Exercice 1 *Opérateur de translation*

On considère un Hamiltonien avec un potentiel V périodique, de période a :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \; V(x+a) = V(x).$$

et un niveau d'énergie E dégénéré deux fois, de fonctions d'onde propres $u_1(x)$ et $u_2(x)$.

1. L'équation différentielle satisfaite par $u_i(x)$ est

$$\begin{aligned} & Hu_i(x) = Eu_i(x) \\ \Rightarrow \quad & \left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right) u_i(x) = Eu_i(x) \\ \Rightarrow \quad & \frac{\hbar^2}{2m} u_i''(x) = (V(x) - E)u_i(x) \end{aligned}$$

2. On veut montrer que $Hu_i(x+a) = Eu_i(x+a)$. On peut montrer que $u_i(x+a)$ vérifie la même équation différentielle qu'à la question 1, ou alors, s'en sortir de façon plus élégante, en remarquant que $[T, H] = 0$. Cette égalité provient du fait que les deux commutateurs $[T, p]$ et $[T, V]$ valent 0 : pour le premier, on sait que l'opérateur de translation s'exprime comme une fonction de p et pour le deuxiéme, on le déduit de la périodicité de $V(x)$. Cela nous donne directement le résultat recherché :

$$\begin{aligned} TH = HT \quad & \Rightarrow \quad THu_i(x) = HTu_i(x) \\ & \Rightarrow \quad TEu_i(x) = Hu_i(x+a) \\ & \Rightarrow \quad Eu_i(x+a) = Hu_i(x+a) \end{aligned}$$

3. Si $W(x)$ ne dépend pas de x, alors, sa dérivée doit être 0.

$$\begin{aligned} W'(x) &= u_1'(x)u_2'(x) + u_1(x)u_2''(x) - u_2'(x)u_1'(x) - u_2(x)u_1''(x) \\ &= u_1(x)u_2''(x) - u_2(x)u_1''(x) \\ &= u_1(x)\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)u_2(x) - u_2(x)\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)u_1(x) \\ &= 0 \end{aligned}$$

4. On vient de montrer que W ne dépend pas de x. On sait donc que $TW(x) = W(x+a) = W(x)$.

$$W(x+a) = u_1(x+a)u_2'(x+a) - u_2(x+a)u_1'(x+a)$$

On sait que les u_i sont fonctions propres de T, avec valeurs propres λ_i. Or, $T = exp(i\hat{p}a/\hbar)$. Donc $\frac{\partial}{\partial x}(Tu_i(x)) = T\frac{\partial}{\partial x}u_i(x) = Tu_i'(x)$ (on rappelle que $i/\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ est la représentation x de l'opérateur $\hat{p}$). Donc

$$\begin{aligned} W(x+a) &= \lambda_1\lambda_2(u_1(x)u_2'(x) - u_2(x)u_1'(x)) \\ &= \lambda_1\lambda_2 W(x) \end{aligned}$$

On en déduit que $\lambda_1\lambda_2 = 1$.

5. Par un argument physique, on peut déduire que $|\lambda_i| = 1$. En effet, $T^n u_i = \lambda_i^n u_i$. Si $|\lambda_i| > 1$, $u_i(x+na)$ va tendre vers l'infini lorsque n va tendre vers l'infini. Si $|\lambda_i| < 1$, $u_i(x+na)$ va tendre vers l'infini lorsque n va tendre vers $-\infty$. Dans les deux cas, on obtient des limites infinies non physiques.

6. On peut donc écrire $\lambda_1 = e^{iKa}$ et $\lambda_2 = e^{-iKa}$, avec $-\frac{\pi}{a} < K \leq \frac{\pi}{a}$.

7. On peut exprimer la fonction d'onde grâce au théorème de Bloch comme $u_i(x) = e^{iKx} v_i(x)$ avec v_i périodique de période a. On en déduit l'effet d'une translation de na sur u_1: $u_1(x+na) = e^{iK(x+na)} v_1(x+na) = e^{iKna} u_1(x)$ et $u_2(x+na) = e^{-iKna} u_2(x)$.

