LA SECONDE QUANTIFICATION

Professeur Abdelali Rahmani
Master de Physique des Appliquée et Ingénierie Physique 2019/2020
Université MY Ismaïl, Faculté des Sciences

Contents

1 Introduction **2**

2 Cas des bosons **4**

3 Opérateurs agissant sur une seule particule **4**

1 Introduction

Rappelons tout d'abord qu'il ne s'agit pas d'une seconde quantification au sens strict: il n'y a qu'une seule quantification. Cette dénomination a été introduite lors de la quantification d'un champ électromagnétique, d'où le terme de second quantifiaction.

Il s'agit en fait d'une méthode pour représenter et surtout calculer plus simplement les propriétés des systèmes constitués de particules identiques.

C'est un formalisme particulièrement bien adapté au traitement statistique des systèmes.

On considère un système constitué de N particules identiques décrites par un hamiltonien H donné par

$$\tilde{H} = H_1 + H_2 = \sum_i \frac{P_i^2}{2m} + \sum_i V_1(x_1) + \sum_{i \neq j} V_2(x_1, x_j) \tag{1}$$

Les coordonnés x_i représentent les positions $\vec{r}_i$ et les spins du système.

L'équation de Schrödinguer du système

$$\tilde{H}\psi(x_1, x_2, ..., x_N) = i\hbar \frac{\psi(x_1, x_2, ..., x_N)}{\partial t} \tag{2}$$

Nous désirons représenter les éléments des opérateurs du système dans un formalisme qui tient compte automatiquement de l'identité et de l'indiscernabilité des particules. cela signifie que les fonctions de l'équation (2) doivent être invariante au changement de signe près (à un changement de phase près) lors de la permutation des particules. On introduit les fonctions propres de l'opérateur hamiltonien.

Rappelons que les solutions sont fonction du nombre de particules en interaction. Dans le cas des bosons, les fonctions d'état doivent être symétriques lors de toutes permutation des particules qui composent le système. Avec les fermions ces fonctions doivent être antisymétriques.

Afin de tenir compte de l'identité des particules et leurs propriétés de symétrie on développe les fonctions d'état sur une base orthonormée qui inclut automatiquement les propriétés de symétrie.

Pour déterminer cette base, on introduit des fonctions à 1 particule $\Phi_p(x)$ qui constituent un ensemble complet de fonctions orthonormées. Ces fonctions seront choisies en fonction du problème ràiter. Elles correspondent souvent au système étudié avec des particules sans interaction.

Par exemple on prendra les états propres d'une particule dans une boite ou les orbitales atomiques d'atomes isolés. On a

$$\int \Phi_p^*(x)\Phi_{p'}(x)dx = \delta_{pp'}; \sum_p \Phi_p^*(x)\Phi_p(x')dx = \delta(x - x') \tag{3}$$

On introduit maintenant un ensemble complet de fonctions orthonormées obtenu en effectuant des combinaisons linéaires de produits des fonctions $\Phi_p(x)$. Pour fixer les idées les fonctions $\Phi_p(x)$ seront dits $1p$ (fonctions propres obtenues dans le cas ou les particules sont sans interaction c'est-à-dire dans le cas où l'on peut considérer le système avec 1 particule pour résoudre l'équation de Schrödinguer). Ainsi écrire$\Phi_{p_j}(x_i)$ signifie que l'on considère la particule x_i dans l'état p_j.

Pour les bosons, on définit la base

$$\Phi^B_{p_1 p_2, ...}(x_1 x_2 ... x_N) = (\frac{N_1! N_2!}{N!})^{1/2} \sum_p \Phi_{p_1}(x_1)\Phi_{p_1}(x_2)...\Phi_{p_2}(x_1)\Phi_{p_2}(x_2)... \tag{4}$$

où l'on effectue la somme sur toutes les permutations de particules n'appartenant pas au même état: on ne permutera pas les particules 1 et 2 dans l'exemple ci-dessus.
Règle: Les états sont mis dans un ordre donné qui reste invariant (on permutra les x_i entre eux).
N_1: représente le nombre de fois que la focntion Φ_{p_1} apparait
N_2: représente le nombre de fois que la focntion Φ_{p_2} apparait, $N3$.... etc...

$$(\frac{N_1!N_2!N3!...}{N!})^{1/2} \tag{5}$$

est un facteur de normalisation.
On écrit $p_1.p_2.p_3$... et n'ont pas 1.2.3... car tous les états aparaissent dans la définition des φ.

