

Bosonisation en Dimension 1 :

Première Partie : Seconde Quantification

(TD de Théorie des champs quantiques, Master ENS Lyon 2ème année)

D. Carpentier

Le but de ce TD est de rappeler le formalisme de seconde quantification, et de montrer son utilité dans la description des systèmes électroniques unidimensionnels. Cette première partie est aussi l'occasion de découvrir la notion de bosonisation des fermions en dimension 1. La seconde partie s'intéressera à ce modèle de fermions unidimensionnels par l'intégrale de chemin fonctionnelle, après avoir rappelé les bases de ce formalisme.

I. SECONDE QUANTIFICATION ET PROBLÈME À N CORPS

On considère un problème à une particule, dont les états appartiennent à un espace de Hilbert \mathcal{H} . On notera $\{|\lambda\rangle\}_\lambda$ une base de \mathcal{H} . Une collection de N telles particules identiques sera décrite par des états qui appartiennent à l'espace de Fock $\mathcal{F} = \bigoplus_{N=0}^{+\infty} \mathcal{H}^{\otimes N}$ (symétrisés !). Ces états sont avantageusement paramétrés par les nombres n_λ de particules dans l'état λ :

$$|\Psi_N\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots} c_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle. \quad (1)$$

Les nombres d'occupation n_λ vérifient $\sum_\lambda n_\lambda = N$, et pour des fermions ils sont restreints aux valeurs 0 ou 1.

Dans le formalisme dit de "seconde quantification", on introduit les opérateurs de création a_λ^\dagger qui vérifient

$$a_\lambda^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_\lambda, \dots\rangle = \sqrt{n_\lambda + 1} |n_1, n_2, \dots, n_\lambda + 1, \dots\rangle \text{ pour des bosons} \quad (2)$$

$$a_\lambda^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_\lambda, \dots\rangle = \delta_{n_\lambda, 0} \sqrt{n_\lambda + 1} (-1)^{\sum_{i=1}^{\lambda-1} n_i} |n_1, n_2, \dots, n_\lambda + 1, \dots\rangle \text{ pour des fermions} \quad (3)$$

1. Montrer que les états à N particules s'expriment selon

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_\lambda \frac{1}{\sqrt{n_\lambda!}} (a_\lambda^\dagger)^{n_\lambda} |0\rangle \quad (4)$$

où $|0\rangle$ est l'état "vide" de la théorie (c'est-à-dire l'état de l'espace de Fock sans particule).

2. Dédire de leur définition que les opérateurs de création dans deux états différents λ et μ vérifient les relations

$$[a_\lambda^\dagger, a_\mu^\dagger]_\eta = 0 \quad (5)$$

avec $\eta = +1$ pour les bosons, et $\eta = -1$ pour les fermions, et $[A, B]_\eta = AB - \eta BA$.

On définit ensuite l'opérateur a_λ , adjoint de a_λ^\dagger .

3. Montrer que ces opérateurs d'annihilation vérifient la relation

$$a_\lambda |n_1, n_2, \dots, n_\lambda, \dots\rangle = \sqrt{n_\lambda} |n_1, n_2, \dots, n_\lambda - 1, \dots\rangle \text{ pour des bosons} \quad (6)$$

$$a_\lambda |n_1, n_2, \dots, n_\lambda, \dots\rangle = \delta_{n_\lambda, 1} \sqrt{n_\lambda} (-1)^{\sum_{i=1}^{\lambda-1} n_i} |n_1, n_2, \dots, n_\lambda - 1, \dots\rangle \text{ pour des fermions} \quad (7)$$

4. Montrer que $[a_\lambda, a_\mu^\dagger]_\eta = \delta_{\lambda\mu}$.

Il nous reste maintenant à exprimer en terme de ces $a_\lambda, a_\lambda^\dagger$ un opérateur quelconque agissant dans l'espace de Fock. Nous considérerons uniquement les opérateurs à 1 et 2 corps.

