FIP master 1ère année
lundi 11 décembre 2006

M2 - Théorie quantique des champs

TD 12 : Seconde quantification

Dans l'ensemble de ce TD, nous considèrerons des fermions identiques. Si aucune interaction entre particules n'est présente, chaque fermion est décrit par l'hamiltonien H, dont nous noterons $|i\rangle$ et ϵ_i les états et énergies propres (nous noterons $\mathcal{F}_1$ l'espace de Hilbert correspondant). Nous utiliserons les notations tensorielles suivantes

$$\begin{aligned} |1:i_1;\ 2:i_2;\ \ldots\ N:i_N\rangle &\equiv |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \ldots \otimes |i_N\rangle \\ V_{(i)} &\equiv 1 \otimes \ldots \otimes 1 \otimes V \otimes 1 \otimes \ldots \otimes 1 \end{aligned}$$

L'opération de commutation est notée $[,]$ et l'opération d'anticommutation $\{,\}$ ($\{A,B\} = AB + BA$).

Les états physiques sont donnés par

$$|i_1, i_2, \ldots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\,\mathcal{A}\,|1:i_1;\ 2:i_2;\ \ldots\ N:i_N\rangle$$

où $\mathcal{A}$ est l'opérateur d'antisymétrisation et avec la convention $i_1 < \ldots < i_N$.

$|0\rangle$ désigne l'état du vide et n_i le nombre de fermions dans l'état i.

I. Opérateurs de création et d'annihilation

On définit l'opérateur de création par

$$c_i^\dagger\,|i_1, \ldots, i_N\rangle = (-1)^{\left(\sum_{l<i} n_l\right)}\ \sqrt{1-n_i}\ |i_1, \ldots, i, \ldots, i_N\rangle$$

1) Il est usuel de dire que l'opérateur de création $c_i^\dagger$ ajoute une particule dans l'état i. En quoi cette appellation est-elle erronée?

2) Soit $|\Phi\rangle = |i_1, i_2, \ldots, i_N\rangle$. Evaluez $c_i^\dagger c_j^\dagger\,|\Phi\rangle$ puis $c_j^\dagger c_i^\dagger\,|\Phi\rangle$. En déduire que

$$\left\{c_i^\dagger, c_j^\dagger\right\} = 0$$

3) On note c_i le conjugué hermitique de $c_i^\dagger$. Evaluez les éléments de matrice de cet opérateur. Justifiez le nom d'opérateur d'annihilation. Que vaut $c_i\,|0\rangle$?

4) Calculez $\{c_i, c_j\}$. Démontrez que $\left\{c_i^\dagger, c_j\right\} = \delta_{i,j}$.

5) Quelle est l'action de l'opérateur $\hat{n}_i = c_i^\dagger c_i$? En déduire une méthode pour construire *à la main* l'hamiltonien du système sans interaction à l'aide des opérateurs de création et d'annihilation.

II. Système de deux fermions identiques

Soit un système de deux fermions identiques.

1) Décrivez l'espace de Hilbert (noté $\mathcal{F}_2$) des états physiques de ce système directement à l'aide du postulat de symétrisation puis des opérateurs de création.

2) Soit l'opérateur V agissant dans l'espace à un fermion. On construit le nouvel opérateur $\hat{V} = V_{(1)} + V_{(2)}$.

   a) Développez l'élément de matrice $\left\langle i', j' \left| \hat{V} \right| i, j \right\rangle$.

   b) Evaluez la quantité $\left\langle i', j' \left| c_k^\dagger c_l \right| i, j \right\rangle$.

   c) En déduire que $\hat{V}$ peut s'écrire sous la forme

$$\hat{V} = \sum_{ij} V_{ij} c_i^\dagger c_j$$

   avec $V_{ij} = \langle i \left| V \right| j \rangle$.

3) On définit les opérateurs champs par

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_i \phi_i(\vec{r})\ c_i \quad \text{et} \quad \Psi^\dagger(\vec{r}) = \sum_i \phi_i^*(\vec{r})\ c_i^\dagger$$

avec $\phi_i(\vec{r}) = \langle \vec{r} | i \rangle$

   a) Montrez qu'il est possible de réécrire l'opérateur $\hat{V}$ de la question 2 sous la forme

$$\hat{V} = \int d^3\vec{r}\ \Psi^\dagger(\vec{r})\, V(\vec{r})\, \Psi(\vec{r})$$

   b) Montrez que $\Psi^\dagger(\vec{r})\,\Psi(\vec{r})$ représente l'opérateur densité de particules $\rho(\vec{r})$ au point $\vec{r}$ (on se limitera au calcul des éléments diagonaux).

   c) Donnez l'équivalent classique de l'opérateur densité de particules.

   d) Soit l'énergie d'interaction $U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = U(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$. Exprimez cette énergie à l'aide de l'opérateur densité de particules classique. En déduire à l'aide de la question 3)b), qu'à un terme additionel près, l'équivalent quantique de U peut s'écrire

$$\begin{aligned}\hat{U} &= \frac{1}{2}\int\int d^3\vec{r} d^3\vec{r}'\ \ \Psi^\dagger(\vec{r})\,\Psi^\dagger(\vec{r}')\,U(\vec{r}-\vec{r}')\,\Psi(\vec{r})\,\Psi(\vec{r}') \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} \langle 1:i;2;j \left| U \right| 1:k;2:l\rangle\ \ c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k\end{aligned}$$

   On justifiera le fait que le terme additionel n'est pas présent dans la dérivation directe de $\hat{U}$.

