t}}\right)^2} \\ \tilde{E}_2(k, k_0, \tilde{t}) &= \cos(\tilde{\phi}_2(k, k_0, \tilde{t})) = -\sqrt{1 - \left(\frac{k - k_0}{\tilde{t}}\right)^2}.\end{aligned}$$

L'action classique étant définie par $S(k, k_0, t) = \int_{k_0}^k \phi(\tilde{k}, k_0, t) d\tilde{k} - E(k, k_0, t)t$, si nous définissons $\tilde{S}(k, k_0, \tilde{t}) \equiv S(k, k_0, \tilde{t})/\hbar$, nous obtenons les actions classiques associées aux deux chemins classiques $\tilde{\phi}_1$ et $\tilde{\phi}_2$, à savoir

$$\begin{aligned}\tilde{S}_1(k, k_0, \tilde{t}) &= -(k - k_0) \arcsin\left(\frac{k - k_0}{\tilde{t}}\right) - \sqrt{\tilde{t}^2 - (k - k_0)^2} \\ \tilde{S}_2(k, k_0, \tilde{t}) &= (k - k_0)(\pi + \arcsin\left(\frac{k - k_0}{\tilde{t}}\right)) + \sqrt{\tilde{t}^2 - (k - k_0)^2}.\end{aligned}$$

Le propagateur semi-classique de Van Vleck est obtenu en sommant sur tous les chemins classiques, i.e.

$$U_{k, k_0}^{VV}(\tilde{t}) = \sum_{\alpha} \sqrt{\frac{1}{2i\pi} \left| \frac{\partial^2 \tilde{S}_{\alpha}(k, k_0, \tilde{t})}{\partial k \partial k_0} \right|} \exp\left(i \left(\tilde{S}_{\alpha}(k, k_0, \tilde{t}) - \nu_{\alpha} \frac{\pi}{2} \right)\right), \quad (3.34)$$

où ν_{α} est l'index de Morse pour le chemin classique α . Pour le cas des temps faibles que l'on considère, nous avons seulement deux chemins classiques avec $\nu_1 = -1$ et $\nu_2 = 0$ et nous obtenons alors

$$\begin{aligned}U_{k, k_0}^{VV}(\tilde{t}) &= U_{k, k_0}^{VV, (1)}(\tilde{t}) + U_{k, k_0}^{VV, (2)}(\tilde{t}) \\ U_{k, k_0}^{VV, (1)}(\tilde{t}) &= \sqrt{\frac{i}{2\pi \sqrt{\tilde{t}^2 - (k - k_0)^2}}} \exp(-iX) \\ U_{k, k_0}^{VV, (2)}(\tilde{t}) &= \sqrt{\frac{1}{2i\pi \sqrt{\tilde{t}^2 - (k - k_0)^2}}} (-1)^{k - k_0} \exp(iX)\end{aligned} \quad (3.35)$$

où $X = (k - k_0) \arcsin\left(\frac{k - k_0}{\tilde{t}}\right) + \sqrt{\tilde{t}^2 - (k - k_0)^2}$. On peut facilement vérifier que l'expression (3.35) avec $k_0 = 1$ est parfaitement identique à l'approximation WKB de $U_{k, 1}^{(C3)}(\tilde{t}) = (-i)^{k-1} J_{k-1}(\tilde{t})$ avec $J_{k-1}^{WKB}(\tilde{t})$ donné par l'équation (3.18).

Comportement linéaire de la polarisation totale moyenne

L'opérateur de polarisation totale gardant la même expression que dans le cas de la chaîne linéaire, i.e. $\hat{P}^{(C)} = \sum_{k=1}^{N_C} \hat{Z}_k$, et utilisant que $\langle \tilde{\Lambda}_k | \hat{P}^{(C)} | \tilde{\Lambda}_k \rangle = (N_C - 2k)$ pour $k \in [1, N_C - 1]$ et $\langle \tilde{\Lambda}_k | \hat{P}^{(C)} | \tilde{\Lambda}_k \rangle = -(3N_C - 2k - 2)$ pour $k \in [N_C, 2(N_C - 1)]$, si nous plaçons le système initialement dans l'état $|\tilde{\Lambda}_1\rangle$ nous obtenons l'expression de la polarisation totale moyenne en fonction du temps donnée par

$$\begin{aligned} \langle P^{(C3)}(\tilde{t}) \rangle &= \sum_{k=1}^{N_C-1} (N_C - 2k) \left| U_{k,1}^{(C3)}(\tilde{t}) \right|^2 \\ &\quad - \sum_{k=N_C}^{2(N_C-1)} (3N_C - 2k - 2) \left| U_{k,1}^{(C3)}(\tilde{t}) \right|^2. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Comme précédemment, l'approximation WKB de la polarisation totale moyenne est obtenue en remplaçant le propagateur exact dans l'équation (3.36) par son approximation WKB $U_{k,1}^{WKB}(\tilde{t})^{(C3)}$, i.e.

$$\begin{aligned} \langle P_{WKB}^{(C3)}(\tilde{t}) \rangle &= \sum_{k < \tilde{t}+1} (N_C - 2k) \left| U_{k,1}^{WKB}(\tilde{t})^{(C3)} \right|^2 \\ &\quad - \sum_{k > 2(N_C-1)-\tilde{t}+1} (3N_C - 2k - 2) \left| U_{k,1}^{WKB}(\tilde{t})^{(C3)} \right|^2 \\ &= \sum_{k < \tilde{t}+1} (N_C - 2k) \left| J_{k-1}^{WKB}(\tilde{t}) \right|^2 \\ &\quad - \sum_{k > 2(N_C-1)-\tilde{t}+1} (3N_C - 2k - 2) \left| J_{2(N_C-1)-k+1}^{WKB}(\tilde{t}) \right|^2 \\ &= \sum_{k < \tilde{t}+1} (N_C - 2k) \frac{2 \cos^2(\phi(k+1, \tilde{t}))}{\pi \sqrt{\tilde{t}^2 - (k-1)^2}} \\ &\quad - \sum_{k > 2(N_C-1)-\tilde{t}+1} (3N_C - 2k - 2) \frac{2 \cos^2(\phi(2(N_C-1) - k + 1, \tilde{t}))}{\pi \sqrt{\tilde{t}^2 - (2(N_C-1) - k + 1)^2}}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

En négligeant dans la limite $N_C \gg 1$ les termes qui peuvent l'être au voisinage du point tournant (cf. la discussion sur l'estimation des termes négligés dans l'expression de la polarisation totale moyenne dans le cas de la chaîne linéaire de la section 3.2.6), nous obtenons que le terme dominant est égal à

$$(N_C - 1) - \frac{4}{\pi} \int_0^{\tilde{t}} \frac{m}{\sqrt{\tilde{t}^2 - m^2}} = (N_C - 1) - \frac{4}{\pi} \tilde{t}$$

et finalement nous parvenons à l'approximation

$$\left\langle P_{WKB}^{(C3)}(\tilde{t}) \right\rangle \simeq (N_C - 1) - \frac{4}{\pi} \tilde{t}. \quad (3.38)$$

Rappelons que dans le cas de $\langle P^{(L)}(\tilde{t}) \rangle$, le terme dominant était

$$N_L - \frac{4}{\pi \tilde{t}^2} \int_0^{\tilde{t}} \frac{2m^3}{\sqrt{\tilde{t}^2 - m^2}} = N_L - \frac{16}{3\pi} \tilde{t}.$$

De l'équation (3.38) nous déduisons la vitesse de spin-flip $|v^{(C3)}| = \frac{4}{\pi} \approx 1.27$, laquelle est inférieure de 25% à celle obtenue dans le cas de la chaîne linéaire $|v^{(L)}| = \frac{16}{3\pi} \approx 1.7$. Un simple couplage différent en fin de chaîne peut donc modifier de façon importante et macroscopique la dynamique de la chaîne toute entière, même dans la limite de chaînes arbitrairement longues. Dans la section 3.4 nous examinons les différences entre les dynamiques de $\hat{H}^{(L)}$, $\hat{H}_1^{(C)}$, $\hat{H}_2^{(C)}$ et $\hat{H}_3^{(C)}$, et en recherchons l'origine physique. Cependant, avant de réaliser cette étude, nous présentons un dernier modèle de chaîne circulaire qui a la particularité d'autoriser une dynamique identique à celle de la chaîne linéaire malgré les différences de topologie qui existent entre les deux systèmes.

3.3.4 $\hat{H}_4^{(C)}$: Existence d'une chaîne circulaire dynamiquement équivalente à une chaîne linéaire

Considérons la situation où les spins S_2 à S_{N_C-2} sont couplés avec les mêmes interactions entre plus proches voisins que $\hat{H}^{(L)}$, mais où l'on a le couplage suivant entre les spins S_{N_C-2} , S_{N_C-1} , S_{N_C} et S_1 : si les spins S_{N_C-2} et S_1 sont identiques et différents de S_{N_C} , alors le spin S_{N_C-1} est flippé, sinon, rien ne se passe. L'hamiltonien d'un tel système est donné par

$$\begin{aligned} \hat{H}_4^{(C)} &= \frac{J}{2} \sum_{k=2}^{N_C-2} \hat{X}_k \left(\hat{1}_{k-1} \hat{1}_{k+1} - \hat{Z}_{k-1} \hat{Z}_{k+1} \right) \\ &+ \frac{J}{4} \hat{X}_{N_C-1} \left(\hat{1}_{N_C-2} \hat{1}_1 + \hat{Z}_{N_C-2} \hat{Z}_1 \right) \left(\hat{1}_{N_C} \hat{1}_1 - \hat{Z}_{N_C} \hat{Z}_1 \right). \end{aligned} \quad (3.39)$$

