

Deuxième quantification et modèle de Hubbard :

Solutions aux exercices

Marc Chamberland
Département de physique
Université de Sherbrooke

4 juillet 2006

Résumé

Voici mes solutions personnelles aux exercices proposés par le professeur David Sénéchal dans son excellent document Introduction à la deuxième quantification et au modèle de Hubbard. Veuillez noter que mes solutions peuvent être erronées et je vous serai gré de bien vouloir me pardonner ces erreurs.

1 Exercice 1

1.1 Énoncé

Supposons que $N = 2$. Construire une représentation matricielle explicite, dans l'espace de Hilbert global de dimension $2^2 = 4$, des opérateurs suivants : c_1, c_2, n_1, n_2 .

1.2 Solution

Plusieurs solutions différentes sont possibles. En voici un exemple.

Puisque $N = 2$, on a quatre états possibles, ce qui forme la base suivante :

$$\{|0, 0\rangle, |1, 0\rangle, |0, 1\rangle, |1, 1\rangle\}$$

Chacun de ces états peut alors être représenté sous forme matricielle :

$$|0, 0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |1, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |0, 1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1, 1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Il suffit maintenant de trouver une matrice c_1 4×4 qui satisfait les relations suivantes :

$$\begin{aligned}c_1 |1, 0\rangle &= |0, 0\rangle \\c_1 |1, 1\rangle &= |0, 1\rangle\end{aligned}$$

On peut vérifier que la matrice suivante satisfait ces relations :

$$c_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

On peut procéder de la même façon pour trouver son conjugué hermitique, l'opérateur de création c_1^\dagger . On trouve qu'il ne s'agit que de la transposée de la matrice c_1 . L'opérateur n_1 n'est alors que :

$$n_1 = c_1^\dagger c_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

On peut facilement vérifier que cet opérateur retourne 1 lorsqu'il est appliqué sur un état où le premier site est occupé.

Le cas de c_2 présente une particularité. Effectivement, le principe d'exclusion de Pauli exige que la permutation de deux électrons entraînent l'antisymétrie de l'état. Illustrons ce principe en partant de l'état $|1, 1\rangle$. On veut échanger la position des électrons. On commence donc par libérer l'état 1 :

$$c_1 |1, 1\rangle = |0, 1\rangle$$

On apporte l'électron du site 2 vers le site 1 :

$$\begin{aligned}c_2 |0, 1\rangle &= |0, 0\rangle \\c_1^\dagger |0, 0\rangle &= |1, 0\rangle\end{aligned}$$

Puis on place l'électron détruit à la première étape sur le site 2 et on exige que le résultat diffère d'un signe négatif de l'état original :

$$c_2^\dagger |1, 0\rangle = -|1, 1\rangle \rightsquigarrow c_2 |1, 1\rangle = -|1, 0\rangle$$

où on a écrit le conjugué hermitique de l'expression de gauche. Ainsi, l'opérateur c_2 doit satisfaire les relations suivantes :

$$\begin{aligned}c_2 |1, 1\rangle &= -|1, 0\rangle \\c_2 |0, 1\rangle &= |0, 0\rangle\end{aligned}$$

De la même façon, on trouve :

$$c_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$n_2 = c_2^\dagger c_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

2 Exercice 2

2.1 Énoncé

Supposons que $N = 2$ et considérons un état général à un électron $|\psi\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle$, où $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Quelle est la probabilité que l'électron soit sur l'ion no 1 (le site no 1) ? Quelles sont les valeurs moyennes de n_1 et de n_2 ?

2.2 Solution

On projette l'état $|\psi\rangle$ dans l'état particulier qui nous intéresse :

$$\begin{aligned} \langle 1 | \psi \rangle &= \alpha \langle 1 | 1 \rangle + \beta \langle 1 | 2 \rangle \\ &= \alpha (1) + \beta (0) \\ &= \alpha \end{aligned}$$

où on a utilisé l'orthonormalité des états $|1\rangle$ et $|2\rangle$. La probabilité qu'un électron soit sur le site 1 n'est que le carré de la norme de $\langle 1 | \psi \rangle$, c'est-à-dire $|\alpha|^2$.

La moyenne de l'opérateur n_1 se calcule aisément en se souvenant qu'il retourne 0 lorsqu'il agit sur l'état $|2\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle n_1 \rangle &= \langle \psi | n_1 | \psi \rangle = (\alpha^* \langle 1 | + \beta^* \langle 2 |) n_1 (\alpha | 1 \rangle + \beta | 2 \rangle) \\ &= \alpha^* \alpha \langle 1 | n_1 | 1 \rangle \\ &= |\alpha|^2 \end{aligned}$$

La démarche est la même dans le cas de n_2 et on trouve $|\beta|^2$.

3 Exercice 3

3.1 Énoncé

Vérifier cette assertion.