Exercice 2 *Systèmes ferromagnétiques*

Cet exercice qui peut apparaître comme un simple exercice de calcul, nous initie pourtant à une démarche générale pour étudier un modèle physique donné. En effet, connaissant l'hamiltonien, bien souvent le comportement du système sera dicté par les propriétés de l'état fondamental (lorsque l'on est à suffisamment basse température tout au moins) : la supraconductivité basse température, expliquée par la théorie BCS en est un exemple.

Une des propriétés importantes du fondamental est sa dégénérescence. En effet, un fondamental dégénéré peut conduire au phénomène de brisure spontanée de symétrie comme dans les systèmes ferromagnétiques que nous étudions ci-dessous.

1. D'après la série 1, les valeurs propres et vecteurs propres associés de l'opérateur $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ sont

$$\begin{aligned}
\lambda_1 = \frac{\hbar^2}{4} \quad &\Leftrightarrow \quad |\varphi_1\rangle \quad \equiv \quad |j_1 = 1, j_z = 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\
\lambda_2 = \frac{\hbar^2}{4} \quad &\Leftrightarrow \quad |\varphi_2\rangle \quad \equiv \quad |j_2 = 1, j_z = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \\
\lambda_3 = \frac{\hbar^2}{4} \quad &\Leftrightarrow \quad |\varphi_3\rangle \quad \equiv \quad |j_3 = 1, j_z = -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \\
\lambda_4 = \frac{-3\hbar^2}{4} \quad &\Leftrightarrow \quad |\varphi_4\rangle \quad \equiv \quad |j_4 = 0, j_z = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad .
\end{aligned}$$

Les états propres de $\hat{H}_{12}$ sont les mêmes que celles de $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ avec des valeurs propres multipliés par $-J$

$$\begin{aligned}
E_{1,2,3} &= -J\lambda_{1,2,3} = \frac{-J\hbar^2}{4} \\
E_4 &= -J\lambda_4 = \frac{3J\hbar^2}{4} \quad .
\end{aligned}$$

L'hamiltonien a donc un état fondamental d'énergie $E = \frac{-J\hbar^2}{4}$, trois fois dégénéré. Notez que cela est dû au choix $J > 0$ (modèle ferromagnétique). Le choix $J < 0$ (modèle antiferromagnétique) conduit à un état fondamental une fois dégénéré et à une physique très différente.

2. La dimension de l'espace de Hilbert pour H_{N} est 2^N.

   a. La raison pour laquelle on cherche à remplacer les opérateurs S_i^x et S_i^y par les opérateurs S_i^+ et S_i^- est que ces derniers permettent des calculs beaucoup plus aisés dans la base choisie. En effet, il faut se souvenir que pour l'opérateur S_i^+ par exemple, on a

$$\begin{aligned} S_i^+|m_1, m_2, \ldots \uparrow_i \ldots, m_N\rangle &= 0 \\ S_i^+|m_1, m_2, \ldots \downarrow_i \ldots, m_N\rangle &= \hbar|m_1, m_2, \ldots \uparrow_i \ldots, m_N\rangle \end{aligned}$$

   Par définition des opérateurs S_i^+ et S_i^-, nous avons

$$S_i^x = \frac{S_i^+ + S_i^-}{2} \quad \text{et} \quad S_i^y = \frac{S_i^+ - S_i^-}{2i} \quad .$$

   Par conséquent

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &= S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z \\ &= \left(\frac{S_i^+ + S_i^-}{2}\right)\left(\frac{S_j^+ + S_j^-}{2}\right) + \left(\frac{S_i^+ - S_i^-}{2i}\right)\left(\frac{S_j^+ - S_j^-}{2i}\right) + S_i^z S_j^z \\ &= \frac{1}{2}\left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+\right) + S_i^z S_j^z \quad . \end{aligned}$$