5. On considère un opérateur à un corps \mathcal{O}_1 , diagonal dans une base $\{\tilde{\lambda}\}$. Trouver une expression simple de \mathcal{O}_1 en fonction des nombres d'occupation $n_{\tilde{\lambda}} = a_{\tilde{\lambda}}^\dagger a_{\tilde{\lambda}}$. En déduire l'expression de \mathcal{O}_1 en fonction des opérateurs de création et d'annihilation dans une base quelconque.

6. Finalement, nous nous intéressons maintenant à un opérateur à deux corps \mathcal{O}_2 (tel qu'un potentiel d'interaction). Montrer que

$$\mathcal{O}_2 = \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \mu_1, \mu_2} \langle \mu_1, \mu_2 | \mathcal{O}_2 | \lambda_1, \lambda_2 \rangle a_{\mu_1}^\dagger a_{\mu_2}^\dagger a_{\lambda_1} a_{\lambda_2}. \quad (8)$$

II. CONDUCTEUR ÉLECTRONIQUE UNIDIMENSIONNEL

On se propose maintenant de mettre en oeuvre ce formalisme dans l'étude de conducteur électronique unidimensionnel. Au delà de son intérêt académique, le modèle de fermions unidimensionnels s'applique à différents systèmes physiques, tel que les nanotubes de Carbone, les fils quantiques fabriqués aux interfaces entre semi-conducteurs, ou encore certains composés organiques composés de molécules allongées parallèles les unes aux autres. Dans tous ces cas, les électrons de conduction sont piégés soit dans les deux directions y et z dans le cas des fils quantiques, soit dans la direction radiale dans le cas des nanotubes ou d'autres molécules. A suffisamment basse énergie, on peut ne considérer que l'état fondamental des électrons dans le piège transverse. Les seuls degrés de liberté qui demeurent correspondent à la propagation unidimensionnelle de cet état fondamental transverse : on parle de problème quasi-unidimensionnel. Ces états portant une charge e et un spin $1/2$ comme les électrons, il est commode de les décrire comme des électrons unidimensionnels. Par souci pédagogique, nous oublierons dans la suite le spin de l'électron¹, et décrirons le problème comme celui d'un ensemble de fermions chargés en interaction le long d'une chaîne.

D'après la partie précédente, le problème considéré est décrit par le hamiltonien de seconde quantification ($\hbar = 1$) :

$$H = \int dx a^\dagger(x) \left(\frac{p^2}{2m} \right) a(x) + \frac{1}{2} \int dx dx' V_{ee}(x-x') a^\dagger(x) a^\dagger(x') a(x') a(x), \quad (9)$$

soit, en transformée de Fourier, et en redéfinissant l'origine des énergies à l'énergie de Fermi E_F :

$$H = \sum_k a_k^\dagger \left(\frac{k^2}{2m} - E_F \right) a_k + \frac{1}{2L} \sum_{k, k', q \neq 0} V_{ee}(q) a_{k-q}^\dagger a_{k'+q}^\dagger a_{k'} a_k. \quad (10)$$

Commençons par considérer les électrons sans interaction. Les états à une particule sont simplement indexés par le moment k de la particule, et les énergies correspondantes sont $\epsilon_k = k^2/(2m)$. L'état fondamental d'un gaz de fermions est obtenu directement en remplissant l'espace de ces états accessibles jusqu'à l'énergie de Fermi. Celle-ci est directement reliée au nombre de fermions présents : en 1 dimension, on a simplement $N = 2k_F/(2\pi/L)$. Devant un très grand nombre de fermions (ce qui est évidemment notre cas), correspondant à une grande énergie de Fermi, il est raisonnable de considérer que les autres énergies en jeu (thermique, induite par un potentiel, etc) seront faibles devant E_F . Nous ne considérerons donc que des états électroniques d'énergie proche de E_F : dans ce régime, il est légitime de linéariser la loi de dispersion des fermions.