3.2 Solution

Je ne vois pas ce que l'on veut que l'on fasse ici.

4 Exercice 4

4.1 Énoncé

Considérer un modèle à $N = 4$ sites et comportant $M = 3$ électrons, avec $t = 0$ (seul V compte). Trouver les deux niveaux d'énergie les plus bas avec les états correspondants. Combien y en a-t-il pour chacun des deux niveaux ?

4.2 Solution

D'abord, on peut écrire les états du système sous la forme suivante :

$$| 1 \ 0 \ 0 \ 1 \rangle_{\uparrow} | 0 \ 1 \ 0 \ 0 \rangle_{\downarrow}$$

où le premier élément représente les électrons de spin up sur chacun des sites (la première position représente le site 1 ; la deuxième, le site 2 ; etc.) et le deuxième élément, les électrons de spin down.

On veut l'état fondamental, c'est-à-dire le niveau d'énergie le plus bas. Ainsi, puisque chaque paire d'électrons placés sur un même site contribue une énergie U , il faut éviter de mettre deux électrons sur le même site. Selon les conditions imposées dans l'énoncé du problème, on voit que l'état fondamental a une énergie $E = 0$ et correspond à tous les états où les trois électrons sont placés sur trois sites différents. En voici quelques-uns :

$$\begin{aligned} & | 1 \ 1 \ 1 \ 0 \rangle_{\uparrow} | 0 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle_{\downarrow} \\ & | 1 \ 1 \ 0 \ 0 \rangle_{\uparrow} | 0 \ 0 \ 1 \ 0 \rangle_{\downarrow} \\ & | 1 \ 0 \ 0 \ 1 \rangle_{\uparrow} | 0 \ 1 \ 0 \ 0 \rangle_{\downarrow} \\ & | 1 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle_{\uparrow} | 0 \ 1 \ 1 \ 0 \rangle_{\downarrow} \end{aligned}$$

et ainsi de suite. J'en ai dénombré 24.

De la même façon, le deuxième niveau le plus bas a une énergie $E = U$ et correspond à tous les états où un seul site est occupé par deux électrons de spins opposés. Par exemple :

$$\begin{aligned} & | 1 \ 1 \ 0 \ 0 \rangle_{\uparrow} | 1 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle_{\downarrow} \\ & | 1 \ 0 \ 1 \ 0 \rangle_{\uparrow} | 0 \ 0 \ 1 \ 0 \rangle_{\downarrow} \\ & | 1 \ 0 \ 0 \ 1 \rangle_{\uparrow} | 0 \ 0 \ 0 \ 1 \rangle_{\downarrow} \end{aligned}$$

J'en ai encore dénombré 24.

5 Exercice 5

5.1 Énoncé

Démontrer la relation (3) et ensuite que les deux équations de (2) sont compatibles.

5.2 Solution

Pour le cas où r est un multiple α entier quelconque de N , on a la somme suivante :

$$e^0 + e^{i2\pi\alpha} + e^{i4\pi\alpha} + \dots + e^{i(N-1)2\pi\alpha}$$

Cette somme contient N termes et chacun de ces derniers sont égaux à 1. Donc, $\sum_k e^{ikr} = N$ pour $r \in N\mathbb{Z}$.

Dans le cas contraire, la solution m'échappe, mais est reliée à la série géométrique...

Pour prouver que les deux équations sont compatibles, il ne suffit que de substituer l'une dans l'autre. Ainsi, on a :

$$c_{r\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r e^{ikr} \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikr'} c_{r\sigma} \right]$$

où r' est un indice de site *fixe*.

$$\begin{aligned} c_{r\sigma} &= \frac{1}{N} \sum_r \sum_k e^{ik(r-r')} c_{r\sigma} \\ &= \sum_r \delta_{r,r'} c_{r\sigma} \\ &= c_{r\sigma} \end{aligned}$$

Ici, on a utilisé le fait que $\frac{1}{N} \sum_k e^{ik(r-r')} = \delta_{r,r'}$. En effet, r et r' sont des indices de site qui vont de 1 à N . Leur différence n'est donc jamais un multiple entier de N (donc la somme vaut 0) sauf dans le cas où $r = r'$, alors on a une somme de N termes dont chacun de ces derniers valent 1.