   On en déduit la nouvelle forme de l'hamiltonien

$$H_N = -J \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{1}{2}\left(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+\right) + S_i^z S_{i+1}^z\right] \quad .$$

   b. Pour montrer que $|F\rangle$ est un état propre de $H_N|F\rangle$, calculons $H_N|F\rangle$. Pour cela, commençons par $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}|F\rangle$.

$$\begin{aligned} S_i^+ S_{i+1}^-|\uparrow \cdots \uparrow_i \uparrow_{i+1} \cdots \uparrow\rangle &= S_i^+ \hbar|\uparrow \cdots \uparrow_i \downarrow_{i+1} \cdots \uparrow\rangle = 0 \\ S_i^- S_{i+1}^+|\uparrow \cdots \uparrow_i \uparrow_{i+1} \cdots \uparrow\rangle &= 0 \\ S_i^z S_{i+1}^z|\uparrow \cdots \uparrow_i \uparrow_{i+1} \cdots \uparrow\rangle &= S_i^z \frac{\hbar}{2}|\uparrow \cdots \uparrow_i \uparrow_{i+1} \cdots \uparrow\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{4}|\uparrow \cdots \uparrow_i \uparrow_{i+1} \cdots \uparrow\rangle \quad . \end{aligned}$$

   Ainsi $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}|F\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|F\rangle$, et nous avons

$$\begin{aligned} H_N|F\rangle &= -J \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{1}{2}\left(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+\right) + S_i^z S_{i+1}^z\right]|F\rangle \\ &= -JN\frac{\hbar^2}{4}|F\rangle \quad . \end{aligned}$$

   $|F\rangle$ est donc bien état propre de H_N avec une énergie $E_F = -JN\frac{\hbar^2}{4}$.

c. On a trouvé à la question 1 que l'énergie de l'état fondamental pour un système de deux spins était $-J\hbar^2/4$. Pour un système avec N couplages entre spins, on en déduit directement que l'énergie du fondamental est minorée par $N(-J\hbar^2/4)$. Dans ce cas, le minorant est atteint, et est effectivement l'énergie de $|F\rangle$

d. En utilisant les relations de commutation familières entre S^x, S^y et S^z, nous obtenons les relations de commutation suivantes pour S_i^-

$$\begin{aligned}
\left[S_i^-, S_i^-\right] &= 0 \\
\left[S_i^-, S_i^+\right] &= -2\hbar S_i^z \\
\left[S_i^-, S_i^z\right] &= \hbar S_i^- \\
\left[S_i^\alpha, S_j^\beta\right] &= \left[S_i^\alpha \otimes \mathbb{1}_j, \mathbb{1}_i \otimes S_j^\beta\right] = 0 \quad \text{si} \quad i \neq j \quad ,
\end{aligned}$$

La dernière propriété est liée au fait que lorsque $i \neq j$, les opérateurs S_i et S_j n'agissent pas sur le même spin et donc leur ordre n'importe pas. Par conséquent

$$\begin{aligned}
\left[S_{\text{tot}}^-, H_N\right] &= -J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[S_i^-, \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1}\right] \\
&= -J \sum_{i=1}^N \left\{[S_i^-, \mathbf{S}_{i-1} \cdot \mathbf{S}_i] + [S_i^-, \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}]\right\} \quad .
\end{aligned}$$

Ici nous avons utilisé $[S_k^\alpha, S_l^\beta] \neq 0$ seulement si $k = l$. En utilisant le résultat de l'exercice $2.a$, nous obtenons