Nous pouvons vérifier que dans l'espace de Hilbert total engendré par les $2^{N_C} = 2^{N_L}$ vecteurs de la base computationnelle les représentations matricielles de $\hat{H}^{(L)}$ et $\hat{H}_4^{(C)}$ diffèrent (cf. figure 3.26). Néanmoins, si l'on démarre dans l'état $|\Lambda_1\rangle$, les parties de l'espace de Hilbert visitées par les deux dynamiques sont identiques. Nous nous retrouvons donc dans la situation intéressante où la différence de topologie entre les deux chaînes ne se manifeste que dans un sous-espace de l'espace de Hilbert total, tandis que dans le sous-espace qui est pertinent en ce qui concerne l'amplification de spin, les représentations matricielles de $\hat{H}^{(L)}$ et de $\hat{H}_4^{(C)}$ dans la base des états visités sont identiques.

$$F_{\uparrow}^{(X)}(\tilde{t}) = \frac{N_X}{2} + \frac{1}{2} \langle \Lambda_{\uparrow}(\tilde{t}) | P^{(X)}(\tilde{t}) | \Lambda_{\uparrow}(\tilde{t}) \rangle . \quad (3.42)$$

$F_{\downarrow,k}^{(X)}(\tilde{t})$ et $F_{\uparrow,k}^{(X)}(\tilde{t})$ ($F_{\downarrow}^{(X)}(\tilde{t})$ et $F_{\uparrow}^{(X)}(\tilde{t})$) peuvent être considérées respectivement comme les fidélités individuelles (les fidélités globales) avec lesquelles l'information initialement portée par le spin S_1 (selon que ce dernier est dans l'état down ou dans l'état up) se retrouve transcrite sur le spin S_k (sur l'ensemble de la chaîne). Il s'agit là d'une généralisation de la fidélité considérée usuellement dans les problèmes de transfert de spin où l'on calcule la fidélité de l'état du spin en bout de chaîne respectivement à l'état du spin initial [22]. Il est à noter que le comportement des différents systèmes relativement à cette mesure est inégal. En effet, si $\hat{H}^{(L)}$, $\hat{H}_1^{(C)}$, et $\hat{H}_2^{(C)}$ conservent l'état de base $|\Lambda_{\uparrow}\rangle$, ce n'est pas le cas de $\hat{H}_3^{(C)}$. Ceci implique en particulier que dans le cas de $\hat{H}^{(L)}$, $\hat{H}_1^{(C)}$, et $\hat{H}_2^{(C)}$, nous obtenons une relation directe entre fidélités totales de polarisation et polarisations totales moyennes $\langle P^{(X)}(\tilde{t}) \rangle = \langle \Lambda_{\downarrow}(\tilde{t}) | \hat{P}^{(X)} | \Lambda_{\downarrow}(\tilde{t}) \rangle$ donnée par $F^{(X)}(\tilde{t}) = \frac{3N_X}{2} - \frac{1}{2} \langle P^{(X)}(\tilde{t}) \rangle$ (où nous avons utilisé que $\langle \Lambda_{\uparrow}(\tilde{t}) | \hat{P}^{(X)} | \Lambda_{\uparrow}(\tilde{t}) \rangle = N_X$, $X \in \{L, C1, C2\}$), alors que dans le cas de $\hat{H}_3^{(C)}$ nous ne pouvons obtenir une valeur simple du terme $\langle \Lambda_{\uparrow}(\tilde{t}) | \hat{P}^{(X)} | \Lambda_{\uparrow}(\tilde{t}) \rangle$ que nous sommes obligés de conserver en l'état. Notons que les fidélités totales de polarisation ont comme valeurs initiales $N_L + 1$ ($N_C + 1$) et sont bornées par $2N_L$ ($2N_C$) pour des chaînes linéaires (circulaires).

3.4.2 Étude comparative des différents systèmes

Fidélités totales de polarisation - Polarisations totales moyennes

Dans un premier temps, nous nous intéressons à des chaînes de faible taille ($N_L = N_C = 8$). Ce choix est justifié car il nous permet de comparer simultanément le comportement des $F^{(X)}(\tilde{t})$ à celui des $\langle \Delta P^{(X)}(\tilde{t}) \rangle = \langle P^{(X)}(\tilde{t}) \rangle - \langle P^{(X)}(0) \rangle$ pour les 4 systèmes étudiés $\hat{H}^{(L)}$, $\hat{H}_1^{(C)}$, $\hat{H}_2^{(C)}$ et $\hat{H}_3^{(C)}$. En effet, étant donné que $|\Lambda_{\uparrow}\rangle$ n'est pas un état stationnaire pour $\hat{H}_3^{(C)}$, la fidélité $F_{\uparrow}^{(C3)}(\tilde{t})$ correspondante n'est plus constante, et malheureusement la base d'états que génère la dynamique en partant de cet état est du même ordre de grandeur que la base computationnelle elle-même. Plus précisément, des simulations numériques (effectuées dans la base computationnelle, ce qui réduit drastiquement la taille des chaînes que l'on est susceptible d'étudier), montrent (au moins jusqu'à $N_C = 9$) que la dynamique de $\hat{H}_3^{(C)}$ évolue dans un espace de taille $2(N_C - 1)$ (comme attendu) si l'on choisit comme état initial l'état $|\Lambda_{\downarrow}\rangle$, et dans un espace de dimension 2^{N_C-2} si l'on choisit comme état initial l'état $|\Lambda_{\uparrow}\rangle$ (cf. figure 3.27),

Dans les figures 3.28 et 3.29 nous observons pour une telle taille de chaînes l'évolution temporelle respectivement des fidélités totales de polarisation et celle des changements de polarisations totales moyennes relativement à leurs valeurs initiales (considérant comme état de départ l'état $|\Lambda_{\downarrow}\rangle$). Pour les systèmes $\hat{H}^{(L)}$, $\hat{H}_1^{(C)}$ et $\hat{H}_2^{(C)}$, nous constatons que les fidélités de polarisation se comportent bien suivant l'équation $F^{(X)}(\tilde{t}) = \frac{3N_X}{2} - \frac{1}{2} \langle P^{(X)}(\tilde{t}) \rangle = N_X + 1 - \frac{1}{2} \langle \Delta P^{(X)}(\tilde{t}) \rangle$. Par contre, nous constatons que la fidélité $F^{(C3)}(\tilde{t})$ se détériore immédiatement, ce qui se comprend facilement puisque $|\Lambda_{\uparrow}\rangle$ n'est plus un état stationnaire. Si nous attendions un temps suffisamment long, $F^{(C3)}(\tilde{t})$ pourrait toujours devenir important pour certaines valeurs particulières de \tilde{t} . Par exemple, pour $N_C = 8$ nous obtenons $F^{(C3)}(290) \approx 13.09$, ce qui est proche de la valeur maximale possible de 16 pour cette chaîne. Cependant, les comparaisons des fidélités se doivent

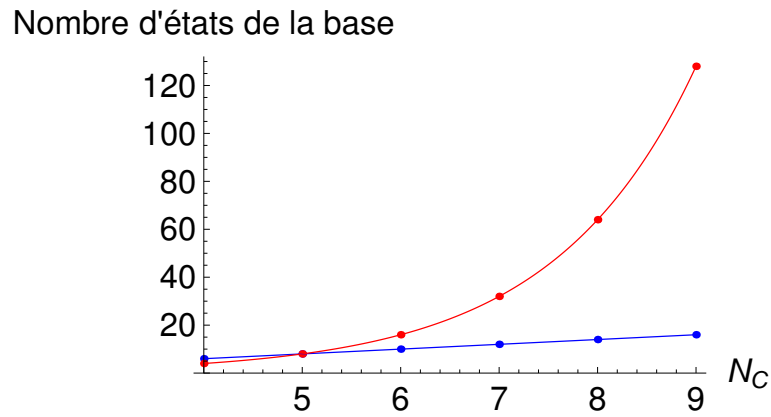


FIGURE 3.27 – Nombre d'états de base pour $\hat{H}_3^{(C)}$, en partant de l'état $|\Lambda_\downarrow\rangle$ (points bleus), comparé à une loi en $2(N_C - 1)$ (courbe bleue), ou de l'état $|\Lambda_\uparrow\rangle$ (points rouges), comparé à une loi en 2^{N_C-2} (courbe rouge), pour $N_C \in [4, 9]$.

d'être faites pour des fenêtres temporelles finies, étant donné que pour des temps suffisamment longs il est toujours possible de trouver une configuration de spin aussi proche que l'on souhaite d'une configuration donnée [22].

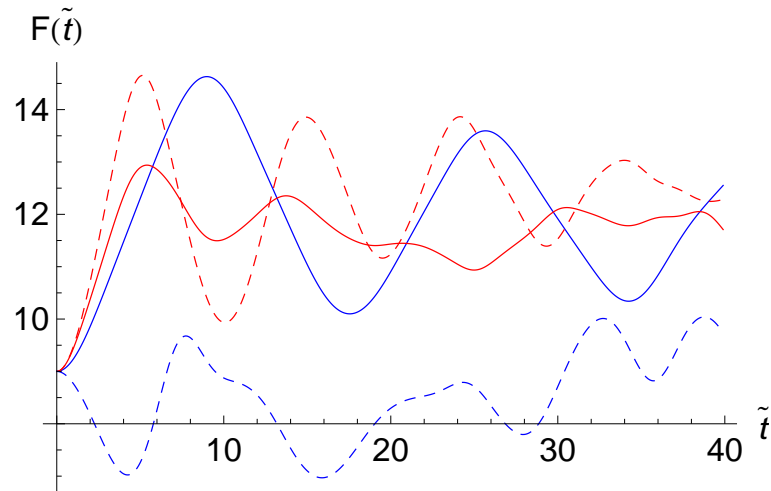


FIGURE 3.28 – Comparaison des fidélités totales de polarisation $F(\tilde{t})$ pour $\hat{H}^{(L)}$ (courbe bleue continue), $\hat{H}_3^{(C)}$ (courbe bleue pointillée), $\hat{H}_1^{(C)}$ (courbe rouge pointillée) et $\hat{H}_2^{(C)}$ (courbe rouge continue), pour $N_L = N_C = 8$.