6 Exercice 6

6.1 Énoncé

Démontrer que les opérateurs $\tilde{c}_\sigma(k)$ et $\tilde{c}_\sigma^\dagger(k)$ satisfont aux relations d'anti-commutation suivantes :

$$\begin{aligned} \{\tilde{c}_\sigma(k), \tilde{c}_{\sigma'}(k')\} &= 0 \\ \{\tilde{c}_\sigma(k), \tilde{c}_{\sigma'}^\dagger(k')\} &= \delta_{r,r'} \delta_{k,k'} \end{aligned}$$

6.2 Solution

Cet exercice est plutôt direct :

$$\begin{aligned}
 \{\tilde{c}_\sigma(k), \tilde{c}_{\sigma'}(k')\} &= \left\{ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r e^{-ikr} c_{r\sigma}, \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{r'} e^{-ik'r'} c_{r'\sigma'} \right\} \\
 &= \frac{1}{N} \sum_r \sum_{r'} e^{-ikr} e^{-ik'r'} \underbrace{\{c_{r\sigma}, c_{r'\sigma'}\}}_0 \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

Avant de procéder à la deuxième relation, il est important de noter que si les opérateurs d'annihilation ont la forme écrite en (2), alors les opérateurs de création ont la forme suivante :

$$\begin{aligned}
 \tilde{c}_\sigma^\dagger(k) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r e^{ikr} c_{r\sigma}^\dagger \\
 c_{r\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikr} \tilde{c}_\sigma^\dagger(k)
 \end{aligned}$$

où on remarque que le signe de l'exponentielle est opposé à celui de l'opérateur d'annihilation correspondant. On peut maintenant procéder comme suit :

$$\begin{aligned}
 \{\tilde{c}_\sigma(k), \tilde{c}_{\sigma'}^\dagger(k')\} &= \left\{ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r e^{-ikr} c_{r\sigma}, \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{r'} e^{ik'r'} c_{r'\sigma'}^\dagger \right\} \\
 &= \frac{1}{N} \sum_r \sum_{r'} e^{-ikr} e^{ik'r'} \{c_{r\sigma}, c_{r'\sigma'}^\dagger\} \\
 &= \frac{1}{N} \sum_r \sum_{r'} e^{-ikr} e^{ik'r'} \delta_{r,r'} \delta_{\sigma,\sigma'} \\
 &= \frac{1}{N} \sum_r e^{ir(k'-k)} \delta_{\sigma,\sigma'} \\
 &= \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'}
 \end{aligned}$$

7 Exercice 7

7.1 Énoncé

Démontrer que l'opérateur K s'exprime comme suit en fonction des opérateurs $\tilde{c}_\sigma(k)$ et $\tilde{c}_\sigma^\dagger(k)$:

$$K = -2t \sum_{k,\sigma} \cos(k) n_\sigma(k)$$

où $n_\sigma(k) \equiv \tilde{c}_\sigma^\dagger(k) \tilde{c}_\sigma(k)$.

7.2 Solution

Cet exercice est également très direct :

$$\begin{aligned}
 K &= -t \sum_{\langle r, r' \rangle, \sigma} \left(c_{r\sigma}^\dagger c_{r'\sigma} + c_{r'\sigma}^\dagger c_{r\sigma} \right) \\
 &= -t \sum_{\langle r, r' \rangle, \sigma} \left(\frac{1}{N} \sum_k e^{-ikr} \tilde{c}_\sigma^\dagger(k) \sum_k e^{ikr'} \tilde{c}_\sigma(k) + \frac{1}{N} \sum_k e^{-ikr'} \tilde{c}_\sigma^\dagger(k) \sum_k e^{ikr} \tilde{c}_\sigma(k) \right) \\
 &= -\frac{t}{N} \sum_{\langle r, r' \rangle, \sigma} \sum_k \left(e^{-ikr} e^{ikr'} \tilde{c}_\sigma^\dagger(k) \tilde{c}_\sigma(k) + e^{-ikr'} e^{ikr} \tilde{c}_\sigma^\dagger(k) \tilde{c}_\sigma(k) \right) \\
 &= -\frac{t}{N} \sum_{\langle r, r' \rangle, \sigma} \sum_k \left(e^{ik(r'-r)} + e^{ik(r-r')} \right) n_\sigma(k)
 \end{aligned}$$

Puisque la somme en r ne se fait que sur les voisins immédiats, la différence entre r et r' est toujours égale à 1. De plus, puisque nous sommes en 1 dimension, il n'y a que N paires de telle sorte. Ainsi, on obtient :

$$\begin{aligned}
 K &= -t \sum_{k, \sigma} (e^{ik} + e^{-ik}) n_\sigma(k) \\
 &= -2t \sum_{k, \sigma} \cos(k) n_\sigma(k)
 \end{aligned}$$

8 Exercice 8

8.1 Énoncé

Démontrer que les opérateurs de nombre $n_\sigma(k)$ associés à des spins ou des nombres d'ondes différents commutent.