$$\begin{aligned}
\left[S_{\text{tot}}^-, H_N\right] &= -J \sum_{i=1}^N \left[S_i^-, \frac{1}{2}\left(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+\right) + S_i^z S_{i+1}^z\right] \\
&\quad -J \sum_{i=1}^N \left[S_i^-, \frac{1}{2}\left(S_i^+ S_{i-1}^- + S_i^- S_{i-1}^+\right) + S_i^z S_{i-1}^z\right] \\
&= -J \sum_{i=1}^N \frac{1}{2}\left[S_i^-, S_i^+\right] S_{i+1}^- - J \sum_{i=1}^N \frac{1}{2}\left[S_i^-, S_i^-\right] S_{i+1}^+ - J \sum_{i=1}^N \left[S_i^-, S_i^z\right] S_{i+1}^z \\
&\quad -J \sum_{i=1}^N \frac{1}{2}\left[S_i^-, S_i^+\right] S_{i-1}^- - J \sum_{i=1}^N \frac{1}{2}\left[S_i^-, S_i^-\right] S_{i-1}^+ - J \sum_{i=1}^N \left[S_i^-, S_i^z\right] S_{i-1}^z
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left[S_{\text{tot}}^-, H_N\right] &= -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N (-2\hbar) S_i^z S_{i+1}^- - \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N (0) \cdot S_{i+1}^+ - J \sum_{i=1}^N \hbar S_i^- S_{i+1}^z \\
&\quad -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N (-2\hbar) S_i^z S_{i-1}^- - \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N (0) \cdot S_{i-1}^+ - J \sum_{i=1}^N \hbar S_i^- S_{i-1}^z \\
&= J\hbar \sum_{i=1}^N S_i^z S_{i+1}^- - J\hbar \sum_{i=1}^N S_{i-1}^z S_i^- - J\hbar \sum_{i=1}^N S_{i+1}^z S_i^- + J\hbar \sum_{i=1}^N S_i^z S_{i-1}^- \quad .
\end{aligned}$$

Dans la seconde et la quatrième somme, nous pouvons faire le changement de variable muette $i \to i+1$ (avec la convention $\mathbf{S}_{N+1} = \mathbf{S}_1$), et nous obtenons bien

$$\left[S^-_{\text{tot}}, H_N\right] = 0 \quad .$$

e. D'après la question précédente nous avons

$$H_N S^-_{\text{tot}}|F\rangle = S^-_{\text{tot}} H_N|F\rangle = E_F S^-_{\text{tot}}|F\rangle \quad .$$

Ainsi $|F_1\rangle \equiv S^-_{\text{tot}}|F\rangle$ est aussi un état fondamental, de la même manière que chaque ket de la forme $|F_n\rangle \equiv \left(S^-_{\text{tot}}\right)^n |F\rangle$.

> **Remarque**
> La matrice S^-_{tot} étant nilpotente, elle ne peut pas être diagonalisée. Il n'y a donc pas de base propre commune à H_N et S^-_{tot}.

La question qui se pose maintenant est celle de la dégénérescence g_F du fondamental. Lorsque l'on applique S^-_{tot} de manière répetée, les états $|F_i\rangle$ sont-ils indépendants ? Étant donné que g_F est finie, on sait par avance que la réponse à cette question est négative. Néanmoins si l'on regarde de plus près ces états, $|F_1\rangle$ est une combinaison linéaire de tous les états possibles ayant seulement un spin *down*, $|F_2\rangle$ une combinaison linéaire de tous les états possibles ayant exactement deux spins *down*, etc.

$$\begin{aligned}
|F_1\rangle &= \sum_{i_1} S^-_{i_1}|\uparrow\ldots\uparrow_{i_1}\ldots\uparrow\rangle \propto \sum_{i_1}|\uparrow\ldots\downarrow_{i_1}\ldots\uparrow\rangle \\
|F_2\rangle &= \sum_{i_2} S^-_{i_2}|F_1\rangle \propto \sum_{i_1<i_2}|\uparrow\ldots\downarrow_{i_1}\ldots\downarrow_{i_2}\ldots\uparrow\rangle \\
&\vdots \\
|F_N\rangle &= \sum_{i_N} S^-_{i_N}|F_{N-1}\rangle \propto \sum_{i_1<i_2<\ldots<i_N}|\downarrow_{i_1}\downarrow_{i_2}\ldots\downarrow_{i_N}\rangle \\
&= |\downarrow\downarrow\ldots\downarrow\rangle \quad .
\end{aligned}$$

Comme $|F_N\rangle$ est l'état avec tous les spins *down*, on en déduit que tous les états $|F_i\rangle$ tels que $i > N$ sont nuls. Et de plus, tous les états $|F_i\rangle$ tels que $i \leq N$ sont indépendants (car chacun a un nombre différent i de spins *down*). Ainsi nous venons de montrer que $g_F \geq N+1$.