1. Montrer que la partie cinétique du hamiltonien ci-dessus devient alors

$$H_0 \simeq -v_F \sum_q a_{Rq}^\dagger q a_{Rq} + v_F \sum_q a_{Lq}^\dagger q a_{Lq} \quad (11)$$

où nous notons $a_{Rq} = a_{+k_F+q}$ et $a_{Lq} = a_{-k_F+q}$.

Nous cherchons maintenant à identifier les excitations de basse énergie de ce gaz électronique, ci-possible en incluant les effets des interactions. Pour cela, nous allons nous intéresser aux opérateurs

$$\rho_{R,q} = \sum_k a_{R,k+q}^\dagger a_{R,k} \text{ et } \rho_{L,q} = \sum_k a_{L,k+q}^\dagger a_{L,k}. \quad (12)$$

¹ Pour les curieux, précisons que cet oubli est loin d'être anodin en dimension 1. En effet, l'importance accrue des interactions en dimension 1 conduit au phénomène remarquable de *séparation spin-charge* : un électron injecté dans le fil quantique se décompose en plusieurs excitations collectives distinctes. L'un porte le spin de l'électron, et les autres sa charge. De plus, ces excitations collectives se propagent à des vitesses différentes les unes des autres.

2. Relier ces opérateurs à la transformée de Fourier de l'opérateur de densité locale $\rho(x)$.
3. *Question facultative* : Montrer que la partie d'interaction du hamiltonien (12) peut se mettre sous la forme

$$V = \frac{1}{2L} \sum_{\alpha=R/L, q} (g_4 \rho_{\alpha, q} \rho_{\alpha, -q} + g_2 \rho_{\alpha, q} \rho_{-\alpha, -q}), \quad (13)$$

avec la convention $-R = L$ pour α .

4. Montrer que le commutateur de ces opérateurs se met sous la forme

$$[\rho_{\alpha, q}, \rho_{\alpha', q'}] = \delta_{\alpha, \alpha'} \sum_k \left(a_{\alpha, k+q}^\dagger a_{\alpha, k-q'} - a_{\alpha, k+q+q'}^\dagger a_{\alpha, k} \right). \quad (14)$$

Nous faisons ici une approximation supplémentaire, reliée à la précédente : nous allons brutalement remplacer l'expression de ce commutateur par sa valeur dans le fondamental (états électroniques remplis jusqu'à E_F), noté par simplicité $|\tilde{0}\rangle$:

$$[\rho_{\alpha, q}, \rho_{\alpha', q'}] \simeq \delta_{\alpha, \alpha'} \sum_k \left\langle \tilde{0} \left| a_{\alpha, k+q}^\dagger a_{\alpha, k-q'} - a_{\alpha, k+q+q'}^\dagger a_{\alpha, k} \right| \tilde{0} \right\rangle \quad (15)$$

5. Montrer que le membre de droite de cette relation peut s'écrire sous la forme

$$[\rho_{\alpha, q}, \rho_{\alpha', q'}] = \delta_{\alpha, \alpha'} \delta_{q, -q'} \eta_\alpha \frac{qL}{2\pi}, \quad (16)$$

où $\eta_{R/L} = \pm 1$.

Indication : une étape intermédiaire utile sera d'exprimer ce commutateur sous la forme $\delta_{\alpha, \alpha'} \delta_{q, -q'} \sum_k \left\langle \tilde{0} \left| a_{\alpha, k+q}^\dagger a_{\alpha, k+q} - a_{\alpha, k}^\dagger a_{\alpha, k} \right| \tilde{0} \right\rangle$, et d'identifier les opérateurs $a_{\alpha, k}^\dagger a_{\alpha, k}$.

6. Nous avons quasiment obtenu le résultat escompté : la relation (17) s'apparente à une relation de commutation bosonique, à la dépendance en moment q près. Pour remédier à ce léger problème, nous définissons de nouveaux opérateurs (pour $q > 0$) :

$$b_q = \sqrt{\frac{2\pi}{Lq}} \rho_{L, q} \quad ; \quad b_q^\dagger = \sqrt{\frac{2\pi}{Lq}} \rho_{L, -q} \quad (17)$$

$$b_{-q} = \sqrt{\frac{2\pi}{Lq}} \rho_{R, q} \quad ; \quad b_{-q}^\dagger = \sqrt{\frac{2\pi}{Lq}} \rho_{R, q}. \quad (18)$$

Montrer qu'il s'agit bien d'opérateurs bosoniques.