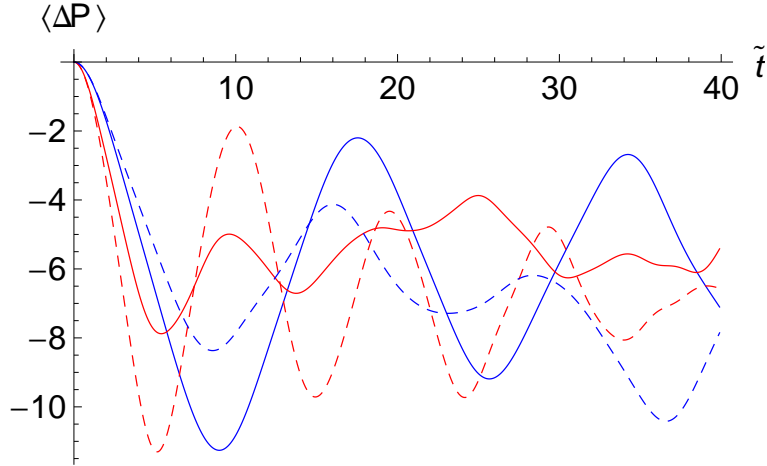


FIGURE 3.29 – Comparaison des changements de polarisations totales moyennes (relativement à leurs valeurs initiales) $\langle \Delta P(\tilde{t}) \rangle = \langle P(\tilde{t}) \rangle - \langle P(0) \rangle$ pour $\hat{H}^{(L)}$ (courbe bleue continue), $\hat{H}_3^{(C)}$ (courbe bleue pointillée), $\hat{H}_1^{(C)}$ (courbe rouge pointillée) et $\hat{H}_2^{(C)}$ (courbe rouge continue), pour $N_L = N_C = 8$.

Comportement des polarisations individuelles moyennes

Afin de mieux comprendre comment chaque système joue son rôle d’amplificateur de spin nous observons le comportement des polarisations individuelles moyennes, ces dernières étant tracées pour des chaînes de $N_L = N_C = 20$ spins qui permettent une vision plus nette de la dynamique.

Dans un premier temps, nous observons le comportement des polarisations individuelles pour $\hat{H}^{(L)}$ et $\hat{H}_1^{(C)}$ qui sont les systèmes pour lesquels l’amplification de spin est la plus efficace (cf. les courbes bleue continue et rouge pointillée de la figure 3.28, observées dans le domaine $\tilde{t} \lesssim N$). Nous constatons pour ces deux systèmes la propagation de fronts de spins bien définis (un seul front se propageant vers la droite pour $\hat{H}^{(L)}$, deux fronts se propageant vers la droite et vers la gauche pour $\hat{H}_3^{(C)}$). Au sein de ces fronts les spins sont en majorité dans l’état down, et ce d’autant plus que la taille de la chaîne est importante. Cependant, force est de constater que l’on est très éloigné de la configuration idéale dans laquelle tous les spins auraient flipé dans l’état down : pour $\hat{H}^{(L)}$, on observe une dégradation du front de spins à proximité de la fin de la chaîne (cf. figure 3.30 pour $\tilde{t} = 21.9$) et pour $\hat{H}_1^{(C)}$ une dégradation de l’amplitude des fronts au voisinage du milieu de la chaîne (cf. figure 3.31 pour $\tilde{t} = 11.9$). Nous comprenons donc que pour ces deux systèmes, même si l’amplification de spin est correctement implémentée, elle ne l’est pas à la mesure de ce que l’on aurait souhaité.

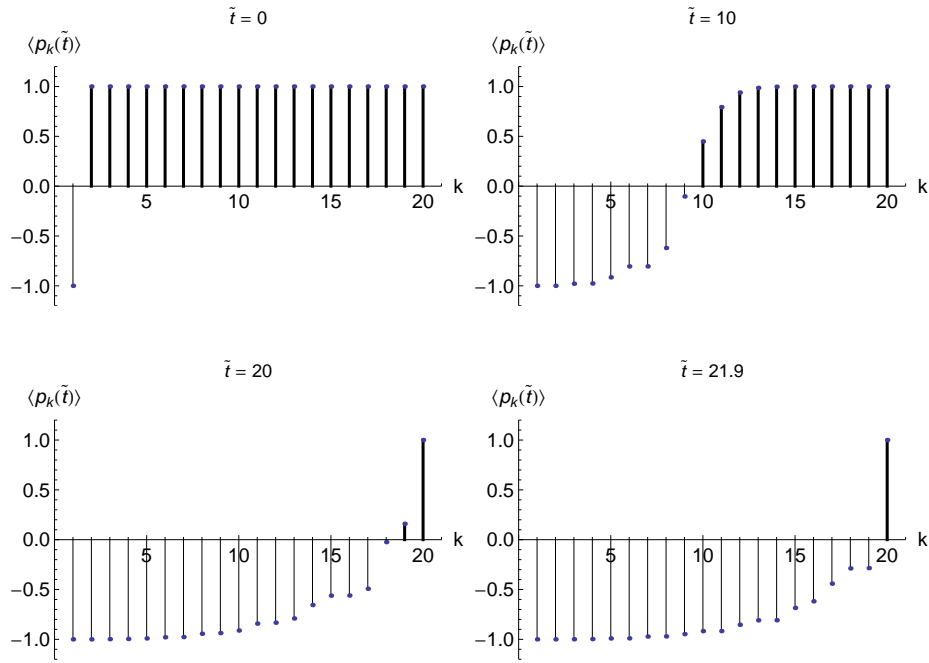


FIGURE 3.30 – Evolution temporelle des polarisations individuelles moyennes pour $\hat{H}^{(L)}$, avec $N_L = 20$ spins, pour $\tilde{t} = 0, 10, 20$ et 21.9 où le changement de la polarisation totale est maximal.

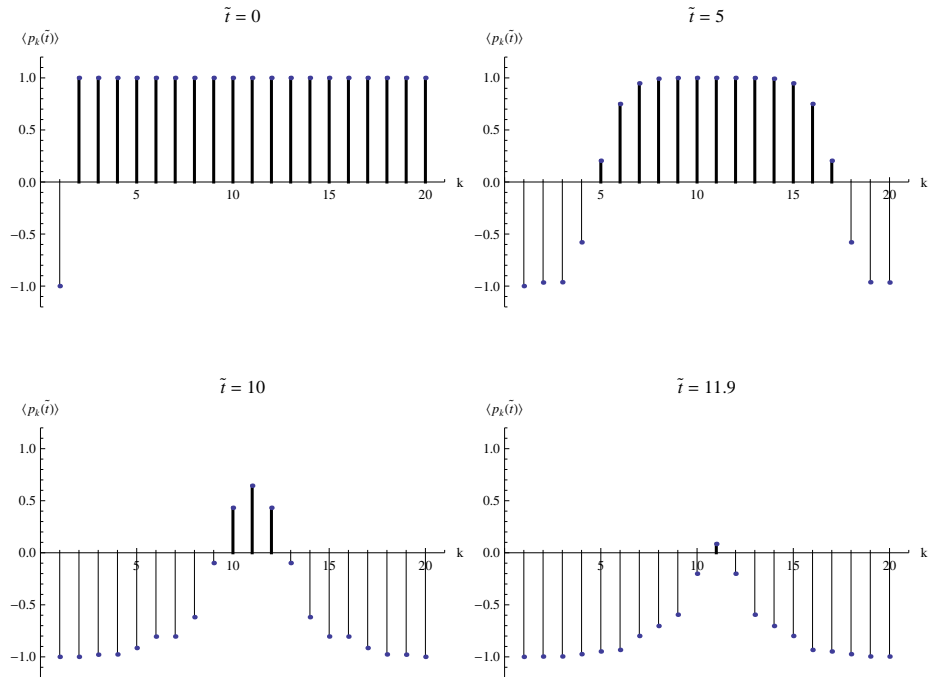


FIGURE 3.31 – Polarisation individuelle pour $\hat{H}_1^{(C)}$ avec $N_C = 20$ spins pour $\tilde{t} = 0, 5, 10$ et 11.9 où le changement de la polarisation totale est maximal.

Si nous nous intéressons maintenant au système $\hat{H}_2^{(C)}$ (qui comme on le constate sur la figure 3.28 réalise moins efficacement l'amplification de spin que $\hat{H}^{(L)}$ et $\hat{H}_1^{(C)}$) nous observons comme

pour $\hat{H}_1^{(C)}$ la propagation de deux fronts de spins à gauche et à droite, avec cette différence que ces derniers ne dépassent pas en amplitude une valeur de polarisation individuelle de -0.5 (cf. figure 3.32). Nous pouvons comprendre qualitativement ce comportement en se rappelant que les états de $\hat{H}_2^{(C)}$ (cf. figure 3.23), se divisent en deux parties (celle des états entourés en rouge, et celle des états entourés en bleu symétriques des précédents), et qu'au sein de la dynamique observée, les états rentrent en compétition avec leurs états symétriques (de polarisation opposée) entraînant inévitablement une diminution des polarisations tant individuelles que totale.

