

**Exercice 1** *Seconde quantification, cas d'un système périodique*

1. Le Hamiltonien s'écrit :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$$

2. Les énergies possibles pour une particule s'écrivent :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi n}{L} \right)^2 \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

et la fonction d'onde normalisée peut être choisie du type

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_n x}$$

3. (a) Les bosons peuvent se trouver tous dans l'état avec énergie nulle qui correspond à
- $n = 0$
- , donc pour un système de
- $N$
- bosons l'énergie totale est

$$E_0^b = 0.$$

En effet, les conditions aux bords périodiques autorisent l'existence d'une fonction d'onde constante, non nulle, d'équiprobabilité dans toute la boîte. L'énergie de cet état est bien nulle.

- (b) Pour des fermions, il faut remplir deux fois jusqu'à
- $(N - 1)/2$
- , si
- $N$
- est impair (on se place dans ce cas pour simplifier la procédure).

$$E_0^f = 2 \sum_{n=0}^{(N-1)/2} \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} n^2$$

On peut calculer exactement la somme des  $P$  premiers carrés,

$$\sum_{n=0}^P n^2 = \frac{1}{6} P(P+1)(2P+1)$$

on peut démontrer ce résultat en calculant successivement  $P^3 - (P-1)^3 = 3P^2 - 3P + 1$ ,  $(P-1)^3 - (P-2)^3 = 3(P-1)^2 - 3(P-1) + 1 \dots$  En sommant les  $P$  termes de cette suite, on trouve  $P^3 = 3 \sum n^2 - 3 \sum n + P$ , ce qui donne le résultat. Ici,  $P = (N-1)/2$ , d'où

$$E_0^f = \frac{1}{6} \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2} (N-1)(N+1)N$$

À la limite thermodynamique, le nombre d'état  $N$  n'est plus défini, mais on connaît seulement la densité d'état  $\rho$ . Dans cette limite, la somme se transforme en intégrale:

$$E_0^f = 2 \int_{-\rho L/2}^{\rho L/2} \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m} \left(\frac{n}{L}\right)^2 dn = \frac{\rho^3 \pi^2 \hbar^2}{6m} L$$

On peut passer de la somme à l'intégrale en remarquant que le terme  $\Delta n$  qui devrait apparaître dans la somme est égal à 1 (il vaut  $(\rho L/2 - (-\rho L/2))/N = N/N = 1$ ).

*Remarque:* l'énoncé fait mention de l'énergie de Fermi. La réponse à cette question est trivialement l'énergie de l'état le plus haut occupé, à savoir  $E_{(N-1)/2}$  pour un  $N$  impair.

4. (a) Le calcul est le même pour des bosons et des fermions, il suffit de remplacer  $(-1)^P$  par 1 ou vice versa

$$\begin{aligned} H\psi(x) &= \sum_{i=1}^N \frac{(-i\hbar\nabla_i)^2}{2m} \sum_P \frac{(-1)^P}{\sqrt{N! \prod_i N_i!}} \psi_{n_1}(x_{P(1)}) \dots \psi_{n_N}(x_{P(N)}) \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{(-i\hbar\nabla_i)^2}{2m} \sum_P \frac{(-1)^P}{\sqrt{N! \prod_i N_i!}} e^{i\frac{2\pi}{L}(n_1 x_{P(1)} + \dots + n_N x_{P(N)})} \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m} \left(i\frac{2\pi}{L}\right)^2 \sum_P \frac{(-1)^P}{\sqrt{N! \prod_i N_i!}} (n_{P(i)})^2 e^{i\frac{2\pi}{L}(n_1 x_{P(1)} + \dots + n_N x_{P(N)})} \end{aligned}$$

Le terme  $n_{P(i)}^2$  sort car  $x_i$  ne sera pas forcément en face de  $n_i$ , selon la permutation. En revanche, pour un  $i_0$ , on aura tous les  $n_i$  différents en face de chaque fonction d'onde, dont notamment  $n_{i_0}$ . Si on redistribue tous les  $n_{i_0}$  trouvés dans les autres sommes sur les permutations des autres  $i$ , on peut réécrire l'équation comme suit.