7. Montrer que la partie d'interaction du hamiltonien s'exprime sous forme quadratique en terme de ces opérateurs bosoniques :

$$V = \frac{1}{2\pi} \sum_{q>0} q \begin{pmatrix} b_q & b_{-q}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_4 & g_2 \\ g_2 & g_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_q^\dagger \\ b_{-q} \end{pmatrix} \quad (19)$$

8. Le résultats précédent est déjà intéressant : nous avons réussi à transformer une interaction générale à 4 fermions en un terme quadratique (donc simple) à deux bosons. Mais il nous reste maintenant à considérer la partie cinétique des fermions, que nous avons oubliée en cours de route !

Montrer que la partie cinétique du hamiltonien (12) vérifie la relation de commutation

$$[H_0, \rho_{\alpha, q}] = \eta_\alpha q v_F \rho_{\alpha, q} \quad (20)$$

9. Montrer la relation suivante

$$[\tilde{H}_0, \rho_{\alpha, q}] = \eta_\alpha q v_F \rho_{\alpha, q} \quad \text{avec} \quad \tilde{H}_0 = \frac{2\pi v_F}{L} \sum_{\alpha=R/L, q>0} \rho_{\alpha, q} \rho_{\alpha, -q}. \quad (21)$$

Ce résultat nous montre que les deux opérateurs H_0 et \tilde{H}_0 vérifient les mêmes relations de commutation avec l'ensemble des opérateurs bosoniques b_q, b_q^\dagger : ils sont donc identiques². Les sceptiques pourront vérifier que les éléments de matrice de ces deux opérateurs dans les états $\rho_{\alpha,q}|\tilde{0}\rangle$ sont les mêmes.

Nous obtenons ainsi un hamiltonien qui est entièrement quadratique en terme des nouveaux opérateurs de création et d'annihilation :

$$H = \sum_{q>0} q \begin{pmatrix} b_q & b_{-q}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_F + \frac{g_4}{2\pi} & \frac{g_2}{2\pi} \\ \frac{g_2}{2\pi} & v_F + \frac{g_4}{2\pi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_q^\dagger \\ b_{-q} \end{pmatrix}. \quad (22)$$

La transformation précédente correspond au phénomène de bosonisation (en dimension 1) : un problème *a priori* complexe de fermions en interaction peut se réexprimer comme un problème simple de bosons "libres". De plus, nous avons identifié ces excitations de basse énergie du fil quantique : il s'agit, à un facteur près, des modes de fluctuations de densité du gaz de fermions.

Les questions suivantes sont subsidiaires.

10. Le hamiltonien (23) n'est pas complètement satisfaisant. En effet, il comporte des termes de la forme $b_{-q}^\dagger b_q^\dagger$ et $b_{-q} b_q$. Montrer que la présence de ces termes implique une non conservation du nombre de bosons b .
11. Pour remédier à ce problème, nous allons effectuer une transformation de Bogoliubov³. Pour cela, on considère les nouveaux opérateurs définis par

$$\begin{pmatrix} b_q^\dagger \\ b_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \theta & \sinh \theta \\ \sinh \theta & \cosh \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_q^\dagger \\ b_{-q} \end{pmatrix} \text{ avec } \tanh 2\theta = \frac{g_2}{2\pi v_F + g_4}. \quad (23)$$

Montrer que le hamiltonien s'écrit maintenant simplement

$$H = v_\rho \sum_q |q| b_q^\dagger b_q', \quad (24)$$

et que les opérateurs b_q' demeurent bosoniques.

² Ceci est encore une application du lemme de Schur...

³ Cette transformation apparaît dans différents contextes où le nombre de particules n'est pas conservé, par exemple la supraconductivité.