

Exercice 1 *Seconde quantification, généralités*

1. L'opérateur Hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_{n=0}^{\infty} E_n a_n^\dagger a_n. \quad (1)$$

2. On sait que l'état recherché est proportionnel à $(a_1^\dagger)^{N_1} \dots (a_n^\dagger)^{N_n} \dots |0\rangle$, mais il faut le normaliser.

$$|\psi\rangle = \prod_{n=0}^{\infty} \frac{(a_n^\dagger)^{N_n}}{\sqrt{N_n!}} |0\rangle.$$

3. (a) Pour des bosons,

$$\langle x_1, \dots, x_N | \psi \rangle = \sqrt{\frac{1}{N! \prod_n N_n!}} \sum_P \psi_{n_1}(x_{P(1)}) \dots \psi_{n_N}(x_{P(N)}), \quad (2)$$

avec la somme portant sur **toutes** les permutations de l'ensemble $\{1, \dots, N\}$, et n_1, \dots, n_N les N niveaux d'énergie occupés.

(b) Pour des fermions,

$$\langle x_1, \dots, x_N | \psi \rangle = \sqrt{\frac{1}{N!}} \sum_P (-1)^P \psi_{n_1}(x_{P(1)}) \dots \psi_{n_N}(x_{P(N)}) \quad (3)$$

avec $P = \pm 1$ la signature de la permutation P . Le $\prod_n N_n!$ qui apparaissait pour les bosons est ici inutile puisque $N_n = 0$ ou 1 .

Faisons maintenant un exemple concret avec trois particules pour nous convaincre des facteurs de normalisation qu'on a écrits. Pour $N = 3$ fermions on a que nécessairement $n_1 \neq n_2 \neq n_3$ et donc le nombre d'occupation est 1 pour chaque niveau $N_1 = N_2 = N_3 = 1$. L'éq. (3) nous donne comme fonction d'onde totale du système

$$\begin{aligned} \langle x_1, x_2, x_3 | \psi \rangle &= \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_P (-1)^P \psi_{n_1}(x_{P(1)}) \psi_{n_2}(x_{P(2)}) \psi_{n_3}(x_{P(3)}) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{3!}} \left[\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) \psi_{n_3}(x_3) - \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_3) \psi_{n_3}(x_2) \right. \\ &\quad - \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_1) \psi_{n_3}(x_3) + \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_3) \psi_{n_3}(x_1) \\ &\quad \left. + \psi_{n_1}(x_3) \psi_{n_2}(x_1) \psi_{n_3}(x_2) - \psi_{n_1}(x_3) \psi_{n_2}(x_2) \psi_{n_3}(x_1) \right]. \quad (4) \end{aligned}$$

On vérifie que $|\langle x_1, x_2, x_3 | \psi \rangle|^2 = 1$ en tenant compte du fait que chaque fonction des six dans la somme est orthogonale à toutes les autres, donc

$$|\langle x_1, x_2, x_3 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{\sqrt{3!}} \frac{1}{\sqrt{3!}} [\dots] [\dots] = \frac{1}{\sqrt{3!}} \frac{1}{\sqrt{3!}} 3! = 1. \quad (5)$$

Pour les bosons on obtient presque (à moins du signe de la permutation) le même résultat que pour les fermions en cas où tous les niveaux ont nombre d'occupation $N_i = 1$. Mais on va étudier un cas typiquement bosonique où plusieurs particules se trouvent dans le même état pour se convaincre du facteur de normalisation dans l'éq. (10).

Pour $N = 3$ bosons avec $N_1 = 2, N_2 = 1$ d'après éq. (10)

$$\begin{aligned} \langle x_1, x_2, x_3 | \psi \rangle &= \sqrt{\frac{1}{N!N_1!N_2!}} \sum_P \psi_{n_1}(x_{P(1)}) \psi_{n_1}(x_{P(2)}) \psi_{n_2}(x_{P(3)}) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{3!2!}} \left[\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_3) + \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_1}(x_3) \psi_{n_2}(x_2) \right. \\ &+ \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_3) + \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_1}(x_3) \psi_{n_2}(x_1) \\ &\left. + \psi_{n_1}(x_3) \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_1}(x_3) \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_1) \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

Important: on a sommé sur toutes les permutations. Pour N particules on aura toujours $N!$ termes dans la somme, même si certains correspondent à la même configuration.

Dans l'éq. (6) par exemple la première permutation est équivalente à la troisième, la deuxième à la cinquième, la quatrième à la dernière.

On vérifie que $|\langle x_1, x_2, x_3 | \psi \rangle|^2 = 1$

$$|\langle x_1, x_2, x_3 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{\sqrt{3!2!}} \frac{1}{\sqrt{3!2!}} [\dots] [\dots] = \frac{1}{\sqrt{3!2!}} \frac{1}{\sqrt{3!2!}} 3! (1+1) = 1. \quad (7)$$

Si on somme les permutations équivalentes dans l'éq. (6)

$$\begin{aligned} \langle x_1, x_2, x_3 | \psi \rangle &= \frac{2}{\sqrt{3!2!}} \left[\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_3) \right. \\ &\left. + \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_1}(x_3) \psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_1}(x_3) \psi_{n_2}(x_1) \right] = \frac{\sqrt{2!}}{\sqrt{3!}} [\dots] = \frac{1}{\sqrt{3}} [\dots]. \end{aligned} \quad (8)$$

Important: ici on a sommé seulement sur les permutations qui correspondent à configurations différentes du système.

Pour conclure la fonction d'onde normalisée pour N bosons peut être écrite comme

$$\langle x_1, \dots, x_N | \psi \rangle = \sqrt{\frac{1}{N! \prod_n N_n!}} \sum_{\text{toutes } P} \psi_{n_1}(x_{P(1)}) \dots \psi_{n_N}(x_{P(N)}) \quad (9)$$

ou

$$\langle x_1, \dots, x_N | \psi \rangle = \sqrt{\frac{\prod_n N_n!}{N!}} \sum_{P \text{ diff}} \psi_{n_1}(x_{P(1)}) \dots \psi_{n_N}(x_{P(N)}). \quad (10)$$

Exercice 2 Cas de l'oscillateur harmonique

1. Le Hamiltonien pour N particules s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2. \quad (11)$$

2. Pour une particule on a $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ et en seconde quantification le Hamiltonien sera

$$\hat{H} = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) a_n^\dagger a_n$$

3. (a) Pour des bosons, les N particules sont dans l'état de plus basse énergie dans l'état fondamental, qui s'écrit donc

$$|\psi\rangle = \frac{(a_0^\dagger)^N}{\sqrt{N!}} |0\rangle$$

et son énergie est $E = \hbar\omega \frac{N}{2}$.

(b) Pour des fermions, les N particules sont dans les N plus bas niveaux d'énergie car contrairement au cas des bosons, elles ne peuvent pas être plusieurs dans le même état (principe d'exclusion de Pauli). Attention, comme le premier niveau occupé est le niveau $n = 0$, le dernier est $N - 1$. L'état fondamental s'écrit :

$$|\psi\rangle = \prod_{n=0}^{N-1} a_n^\dagger |0\rangle$$

et son énergie est $E = \hbar\omega \frac{N^2}{2}$ (vient de $\sum_{n=0}^{N-1} \hbar\omega (n + \frac{1}{2})$).