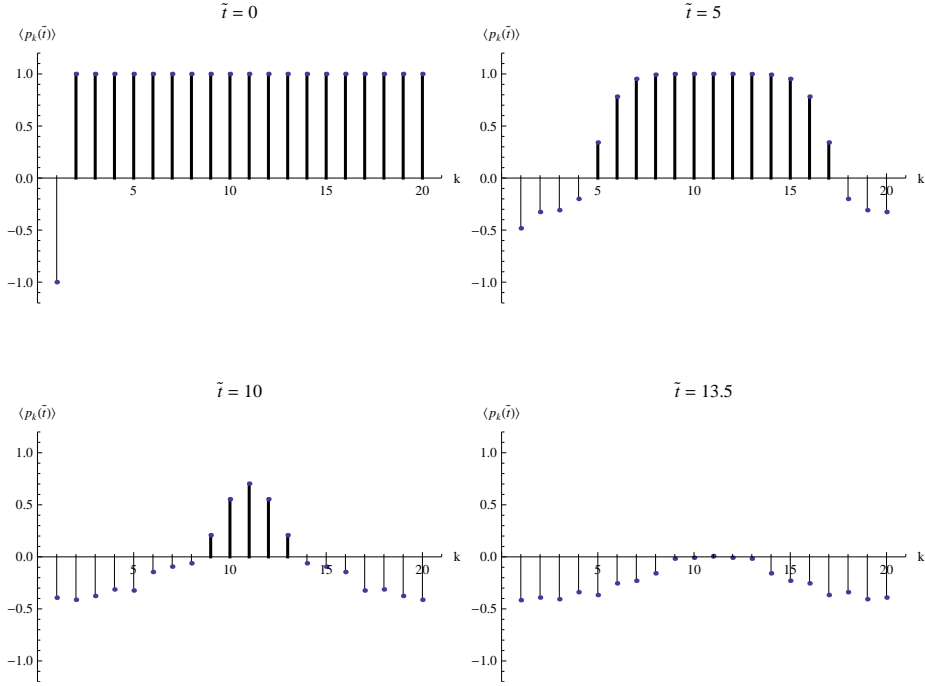


FIGURE 3.32 – Polarisation individuelle pour $\hat{H}_2^{(C)}$ avec $N_C = 20$ spins pour $\tilde{t} = 0, 5, 10$ et 13.5 où le changement de la polarisation totale est maximal.

Enfin, si nous nous penchons sur le cas de $\hat{H}_3^{(C)}$, nous observons une véritable dégradation de la fidélité totale de polarisation comparativement aux autres systèmes (cf. figure 3.28). En effet, dès le début la dynamique se branche sur les états $|\overline{\Lambda}_k\rangle$ en même temps que sur les états $|\Lambda_k\rangle$ expliquant cette dégradation immédiate de $F^{(C3)}(\tilde{t})$. Si l'on observe la figure 3.33, on ne voit plus de propagations bien définies de fronts de spins comme précédemment, témoignant que ce système, sur lequel s'est porté notre intérêt car sa base augmentait de façon linéaire avec la taille de la chaîne (en $\mathcal{O}(N_C)$, et non quadratiquement comme c'est le cas pour $\hat{H}_1^{(C)}$ et $\hat{H}_2^{(C)}$), se révèle malheureusement inadapté à l'amplification de spin.

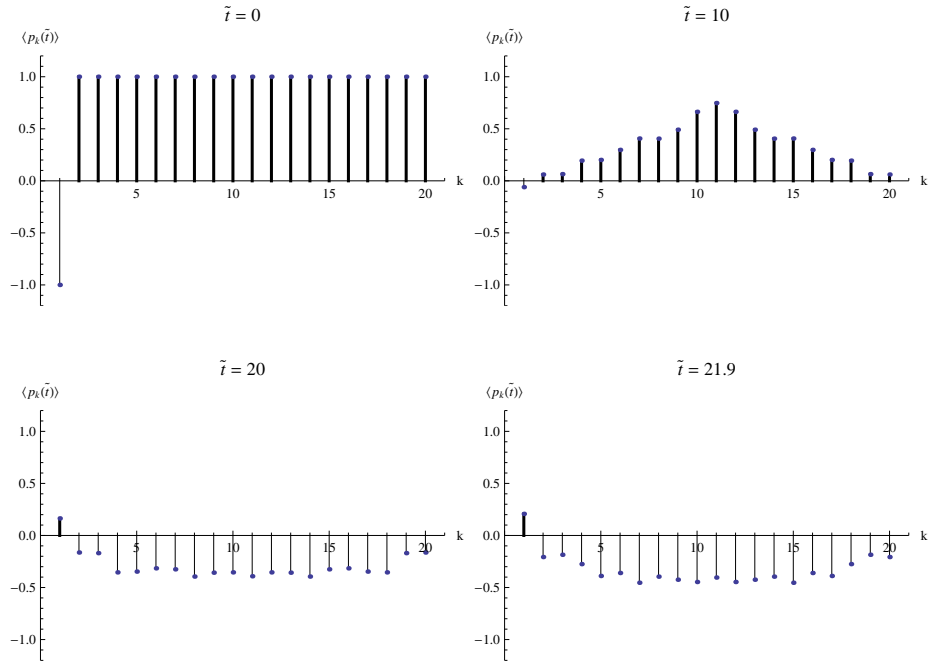


FIGURE 3.33 – Polarisation individuelle pour $\hat{H}_3^{(C)}$ avec $N_C = 20$ spins pour $\tilde{t} = 0, 10, 20$ et 21.9 où le changement de la polarisation totale est maximal.

Comparaison des vitesses de spin-flip

Nous remarquons que pour des chaînes de taille faible les $\langle \Delta P(\tilde{t}) \rangle$ ne se comportent pas véritablement linéairement dans le domaine des temps faibles comme le prédisent les équations (3.25) et (3.38) (cf. figure 3.29). En effet, pour ce faire, il est nécessaire d'observer des chaînes de taille suffisamment importante. Un tel exemple est montré dans la figure 3.34 pour une taille $N_L = N_C = 100$, et nous trouvons les vitesses de spin-flip : $|v_3^{(C)}| \approx 1.27$, $|v^{(L)}| \approx 1.70$, $|v_2^{(C)}| \approx 2.16$ et $|v_1^{(C)}| \approx 3.39$ (où l'on retrouve pour $|v^{(L)}|$ et $|v_3^{(C)}|$ les valeurs trouvées analytiquement).

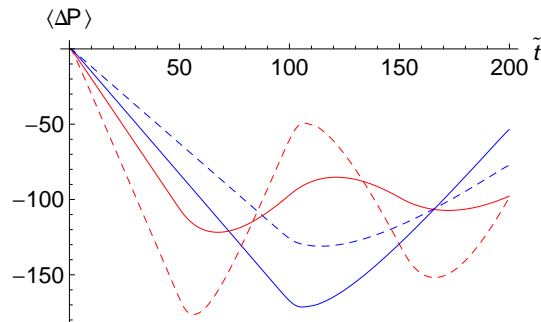


FIGURE 3.34 – Comparaison des changements de polarisations totales moyennes (relativement à leurs valeurs initiales) $\langle \Delta P(\tilde{t}) \rangle = \langle P(\tilde{t}) \rangle - \langle P(0) \rangle$ pour $\hat{H}^{(L)}$ (courbe bleue continue), $\hat{H}_3^{(C)}$ (courbe bleue pointillée), $\hat{H}_1^{(C)}$ (courbe rouge pointillée) et $\hat{H}_2^{(C)}$ (courbe rouge continue), pour $N_C = N_L = 100$.

3.4.3 Origine des différences observées

Influence de la taille des bases

Dans un premier temps nous nous intéressons aux systèmes $\hat{H}^{(L)}$ et $\hat{H}_3^{(C)}$ pour lesquels une différence de pente de 25% est observée entre $\langle \Delta P^{(L)}(\tilde{t}) \rangle$ et $\langle \Delta P_3^{(C)}(\tilde{t}) \rangle$ (cf. figure 3.34), comme prédit par les équations (3.25) et (3.38). La première hypothèse que l'on peut faire est que la dimension des bases impliquées dans la dynamique influence les vitesses de spin-flip observées. Puisque la dimension de la base pour $\hat{H}^{(L)}$ (états $|\Lambda_k\rangle$ avec $k \in [1, N_L - 1]$) est la moitié de celle de $\hat{H}_3^{(C)}$ (états $|\Lambda_k\rangle$ et $|\overline{\Lambda}_k\rangle$ avec $k \in [1, N_C - 1]$), nous pourrions penser que c'est là l'une des raisons expliquant les différences observées. Afin de vérifier cette hypothèse, nous retraçons $\langle \Delta P_3^{(C)}(\tilde{t}) \rangle$ pour $N_C = (N_L + 1)/2 = 26$, taille pour laquelle les deux bases ont alors la même dimension, mais comme nous pouvons le constater sur la figure 3.35 nous observons toujours la même vitesse de spin-flip pour $\hat{H}_3^{(C)}$, malgré le changement de taille de sa base.

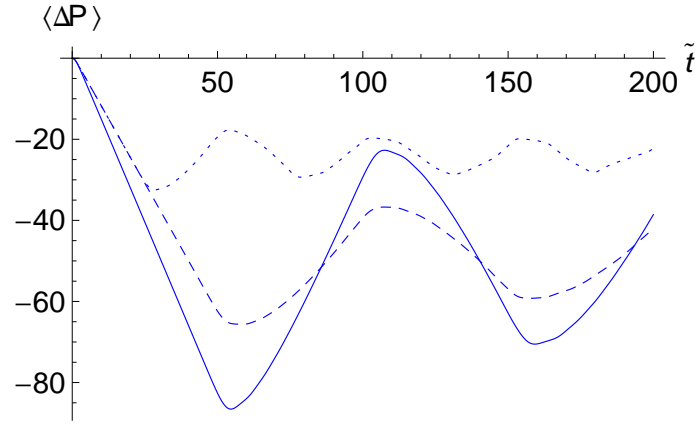


FIGURE 3.35 – Comparaison de $\langle \Delta P^{(L)}(\tilde{t}) \rangle$ (courbe bleue continue), $\langle \Delta P_3^{(C)}(\tilde{t}) \rangle$ ($N_C = N_L = 51$, courbe bleue pointillée) et $\langle \Delta P_3^{(C)}(\tilde{t}) \rangle$ ($N_C = (N_L + 1)/2 = 26$, courbe bleue pointillée).