8.2 Solution

Il faut montrer que :

$$[n_\sigma(k), n_{\sigma'}(k')] = 0$$

Cela se démontre aisément en utilisant la propriété d'antisymétrie des fermions, c'est-à-dire chaque fois qu'on échange deux opérateurs de création-annihilation qui font intervenir des sites, des spins ou des nombres d'ondes différents, on doit changer le signe de l'expression :

$$\begin{aligned}
[n_\sigma(k), n_{\sigma'}(k')] &= n_\sigma(k) n_{\sigma'}(k') - n_{\sigma'}(k') n_\sigma(k) \\
&= \tilde{c}_\sigma^\dagger(k) \tilde{c}_\sigma(k) \tilde{c}_{\sigma'}^\dagger(k') \tilde{c}_{\sigma'}(k') - n_{\sigma'}(k') n_\sigma(k) \\
&= -\tilde{c}_\sigma^\dagger(k) \tilde{c}_{\sigma'}^\dagger(k') \tilde{c}_\sigma(k) \tilde{c}_{\sigma'}(k') - n_{\sigma'}(k') n_\sigma(k) \\
&= -\tilde{c}_{\sigma'}^\dagger(k') \tilde{c}_\sigma^\dagger(k) \tilde{c}_{\sigma'}(k') \tilde{c}_\sigma(k) - n_{\sigma'}(k') n_\sigma(k) \\
&= \tilde{c}_{\sigma'}^\dagger(k') \tilde{c}_{\sigma'}(k') \tilde{c}_\sigma^\dagger(k) \tilde{c}_\sigma(k) - n_{\sigma'}(k') n_\sigma(k) \\
&= n_{\sigma'}(k') n_\sigma(k) - n_{\sigma'}(k') n_\sigma(k) \\
&= 0
\end{aligned}$$

9 Exercice 9

9.1 Énoncé

Quel est l'état fondamental d'un système de N électrons installés sur un anneau de N sites ? On est à demi-remplissage, car la moitié du nombre maximum d'électrons ($2N$) est présente.

9.2 Solution

Contrairement au cas $t = 0$ où on devait éviter de placer deux électrons sur le même site, pour minimiser le terme de saut K , il faut remplir les sites afin de donner le moins d'espace possible aux électrons pour sauter. À cet égard, il suffit de remplir les sites un à un jusqu'à ce qu'on manque d'électrons :

$$| 1 \ 1 \ \dots \ 1 \ 0 \ 0 \ \dots \ 0 \rangle_\uparrow | 1 \ 1 \ \dots \ 1 \ 0 \ 0 \ \dots \ 0 \rangle_\downarrow$$

Le premier site vide qui apparaît est donc le site $k = \left(\frac{N}{2}\right) \frac{2\pi}{N} = \pi$.

10 Exercice 10

10.1 Énoncé

Quelle est la probabilité de trouver deux électrons sur un même site dans l'état fondamental trouvé ci-dessus ? Il s'agit de calculer la valeur moyenne de l'opérateur $n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$, i étant un site quelconque.

10.2 Solution

Comme on l'a vu à l'exercice précédent, l'état fondamental contient exactement $\frac{N}{2}$ électrons de spin up et $\frac{N}{2}$ électrons de spin down. Ainsi, la probabilité de trouver un électron de spin up sur un site est tout simplement $\frac{1}{2}$. De même, la probabilité de trouver un électron de spin down est $\frac{1}{2}$. Donc, la probabilité

de trouver un électron de spin up ET un électron de spin down sur un site est tout simplement le produit de ces deux probabilités, soit $\frac{1}{4}$.

11 Exercice 11

11.1 Énoncé

Diagonaliser l'opérateur K sur un réseau carré maintenant, et démontrer que l'énergie associée à un électron de vecteur d'onde \mathbf{k} est

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y))$$

On suppose encore une fois que les électrons ne peuvent sauter que d'un site vers ses voisins immédiats.

11.2 Solution

On peut écrire les opérateurs sous la forme vectorielle suivante :

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{R}_i, \sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \tilde{c}_{\sigma}(\mathbf{k}) \\ c_{\mathbf{R}_i, \sigma}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \tilde{c}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

Comme à l'exercice 7, on a ensuite :

$$\begin{aligned} K &= -t \sum_{\langle \mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j \rangle, \sigma} \left(c_{\mathbf{R}_i, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{R}_j, \sigma} + c_{\mathbf{R}_j, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{R}_i, \sigma} \right) \\ &= -\frac{t}{N} \sum_{\langle \mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j \rangle, \sigma} \sum_{\mathbf{k}} \left(e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} \right) n_{\sigma}(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

Ici, on doit remarquer que le terme $\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) = k_x$ ou k_y selon l'axe sur lequel se trouvent les sites considérés. Puisqu'il y a N paires sur chacun des deux axes, on obtient :

$$\begin{aligned} K &= -t \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(e^{ik_x} + e^{ik_y} + e^{-ik_x} + e^{-ik_y} \right) n_{\sigma}(\mathbf{k}) \\ &= -2t \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(\cos(k_x) + \cos(k_y) \right) n_{\sigma}(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

d'où

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y))$$