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} n_i\right)^2 \sum_P \frac{(-1)^P}{\sqrt{N! \prod_i N_i!}} e^{i\frac{2\pi}{L}(n_1 x_{P(1)} + \dots + n_N x_{P(N)})} \\ &= \sum_{i=1}^N E_i \sum_P \frac{(-1)^P}{\sqrt{N! \prod_i N_i!}} \psi_{n_1}(x_{P(1)}) \dots \psi_{n_N}(x_{P(N)}) \\ &= \sum_{i=1}^N E_i \psi(x_1 \dots x_N) \end{aligned}$$

- (b) On applique le hamiltonien d'une particule libre sur un système de  $N$  particules telles que  $\sum_m N_m = N$  et  $E_M$  l'énergie du dernier niveau occupé. Le calcul consiste simplement à appliquer de façon successive le commutateur entre  $a_n$  et  $a_n^\dagger$  pour faire passer  $a_n$  à droite (et obtenir un 0 en l'appliquant sur  $|0\rangle$ ).

$$\begin{aligned}
H|\psi\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} E_n a_n^\dagger a_n \prod_m \frac{(a_m^\dagger)^{N_m}}{\sqrt{N_m!}} |0\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} E_n \frac{1}{\prod_m \sqrt{N_m!}} (a_1^\dagger)^{N_1} \dots a_n^\dagger a_n (a_n^\dagger)^{N_n} \dots (a_M^\dagger)^{N_M} |0\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} E_n \frac{1}{\prod_m \sqrt{N_m!}} (a_1^\dagger)^{N_1} \dots a_n^\dagger \left( [a_n, a_n^\dagger] + a_n^\dagger a_n \right) (a_n^\dagger)^{N_n-1} \dots (a_M^\dagger)^{N_M} |0\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} E_n \frac{1}{\prod_m \sqrt{N_m!}} (a_1^\dagger)^{N_1} \dots (a_n^\dagger)^2 \left( 1 + a_n a_n^\dagger \right) (a_n^\dagger)^{N_n-2} \dots (a_M^\dagger)^{N_M} |0\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} E_n \frac{1}{\prod_m \sqrt{N_m!}} (a_1^\dagger)^{N_1} \dots (a_n^\dagger)^2 \left( 1 + [a_n, a_n^\dagger] + a_n^\dagger a_n \right) (a_n^\dagger)^{N_n-2} \dots (a_M^\dagger)^{N_M} |0\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} E_n \frac{1}{\prod_m \sqrt{N_m!}} (a_1^\dagger)^{N_1} \dots (a_n^\dagger)^3 \left( 2 + a_n a_n^\dagger \right) (a_n^\dagger)^{N_n-3} \dots (a_M^\dagger)^{N_M} |0\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} E_n \frac{1}{\prod_m \sqrt{N_m!}} (a_1^\dagger)^{N_1} \dots N_n (a_n^\dagger)^{N_n} \dots (a_M^\dagger)^{N_M} |0\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} E_n N_n \prod_m \frac{(a_m^\dagger)^{N_m}}{\sqrt{N_m!}} |0\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} E_n N_n |\psi\rangle
\end{aligned}$$

On voit donc que les deux calculs, fait dans les deux formalismes différents, donnent bien le même résultat. L'énergie de l'état, en seconde quantification, est comprise dans l'état lui-même (puisque le hamiltonien ne comprends pas cette information).

On note aussi que pour ce calcul spécifique, la seconde quantification n'est pas forcément plus facile de manipulation. Ce n'est toutefois pas pour faire ces calculs que ce formalisme a été introduit, mais bien pour pouvoir traiter des problèmes plus généraux.

5.

$$H = \sum_n E_n a_n^\dagger a_n + \sum_{ij} a_i^\dagger V_{ij} a_j + \frac{1}{2} \sum_{nmlp} a_n^\dagger a_m^\dagger V_{nmlp} a_l a_p \tag{1}$$

On peut essayer de comprendre de façon plus intuitive pourquoi le terme d'interaction à deux corps a besoin de quatre opérateurs de création et annihilation. Cela peut en effet paraître paradoxal au premier abord.

C'est cependant logique. L'interaction à deux corps fait passer deux particules de leur état initial respectif  $l$  et  $p$  à leur état final  $m$  et  $n$ . Pour cela, il faut détruire les deux particules initiales ( $a_l$  et  $a_p$ ) et créer les particules dans l'état final ( $a_m^\dagger$  et  $a_n^\dagger$ ).

Avec ce formalisme, rien ne nous empêche de décrire une interaction du type  $2 \rightarrow 1$ , où deux particules initiales se mélangent pour ne faire plus qu'une seule. Le nombre de particules n'a pas à être conservé, puisque nos fonctions d'ondes vivent dans l'espace de Fock qui englobe tous les nombres de particules possibles.