Pour des tailles de bases identiques, les deux hamiltoniens $\hat{H}^{(L)}$ et $\hat{H}_3^{(C)}$ ne diffèrent pourtant que par un terme local additionnel permettant de fermer la chaîne, qui se manifeste au niveau de la représentation matricielle de $\tilde{H}_3^{(C)}$ par la présence supplémentaire de deux termes non-nuls dans les coins inférieur gauche et supérieur droit relativement à la représentation matricielle de $\tilde{H}^{(L)}$. Par exemple avec $N_L = 9$ pour $\hat{H}^{(L)}$ et $N_C = 5$ pour $\hat{H}_3^{(C)}$, nous observons dans les bases de la dynamique les représentations matricielles de la figure 3.36.

$$\tilde{H}^{(L)} = J \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \tilde{H}_3^{(C)} = J \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \boxed{1} \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ \boxed{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

FIGURE 3.36 – Représentation matricielles pour $\hat{H}^{(L)}$ ($N_L = 9$) et $\hat{H}_3^{(C)}$ ($N_C = 5$).

On s'attendrait donc à mesurer des effets tout au plus en $\mathcal{O}(1/N_L)$, mais nos résultats analytiques montrent que cette différence de 25% persiste pour des systèmes arbitrairement grands, comme l'on peut le constater sur les figures 3.37 et 3.38 où il apparaît clairement que les vitesses de spin-flip ne changent pas avec la taille de la chaîne (ni donc avec la taille de la base dans laquelle évolue la dynamique), résultat cohérent avec les calculs des comportements linéaires des polarisations totales moyennes dérivés dans les équations (3.25) et (3.38), indépendants de N_L et N_C (en ce qui concerne le terme proportionnel à \tilde{t}).

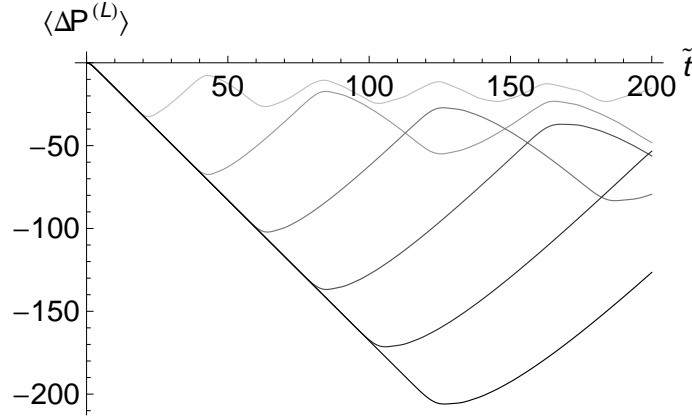


FIGURE 3.37 – Comparaison des $\langle \Delta P^{(L)}(\tilde{t}) \rangle = \langle P^{(L)}(\tilde{t}) \rangle - \langle P^{(L)}(0) \rangle$ pour $\hat{H}^{(L)}$ pour différentes taille de chaînes (de $N_L = 20$ (courbe supérieure) à $N_L = 120$ (courbe inférieure), par pas de 20).

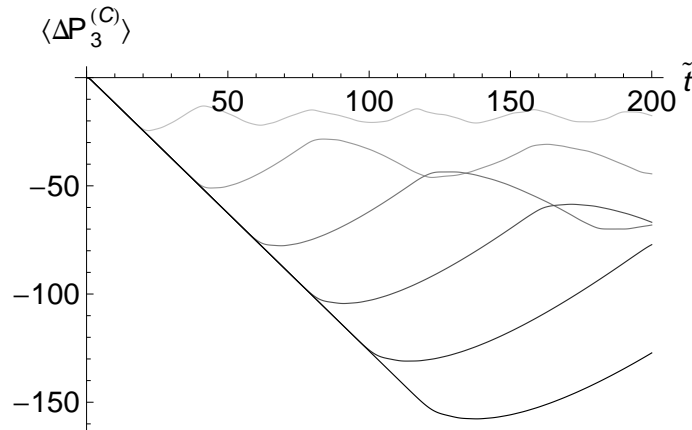


FIGURE 3.38 – Comparaison des $\langle \Delta P_3^{(C)}(\tilde{t}) \rangle = \langle P_3^{(C)}(\tilde{t}) \rangle - \langle P_3^{(C)}(0) \rangle$ pour $\hat{H}_3^{(C)}$ pour différentes taille de chaînes (de $N_C = 20$ (courbe supérieure) à $N_C = 120$ (courbe inférieure), par pas de 20).

De la même façon nous observons pour les systèmes $\hat{H}_1^{(C)}$ et $\hat{H}_2^{(C)}$ la même indépendance des vitesses de spin-flip en fonction de la taille des chaînes (cf. les figures 3.39 et 3.40), les polarisations totales moyennes ayant été calculées par diagonalisation numériques.

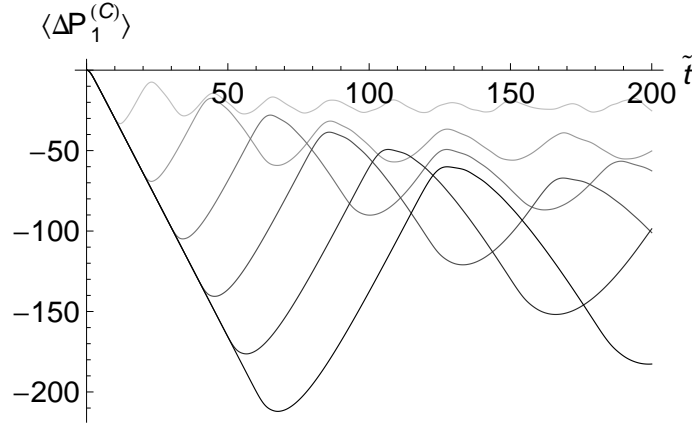


FIGURE 3.39 – Comparaison des $\langle \Delta P_1^{(C)}(\tilde{t}) \rangle = \langle P_1^{(C)}(\tilde{t}) \rangle - \langle P_1^{(C)}(0) \rangle$ pour $\hat{H}_1^{(C)}$ pour différentes taille de chaînes (de $N_C = 20$ (courbe supérieure) à $N_C = 120$ (courbe inférieure), par pas de 20).

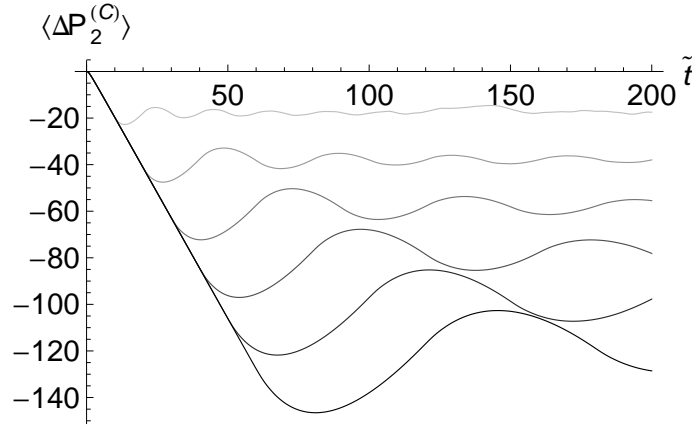


FIGURE 3.40 – Comparaison des $\langle \Delta P_2^{(C)}(\tilde{t}) \rangle = \langle P_2^{(C)}(\tilde{t}) \rangle - \langle P_2^{(C)}(0) \rangle$ pour $\hat{H}_2^{(C)}$ pour différentes taille de chaînes (de $N_C = 20$ (courbe supérieure) à $N_C = 120$ (courbe inférieure), par pas de 20).

Influence de la structure physique de la base - Comparaison des spectres

Entre $\hat{H}^{(L)}$ et $\hat{H}_3^{(C)}$ nous voyons donc que les différences résident avant tout dans la structure physique des fonctions de base. Le simple couplage additionnel dans $\hat{H}_3^{(C)}$ (par rapport à $\hat{H}^{(L)}$) donne accès à une nouvelle partie de l'espace de Hilbert constituée par les états $|\overline{\Lambda}_k\rangle$, qui par leurs polarisations opposées à celles des $|\Lambda_k\rangle$ réduisent la polarisation totale comparativement à la chaîne linéaire. Une sorte de bifurcation a donc lieu dans l'espace de Hilbert qui dépend de la présence (ou non) de ce couplage additionnel et conduit alors à un comportement macroscopiquement différent des polarisations totales moyennes.

Concernant les systèmes $\hat{H}_1^{(C)}$ et $\hat{H}_2^{(C)}$, les causes des différences observées (relativement à $\hat{H}^{(L)}$) sont plus complexes à déterminer exactement. Tout d'abord, on peut suspecter l'influence de la dimension des bases relativement à la taille des chaînes (en $\mathcal{O}(N_C^2)$ pour $\hat{H}_1^{(C)}$ et $\hat{H}_2^{(C)}$,