III. Généralisation

On considère cette fois un système de N fermions. On reprend l'opérateur V de la question II.2. La généralisation de $\hat{V}$ s'écrit

$$\hat{V} = \sum_n V_{(n)}$$

Vérifiez que la formule obtenue à la question II.2.c reste valable. On pourra effectuer une vérification explicite pour le cas $N = 3$. Même question pour l'opérateur d'interaction.

IV. Système d'électrons avec interaction coulombienne

On choisit pour base complète orthonormée la base des ondes planes $\phi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}$ où Ω est le volume de l'espace considéré,

1) Prouvez les relations suivantes

a)

$$\rho(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}} c^{\dagger}_{\vec{k}+\vec{q}} c_{\vec{k}} \quad \text{avec} \quad \rho(\vec{q}) = \int d^3\vec{r}\, \rho(\vec{r})\, e^{i\vec{q}.\vec{r}}$$

b)

$$H = \sum_i \frac{P^2_{(i)}}{2m} \quad \longrightarrow \quad \hat{H} = \sum_k \epsilon_k c^{\dagger}_k c_k$$

c)

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad \longrightarrow \quad \hat{V} = \frac{1}{2\Omega} \sum_{q \neq 0, k, k'} \frac{4\pi e^2}{q^2} c^{\dagger}_{k+q} c^{\dagger}_{k'-q} c_{k'} c_k$$

On donne

$$\int d^3\vec{r} \frac{1}{|\vec{r}|} e^{i\vec{q}.\vec{r}} = \frac{4\pi}{|\vec{q}|^2}$$

2) A partir des résultats précédents, écrivez l'hamiltonien d'un système d'électrons en interaction coulombienne.

V. Chaîne de spins XY : transformation de Jordan-Wigner

On considère une chaîne unidimensionnelle de Heisenberg de N spins 1/2 avec des conditions périodiques aux bords et définie par l'Hamiltonien suivant

$$H = \frac{J_{\perp}}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \left(S^+_i S^-_{i+1} + S^-_i S^+_{i+1} \right)$$

avec $S^+ = S_x + iS_y$ et $S^- = S_x - iS_y$.

1) Nous nous intéressons tout d'abord au problème d'un seul spin. Notons $|\downarrow\rangle$ et $|\uparrow\rangle$ les deux états de spin possibles. Ce système peut être décrit à l'aide d'un système de fermions à un état en identifiant les deux états de spin de la façon suivante

$$|0\rangle \equiv |\downarrow\rangle \quad \text{et} \quad |1\rangle \equiv |\uparrow\rangle$$

On note c (resp. $c^\dagger$) l'opérateur d'annihilation (resp. de création) pour le système de fermions. Montrez que les opérateurs

$$S^+ = c^\dagger \quad S^- = c \quad S_z = c^\dagger c - \frac{1}{2}$$

satisfont bien les relations de commutation de l'opérateur de spin.

2) On se replace dans le contexte de la chaîne de spin. A chaque spin, on associe un état fermionique qui peut être soit occupé (spin $|\uparrow\rangle$) soit libre (spin $|\downarrow\rangle$). Vérifiez que la représentation définie à la question précédente n'est pas valable lorqu'il s'agit de considérer deux spins distincts. On montrera par exemple que

$$\left[\vec{S}_n, \vec{S}_{n+1}\right] \neq 0$$

3) Pour contourner cette difficulté, on utilise une autre représentation des opérateurs de spin

$$S_i^+ = e^{i\pi \sum_{j<i} n_j} c_i^\dagger \quad S_i^- = e^{-i\pi \sum_{j<i} n_j} c_i \quad S_{z,i} = c_i^\dagger c_i - \frac{1}{2}$$

où n_j désigne l'occupation du j-ème état. Cette transformation est appelée la transformation de Jordan-Wigner. Montrez que les différentes relations de commutation des opérateurs de spin sont vérifiées.

4) Démontrez que l'hamiltonien peut s'écrire

$$H = \frac{J_\perp}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \left(c_{i+1}^\dagger c_i - c_i^\dagger c_{i+1} \right)$$

5) Remarquez que l'hamiltonien est invariant par translation. En déduire que le spectre d'énergie du système peut s'écrire

$$E = J_\perp N \cos\left(2\pi \frac{k}{N}\right)$$

où k est un entier.