Le fait que la dégénérescence soit exactement $g_F = N+1$ peut s'obtenir si l'on réalise que le fondamental est le sous-espace de spin total $N/2$, en gardant à l'esprit que la dégénérescence du sous-espace de spin S est $2S+1$.

Pour $N = 2$, on trouve bien un fondamental à 3 états : les trois états du triplet.

> **Remarque**
>
> i. Notez que les états $|F_n\rangle$ avec $n \in \{1, \ldots, N-1\}$ ne sont pas normalisés. On peut vérifier que $|F_n\rangle$ contient $N!/(n!(N-n)!)$ termes orthogonaux.
>
> ii. Les états $|F_n\rangle$ (notez qu'on a défini $|F_0\rangle \equiv |F\rangle$) sont aussi des vecteurs propres de S^z_{tot} avec des valeurs propres $\hbar(N/2 - n)$.
>
> iii. On peut aussi verifier que les états $|F_n\rangle$ ont un spin total $N/2$, c'est-à-dire qu'ils sont des vecteurs propres de $\mathbf{S}^2_{\text{tot}}$, avec $\mathbf{S}^2_{\text{tot}}|F_n\rangle = \hbar^2 \frac{N}{2}(\frac{N}{2}+1)|F_n\rangle$. Par conséquent, on a $2\frac{N}{2}+1 = N+1$ états avec la même énergie et spin total mais avec des valeurs S^z_{tot} différentes.

Pour conclure on peut se demander l'intérêt qu'il y a à connaître g_F. Dans le cas des milieux ferromagnétiques, c'est une question fondamentale comme nous allons essayer de le montrer en quelques lignes.

De manière générale, on attend que les symétries d'un système se reflètent dans les grandeurs physiques qui le caractérisent. (Par exemple, on s'attend à ce que le champ électrique créé par une charge ne dépende que de la distance r à la charge et pas de la direction considérée car, comme le système est invariant par rotation, si on le fait tourner, on doit retrouver le même résultat.) Ainsi, pour un hamiltonien invariant par rotation comme H_N, on pourrait penser que les états propres sont d'aimantation nulle (une aimantation non nulle qui pointe dans une direction de l'espace romp de toute évidence l'invariance par rotation). Or, non seulement nous savons que les matériaux ferromagnétiques, que H_N est censé modéliser, peuvent avoir une aimantation non nulle (comme c'est le cas d'un aimant en fer doux) mais de plus, nous vérifions que les états F_i ont bien une aimantation non nulle. La solution à cette situation apparemment paradoxale est liée à la dégénérescence du fondamental et au phénomène de *brisure spontanée de symétrie*, un concept d'extrême fécondité en physique. En quelques mots, s'il n'y avait qu'un état dans le fondamental, celui-ci serait d'aimantation nulle pour respecter la symétrie du système (ceci sera démontré simplement lorsque l'on traitera le paragraphe 9.3 du cours). Mais lorsque le fondamental est comme ici dégénéré, le respect des symétries demande juste que le niveau fondamental soit *globalement* invariant par rotation ce qui est bien le cas ici.

Que se passe-t-il alors dans la pratique ? À basse température, le système se trouve dans *un* état du fondamental qui, lui, a généralement une aimantation non nulle. Ainsi, sans aucune action extérieure, le système acquiert pourtant une aimantation et brise spontanément la symétrie de rotation du système. Cette symétrie se retrouve néanmoins dans le fait que la direction de l'aimantation est dans ce cas complètement arbitraire.