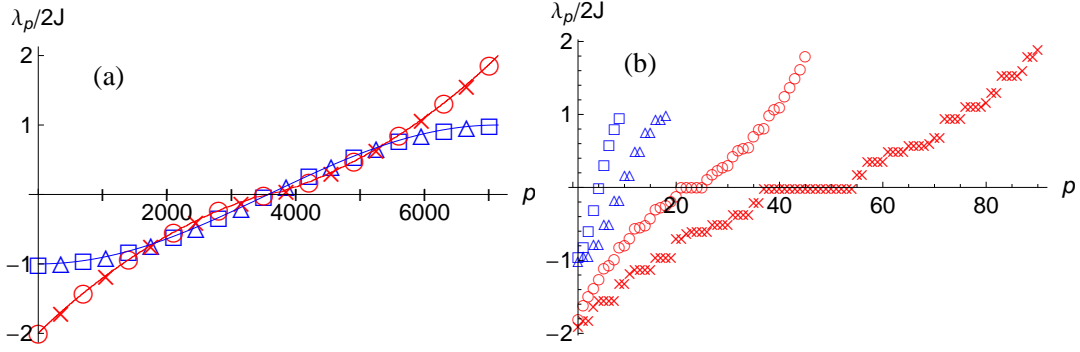


FIGURE 3.41 – (a) Spectres pour $\hat{H}^{(L)}$ (carrés bleus, $N_L = 7141$), $\hat{H}_1^{(C)}$ (courbe rouge continue avec croix, $N_C = 120$), $\hat{H}_2^{(C)}$ (cercles rouges, $N_C = 80$), $\hat{H}_3^{(C)}$ (triangles bleus, $N_C = 3571$). La loi de dispersion de l'équation (3.12) est tracée (courbe bleue continue). Seul un sous-ensemble de l'ensemble ordonné des valeurs propres λ_p est tracé comme fonction de p . (b) Spectres pour $\hat{H}^{(L)}$, $\hat{H}_1^{(C)}$, $\hat{H}_2^{(C)}$ et $\hat{H}_3^{(C)}$ pour $N_L = N_C = 10$. Même symboles que pour (a).

en $\mathcal{O}(N_L)$ pour $\hat{H}^{(L)}$, mais également l'importance des différences qui existent entre les représentations matricielles de $\hat{H}_1^{(C)}$ et $\hat{H}_2^{(C)}$, et celles de $\hat{H}^{(L)}$ et $\hat{H}_3^{(C)}$. Dans la figure 3.41.a où nous traçons les spectres pour les différents hamiltoniens pour des tailles de base identiques (7140 états de bases avec $N_L = 7141$, $N_{C1} = 120$, $N_{C2} = 85$, $N_{C3} = 3571$) nous constatons en effet qu'il existe une grande différence entre les spectres de $\hat{H}_1^{(C)}$ et $\hat{H}_2^{(C)}$, et ceux de $\hat{H}^{(L)}$ et $\hat{H}_3^{(C)}$.

Les spectres de $\hat{H}^{(L)}$ et $\hat{H}_3^{(C)}$ suivent les lois de dispersion prédites par les équations (3.12) et (3.31) qui sont celles d'un modèle de liaisons fortes à une dimension, et coïncident quasiment parfaitement. Ce résultat est intuitif puisque pour une même taille de base les représentations matricielles $\hat{H}^{(L)}$ et $\hat{H}_3^{(C)}$ ne diffèrent que par les deux éléments de matrice hors diagonaux situés dans le coin inférieur gauche et dans le coin supérieur droit (cf. figure 3.36). Nous nous attendons donc au pire à une correction en $\mathcal{O}(1/N_L)$ des valeurs propres de $\hat{H}_3^{(C)}$ par rapport aux valeurs propres de $\hat{H}^{(L)}$. En effet, en observant la moyenne des différences en valeur absolue entre les éléments matriciels de chacun des propagateurs $\hat{U}^{(L)}(\tilde{t})$ et $\hat{U}^{(C3)}(\tilde{t})$ en fonction de N_L (avec $N_L - 1 = 2(N_C - 1)$), nous trouvons même une correction qui décroît encore plus rapidement approximativement en $\mathcal{O}(1/N_L^2)$.

De même nous observons que les spectres de $\hat{H}_1^{(C)}$ et $\hat{H}_2^{(C)}$ sont relativement proches l'un de l'autre, même si nous ne disposons pas cette fois-ci de formules analytiques auxquelles les comparer. Cependant, dans la limite des N_C larges, ces deux systèmes physiques se rapprochent d'un modèle de liaisons fortes à deux dimensions dans le sens où chaque état à l'intérieur du triangle des états pour $\hat{H}_1^{(C)}$, et chaque état situé sur les sommets de tous les polygones pour $\hat{H}_2^{(C)}$ (à l'exception du polygone le plus intérieur et du polygone le plus extérieur) est couplé à ses 4 plus proches voisins. Cependant le spectre diffère ici de façon substantielle de l'usuel spectre d'un modèle de liaisons fortes sur réseau bidimensionnel carré, ceci principalement en raison de la géométrie inhabituelle du réseau. Par exemple pour $N_C = 5$, le réseau correspondant à $\hat{H}_2^{(C)}$ présente la symétrie diédrale d'un pentagone (C_{5v} , voir figure 3.21), laquelle conduit à des dégénérescences assez larges (en particulier au centre du spectre, cf. les courbes rouges de la figure 3.41.b), et à des pentes finies aux frontières du spectre particulièrement visibles pour

des chaînes de grandes tailles (cf. les courbes rouges de la figure 3.41.a).

3.5 Conclusion partielle

Dans ce chapitre, nous avons donc montré la nécessité (si l'on souhaite implémenter une amplification de spin qui soit la plus efficace possible), de faire preuve de la plus grande vigilance dans le choix des couplages que l'on impose aux frontières. De simples différences entre ces derniers suffisent en effet à provoquer des comportements macroscopiquement différents de la dynamique (cf. l'étude des polarisations totales moyennes). Ces résultats sont intéressants en ce sens qu'ils mettent en avant comment de simples différences locales peuvent influencer de façon globale l'efficacité d'un système comme amplificateur de spin (cf. l'étude des fidélités totales de polarisation), et comment les chaînes de spins sont des systèmes physiques qui font preuve d'une très grande sensibilité aux conditions aux frontières.

Nous avons également vu qu'une approche semi-classique était possible lorsque les systèmes possèdent des bases dont les dimensions sont linéaires par rapport à la taille de la chaîne ($\hat{H}^{(L)}$ et $\hat{H}_3^{(C)}$). Nous avons alors montré qu'il était possible de dériver une expression analytique des polarisations totales moyennes, en utilisant dans un premier temps une réécriture des propagateurs quantiques ($\hat{U}^{(L)}(\tilde{t})$ et $\hat{U}_3^{(C)}(\tilde{t})$) sous la forme de sommes de fonctions de Bessel, puis en montrant comment il était suffisant de ne conserver que les seuls termes qui correspondent physiquement à des propagations classiques de fronts de spins vers la droite ou vers la gauche (sans possibilité de réflexions en bout de chaîne (pour les chaînes linéaires) ou de tours multiples (pour les chaînes circulaires), si l'on restreint notre fenêtre temporelle à des temps $\tilde{t} \lesssim N$).

Conclusion générale

Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés dans cette thèse au clonage quantique et notamment à la possibilité pour ce dernier de surpasser le clonage classique par l'utilisation de ressources purement quantiques. A cette question de savoir quelle ressource est précisément nécessaire pour que le clonage quantique soit plus efficace que son homologue classique, nous avons répondu de façon étonnante que l'interférence (au sens où nous l'avons définie dans cette thèse) n'est pas une ressource indispensable. En effet, nous avons montré comment toute une classe de cloneurs quantiques universels et symétriques existe, pour lesquels une fidélité moyenne de clonage de $5/6$ est atteinte (valeur maximale autorisée pour de tels cloneurs), et ce en absence d'interférence. Pour ce faire, il nous a suffi d'imposer de choisir des cloneurs dont les matrices dynamiques correspondantes ont la particularité d'avoir les éléments hors-diagonaux de leurs blocs diagonaux nuls (permettant ainsi d'avoir une interférence nulle). Les résultats obtenus, à défaut d'apporter la preuve du caractère indispensable d'une ressource particulière qui expliquerait l'accélération du calcul quantique sur le calcul classique, nous permettent néanmoins de prendre conscience que lorsque la mécanique quantique est présente, rien n'est jamais aussi évident ou intuitif qu'il peut y paraître au premier abord.

Dans un second temps, nous avons étudié le problème de l'amplification de spin dans des chaînes de spins (où l'état d'un spin unique est retranscrit sur un ensemble macroscopique de spins), et pour différents systèmes (chaînes linéaires, chaînes circulaires avec différentes conditions de fermeture) nous nous sommes intéressés à l'efficacité de ces derniers comme systèmes amplificateurs (par l'observation des fidélités totales de polarisation). Nous avons alors eu la surprise de nous rendre compte que, contrairement à ce que l'on aurait pu croire naïvement, pour de tels systèmes les conditions aux frontières jouent un rôle primordial et donnent lieu à des comportements macroscopiques complètement différents (notamment des polarisations totales moyennes). Nous avons également montré que, lorsque les systèmes ont des bases dont la dimension est linéaire par rapport à la taille de la chaîne, il est alors possible de dériver une approche semi-classique et d'obtenir des expressions analytiques des polarisations totales moyennes dans le domaine des temps faibles (pour lesquels les fronts de spins n'ont pas le temps de parcourir entièrement la chaîne).

Pour conclure, nous pouvons terminer en soulignant la nécessité impérieuse d'apprendre à douter des évidences que l'on est tenté parfois d'avoir sur les choses, les deux thèmes que nous avons étudiés dans cette thèse nous ayant montré comment la réalité physique pouvait, au contraire, aller à l'inverse des intuitions premières que l'on peut avoir.

Annexe A

Fonctions de Bessel et fonctions de Airy

Dans cette annexe, nous faisons quelques rapides rappels sur les fonctions de Bessel du premier type et les fonctions de Airy.

A.0.1 Fonctions de Bessel du premier type

Les fonctions de Bessel $J_n(x)$ (dites de premier type, avec n entier) sont les solutions de l'équation différentielle

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} + (x^2 - n^2)y = 0 .$$

Dans la figure A.1, nous traçons le comportement de quelques-unes de ces fonctions pour différentes valeurs de n .

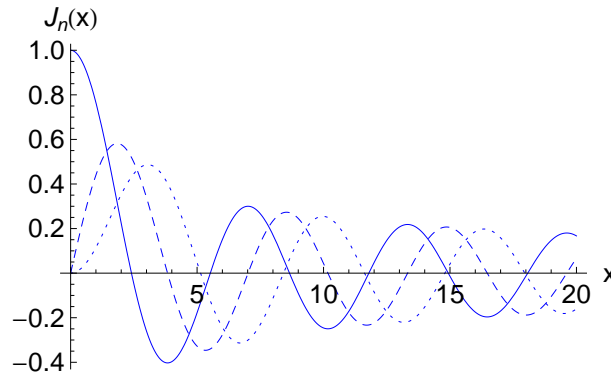


FIGURE A.1 – Fonctions de Bessel $J_0(x)$ (courbe continue), $J_1(x)$ (courbe avec tirets), $J_2(x)$ (courbe pointillée).

Ces fonctions sont notamment définies par l'intégrale :

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dp e^{-i(np - x \sin(p))} .$$

C'est à partir de cette expression analytique que nous serons capables dans le chapitre sur l'amplification de spin, de dériver des expressions analytiques pour les éléments matriciels de

certaines propagateurs quantiques. Les fonctions de Bessel présentent également les propriétés suivantes intéressantes que nous utiliserons dans ce manuscrit :

$$J_{n-1}(x) + J_{n+1}(x) = 2 \left(\frac{n}{x} \right) J_n(x) ,$$

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x) .$$

Enfin, une dernière propriété importante est que pour des indices n grands devant 1, $J_n(x)$ est négligeable pour des valeurs de l'argument x faibles devant n , i.e.

$$|J_n(x)| \ll 1 : n \gg 1 \text{ et } |x| \ll n ,$$

comme nous pouvons le constater par exemple sur la figure A.2 pour $n = 20 \gg 1$, dans le domaine $x \ll 20$.

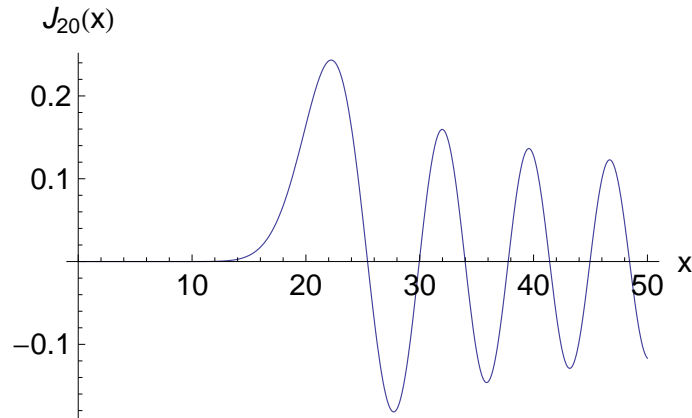


FIGURE A.2 – Fonctions de Bessel $J_{20}(x)$.

A.0.2 Fonctions de Airy

Les fonctions de Airy $Ai(x)$ sont définies comme les fonctions solutions de l'équation différentielle : $y'' - xy = 0$.

Cette équation est l'équation différentielle du second-ordre la plus simple pour laquelle on obtient un point tournant, i.e. une valeur de x où les solutions passent d'un comportement oscillatoire à un comportement exponentiel. Sur la figure A.3, nous pouvons observer le comportement d'une telle fonction, ainsi que des deux régimes oscillatoire et exponentiel, respectivement à gauche et à droite du point tournant situé à $x = -1.01879$.

L'aspect qui nous intéressera dans ce manuscrit est qu'au voisinage du point tournant, la fonction de Bessel $J_n(x)$ peut être approximée par la fonction de Airy suivant la relation (cf. [43], terme principal de l'équation 9.3.15) :

$$J_n(x) \approx \left(\frac{2}{x} \right)^{\frac{1}{3}} Ai(z),$$

$$z = \left(\frac{2}{x} \right)^{\frac{1}{3}} (n - x).$$

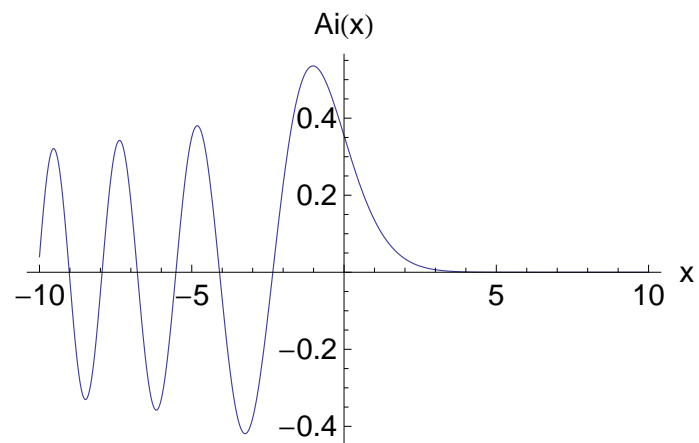


FIGURE A.3 – Fonction de Airy $Ai(x)$.

Nous pouvons observer ceci sur la figure A.4, où l'on voit comment les deux fonctions (tracées pour $n = 40$) coïncident parfaitement jusqu'au point tournant.

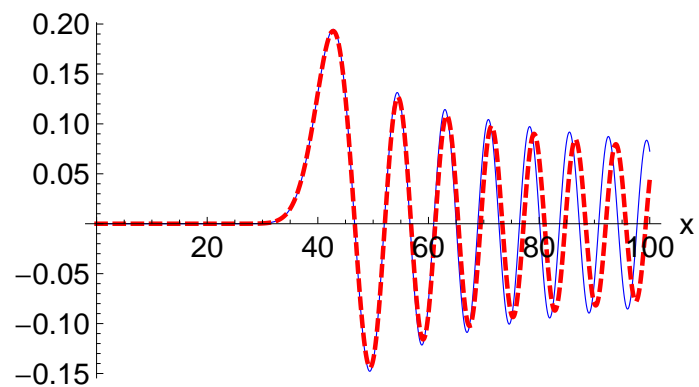


FIGURE A.4 – Comparaison entre la fonction $J_n(x)$ (courbe bleue continue) et la fonction $(\frac{2}{x})^{\frac{1}{3}} Ai(z)$, $z = (\frac{2}{x})^{\frac{1}{3}}(n - x)$ (courbe rouge pointillée), pour $n = 40$.

Annexe B

Fidélité moyenne et matrice dynamique

Dans cette annexe où nous considérons un système formé de deux sous-ensembles A et B , nous notons $|k\rangle_X$, un ket défini dans l'espace de Hilbert \mathcal{H}_X ($X \in A, B$).

Supposons que nous disposons d'un système à 2 qubits A et B : le premier initialement dans l'état $|\psi_A^{IN}\rangle_A = \cos(\theta/2)|0\rangle_A + \sin(\theta/2)e^{i\phi}|1\rangle_A$, le second dans l'état $|0\rangle_B$. La matrice densité initiale du système total $A + B$ s'écrit :

$$\begin{aligned}\rho_{AB}^{IN} &= \rho_A^{IN} \otimes \rho_B^{IN} , \\ \rho_A^{IN} &= |\psi_A^{IN}\rangle_{AA}\langle\psi_A^{IN}| , \\ \rho_B^{IN} &= |0\rangle_B\langle 0| .\end{aligned}$$

Dans la base computationnelle de l'espace de Hilbert à 2 qubits : $\{|00\rangle_{AB}, |01\rangle_{AB}, |10\rangle_{AB}, |11\rangle_{AB}\}$, nous parvenons aux représentations matricielles suivantes pour les matrices densités initiales des systèmes A et B :

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_A^{IN} &= \begin{pmatrix} \cos^2(\frac{\theta}{2}) & \frac{\sin(2\theta)}{2} e^{-i\phi} \\ \frac{\sin(2\theta)}{2} e^{-i\phi} & \sin^2(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix} , \\ \tilde{\rho}_B^{IN} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} .\end{aligned}$$

La fidélité moyenne pour le premier qubit est définie par

$$\bar{F}_A = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) {}_A\langle\psi_A^{IN}|\rho_A^{OUT}|\psi_A^{IN}\rangle_A ,$$

où la matrice densité réduite ρ_A^{OUT} est donnée par :

$$\rho_A^{OUT} = Tr_B[\rho_{AB}^{OUT}] = \sum_{i=0}^1 {}_B\langle i|\rho_{AB}^{OUT}|i\rangle_B .$$

Calculons dans un premier temps l'expression des termes $(\rho_A^{OUT})_{kl} = {}_A\langle k|\rho_A^{OUT}|l\rangle_A$. Nous obtenons :

$$(\rho_A^{OUT})_{kl} = \sum_{i=0}^1 {}_A\langle k|{}_B\langle i|\rho_{AB}^{OUT}|i\rangle_B|l\rangle_A$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i=0}^1 {}_{AB} \langle ki | \rho_{AB}^{OUT} | li \rangle_{AB} \\
&= \sum_{i=0}^1 (\rho_{AB}^{OUT})_{ki, li} .
\end{aligned}$$

Maintenant calculons ${}_A \langle \psi^{IN} | \rho_A^{OUT} | \psi^{IN} \rangle_A$. En utilisant comme notation ${}_A \langle k | \psi \rangle_A = (|\psi\rangle_A)_k$, $k \in \{0, 1\}$, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
{}_A \langle \psi^{IN} | \rho_A^{OUT} | \psi^{IN} \rangle_A &= \sum_{k, l=0}^1 ({}_A \langle \psi^{IN} |)_k (\rho_A^{OUT})_{kl} (|\psi^{IN}\rangle_A)_l \\
&= \sum_{k, l=0}^1 (\rho_A^{OUT})_{kl} (|\psi^{IN}\rangle_A)_k ({}_A \langle \psi^{IN} |)_l \\
&= \sum_{k, l=0}^1 (\rho_A^{OUT})_{kl} (\rho_A^{IN})_{kl}^T \\
&= \sum_{k, l=0}^1 \sum_{i=0}^1 (\rho_{AB}^{OUT})_{ki, li} (\rho_A^{IN})_{kl}^T .
\end{aligned}$$

En définissant : $|00\rangle_{AB} \equiv |0\rangle_{AB}$, $|01\rangle_{AB} \equiv |1\rangle_{AB}$, $|10\rangle_{AB} \equiv |2\rangle_{AB}$, $|11\rangle_{AB} \equiv |3\rangle_{AB}$, nous obtenons la relation suivante entre la matrice densité initiale ρ_{AB}^{IN} , la matrice densité finale ρ_{AB}^{OUT} , et le propagateur P , i.e.

$$(\rho_{AB}^{OUT})_{I, J} = \sum_{M, N=0}^3 P_{IJ, MN} (\rho_{AB}^{IN})_{MN} ,$$

et donc finalement

$$(\rho_{AB}^{OUT})_{i_1 i_2, j_1 j_2} = \sum_{m_1, m_2, n_1, n_2=0}^1 P_{i_1 i_2 j_1 j_2, m_1 m_2 n_1 n_2} (\rho_{AB}^{IN})_{m_1 m_2, n_1 n_2} .$$

Nous obtenons donc l'expression finale de la fidélité moyenne, i.e.

$$\begin{aligned}
\bar{F}_A &= \sum_{k, l=0}^1 \sum_{i=0}^1 \sum_{m_1, m_2, n_1, n_2=0}^1 P_{ki li, m_1 m_2 n_1 n_2} A_{m_1 m_2 n_1 n_2}^{kl} \\
&= \sum_{k, l=0}^1 \sum_{i=0}^1 \sum_{m_1, m_2, n_1, n_2=0}^1 D_{ki m_1 m_2, li n_1 n_2} A_{m_1 m_2 n_1 n_2}^{kl} ,
\end{aligned}$$

où nous avons défini

$$A_{m_1 m_2 n_1 n_2}^{kl} \equiv \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) (\rho_{AB}^{IN})_{m_1 m_2 n_1 n_2} (\rho_A^{IN})_{kl}^T .$$

Nous calculons ces termes une fois pour toute $\forall k, l, m_1, m_2, n_1, n_2 \in \{0, 1\}$, et trouvons comme seuls termes non-nuls les termes :

$$\begin{aligned} A_{0000}^{00} &= 1/3 , \\ A_{1010}^{00} &= 1/6 , \\ A_{0010}^{01} &= 1/6 , \\ A_{1000}^{10} &= 1/6 , \\ A_{0000}^{11} &= 1/6 , \\ A_{1010}^{11} &= 1/3 . \end{aligned}$$

Nous parvenons alors à l'expression finale de la fidélité moyenne pour le qubit A :

$$\begin{aligned} \overline{F}_A &= \frac{1}{6} \left(2D_{00,00} + D_{00,22} + D_{02,02} + 2D_{10,10} + D_{10,32} + D_{12,12} \right. \\ &\quad \left. + D_{20,20} + D_{22,00} + 2D_{22,22} + D_{30,30} + D_{32,10} + 2D_{32,32} \right) . \end{aligned}$$

De la même façon, en partant de

$$\overline{F}_B = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin(\theta)_B \langle \psi_A^{IN} | \rho_B^{OUT} | \psi_A^{IN} \rangle_B ,$$

nous parvenons à :

$$\begin{aligned} \overline{F}_B &= \frac{1}{6} \left(2D_{00,00} + D_{00,12} + D_{02,02} + D_{10,10} + D_{12,00} + 2D_{12,12} \right. \\ &\quad \left. + 2D_{20,20} + D_{20,32} + D_{22,22} + D_{30,30} + D_{32,20} + 2D_{32,32} \right) . \end{aligned}$$

Bibliographie

- [1] W. K. Wootters, W. H. Zurek : Nature **99**, 802 (1982)
A single quantum cannot be cloned
- [2] G. Moore : Electronics Magazine **38**, 8 (1965)
Cramming more components onto integrated circuits
- [3] P. W. Shor : Proc. 35th Annu. Symp. Foundations of Computer Science (1994)
Algorithms for quantum computation : Discrete logarithms and factoring
- [4] L. K. Grover : Phys. Rev. Lett. **79**, 325 (1997)
Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack
- [5] D. R. Simon : Proc. 35th Annu. Symp. Foundations of Computer Science, 116-123 (1994)
On the power of quantum computation
- [6] A. W. Harrow, A. Hassidim, S. Lloyd : Phys. Rev. Lett. **103**, 150502 (2009)
Quantum algorithm for linear systems of equations
- [7] B. Roubert, D. Braun : Phys. Rev. A **78**, 042311 (2008)
Role of interference in quantum cloning
- [8] N. Gisin, S. Massar : Phys. Rev. Lett. **79**, 2153 (1997)
Optimal Quantum Cloning Machines
- [9] D. Brub, D. P. DiVincenzo, A. Ekert and al. : Phys. Rev. A **57**, 2368 (1998)
Optimal universal and state-dependent quantum cloning
- [10] N. Gisin : Phys. Lett. A **242**, 1 (1998)
Quantum cloning without signaling
- [11] V. Buzek, M. Hillery : Phys. Rev. A **54**, 1844 (1996)
Quantum copying : Beyond the no-cloning theorem
- [12] M. Horodecki, P. Horodecki, R. Horodecki : Phys. Rev. A **60**, 1888 (1999)
General teleportation channel, singlet fraction, and quasidistillation
- [13] V. Scarani, S. Iblisdir, N. Gisin, A. Acin : Reviews of Modern Physics **77**, 1225 (2005)
Quantum cloning
- [14] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo : Nature **404**, 247 (2000)
Quantum information and computation
- [15] D. Braun, B. Georgeot : Phys. Rev. A **73**, 022314 (2006)
Quantitative measure of interference
- [16] D. Braun, B. Georgeot : Phys. Rev. A **77**, 022318 (2008)
Interference versus success probability in quantum algorithms with imperfections

- [17] L. Arnaud, D. Braun : Phys. Rev. A **75**, 062314 (2007)
Distribution of interference in random quantum algorithms
- [18] A. O. Lyakhov, D. Braun, C. Bruder : Phys. Rev. A **76**, 022321 (2007)
Role of interference in quantum state transfer through spin chains
- [19] K. Zyczkowski, I. Bengtsson : Cambridge university press (2006)
Geometry of quantum states : an introduction to quantum entanglement
- [20] M.-D. Choi : Linear Alg. Appl. **10**, 285 (1975)
Completely positive linear maps on complex matrices
- [21] K. Zyczkowski, I. Bengtsson : Open Syst. Inf. Dyn. **11**, 11 (2004)
On duality between quantum states and quantum maps
- [22] S. Bose : Phys. Rev. Lett. **91**, 207901 (2003)
Quantum communication through an unmodulated spin chain
- [23] M. Christandl, A. Ekert, A. Kay and al. : Phys. Rev. A **71**, 032312 (2005)
Perfect transfer of arbitrary states in quantum spin networks
- [24] G. D. Chiara, D. Rossini, S. Montangero, R. Fazio : Phys. Rev. A **72**, 012323 (2005)
From perfect to fractal transmission in spin chains
- [25] P. Karbach, J. Stolze : Phys. Rev. A **72**, 030301 (2005)
Spin chains as perfect quantum state mirrors
- [26] M.-H. Yung, S. Bose : Phys. Rev. A **71**, 032310 (2005)
Perfect state transfer, effective gates, and entanglement generation in engineered bosonic and fermionic networks
- [27] G. Furman, J. S. Lee, A. K. Khitrin and al. : Phys. Rev. B **74**, 054404 (2006)
Stimulated wave of polarization in spin chains
- [28] A. Kay : Phys. Rev. A **73**, 032306 (2006)
Perfect state transfer : Beyond nearest-neighbor couplings
- [29] C. D. Franco, M. Paternostro, M. S. Kim : Phys. Rev. Lett. **101**, 230502 (2008)
Perfect state transfer on a spin chain without state initialization
- [30] M. Wiesniak : Phys. Rev. A **78**, 052334 (2008)
Heisenberg chains cannot mirror a state
- [31] M. Christandl, N. Datta, A. Ekert, A. J. Landahl : Phys. Rev. Lett. **92**, 187902 (2004)
Perfect state transfer in quantum spin networks
- [32] A. Wójcik, T. Luczaka, P. Kurzynski and al. : Phys. Rev. A **72**, 034303 (2005)
Unmodulated spin chains as universal quantum wires
- [33] D. Rugar, R. Budakian, H. J. Mamin, B. W. Chui : Nature **430**, 329-332 (2004)
Single spin detection by magnetic resonance force microscopy
- [34] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven and al. : Rev. Mod. Phys. **79**, 1217-1265 (2007)
Spins in few-electron quantum dots
- [35] J. S. Lee, A. K. Khitrin : Phys. Rev. A **71**, 062338 (2005)
Stimulated wave of polarization in a one-dimensional Ising chain

- [36] A. Kay : Phys. Rev. Lett. **98**, 010501 (2007)
Unifying quantum state transfer and state amplification
- [37] H.-L. Deng, X.-M. Fang : Chin. Phys. Lett. **25**, 375 (2008)
One-step implementation of single spin measurement in spin star network
- [38] A. Kay, M. Ericsson : New J. Phys. **7**, 143 (2005)
Geometric effects and computation in spin networks
- [39] D. Burgarth, S. Bose, C. Bruder, V. Giovannetti : Phys. Rev. A **79**, 060305 (2009)
Local controllability of quantum networks
- [40] D. Braun, G. Montambaux, M. Pascaud : Phys. Rev. Lett. **81**, 1062 (1998)
Boundary conditions at the mobility edge
- [41] F. Haake : Springer, Third edition (2010)
Quantum signatures of chaos
- [42] B. Roubert, P. Braun, D. Braun : Phys. Rev. A **82**, 022302 (2010)
Large effects of boundaries on spin amplification in spin chains
- [43] M. Abramowitz, A. Stegun : Dover Publications Inc., Ninth edition (1970)
Handbook of mathematical functions