Avec les fermions, on définit la fonction de base du système à N particules de la manière suivante

$$\Phi^F_{p_1p_2,...}(x_1x_2...x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Phi_{p_1}(x_1)\Phi_{p_2}(x_1)...\Phi_{p_N}(x_1) \\ \Phi_{p_1}(x_2)\Phi_{p_2}(x_2)...\Phi_{p_N}(x_2) \\ \Phi_{p_1}(x_i)\Phi_{p_2}(x_i)...\Phi_{p_N}(x_i) \\ \Phi_{p_1}(x_N)\Phi_{p_2}(x_N)...\Phi_{p_N}(x_N) \end{vmatrix}$$

Il est évident qu'il ne peut y avoir la même fonction de base $p_1 \neq p_2 \neq p_3$.... Par exemple avec deux particules dans le cas des bosons, la base sera formée par les fonctions

$$\Phi^B_{p_1p_2}(x_1x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Phi_{p_1}(x_1)\Phi_{p_2}(x_2) + \Phi_{p_1}(x_2)\Phi_{p_2}(x_1)] \tag{6}$$

alors qu'avec les fermions, on aura pour base

$$\Phi^F_{p_1p_2}(x_1x_2...x_N) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \Phi_{p_1}(x_1)\Phi_{p_2}(x_1) \\ \Phi_{p_1}(x_2)\Phi_{p_2}(x_2) \end{vmatrix}$$

soit,

$$\Phi^F_{p_1p_2}(x_1x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Phi_{p_1}(x_1)\Phi_{p_2}(x_2) - \Phi_{p_1}(x_2)\Phi_{p_2}(x_1)] \tag{7}$$

Il est clair que pour spécifier parfaitement la base $\varphi^{F,B}$, il suffit d'indiquer combien de fois les fonctions de base à 1 particule apparaissent et que dans le cas des fermions, il est évident qu'une fonction de base à 1 particule ne peut pas apparaitre plus d'une fois.
Alors au lieu d'écrire $\varphi^{F,B}_{p_1p_2...}(x_1x_2x_3...)$, on écrira:

$$\begin{array}{cccccc} p_1, & p_2, & p_3,..., & p_j & & \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow ... & \downarrow & & \\ \mid N_1, & N_2, & N_3,..., & N_j > & = \mid n > \end{array}$$

Nous allons maintenant rechercher la forme des opérateurs dans la représentation développée ci-dessus.

2 Cas des bosons

3 Opérateurs agissant sur une seule particule

On considère des opérateurs de type

$$\tilde{A}_t = \sum_{i=1}^{N} \tilde{A}_i \tag{8}$$

où $\tilde{A}_i$ est un opérateur qui agit sur une seule particule, par exemple l'hamiltonien

$$\tilde{A}_i = \frac{\tilde{P}_i^2}{2m} + V_1(\tilde{X}_i); \tilde{P}_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i} \tag{9}$$

On veut calculer la quantité:$< n \mid \tilde{A}_t \mid m >$, avec $\mid n >$ et $\mid m >$ donnés par les équations (4) et (8).
Considérons l'opérateur $\tilde{A}_1$ de $\tilde{A}$ et calculer sa contribution. Le système étant symétrique avec l'échange de particules, les autres opérateurs $\tilde{A}_i$ vont certainement contribuer de la même manière que $\tilde{A}_1$. un élément typique de $< n \mid \tilde{A}_t \mid m >$ sera de la forme

$$\int \phi^*_{p_1}(x_{i_1})\phi^*_{p_2}(x_{i_2})\phi^*_{p_3}(x_{i_3})...\tilde{A}_1\phi_{p'_1}(x_{j_1})\phi_{p'_2}(x_{j_2})\phi^*_{p'_3}(x_{j_3})...dx_1dx_2dx_3... \tag{10}$$

avec

$$\begin{array}{rccc} & p_1, & p_2, & p_3,\cdots \\ & \downarrow & \downarrow & \downarrow ... \\ \mid n >= & \mid N_1, & N_2, & N_3,...> \end{array}$$

et

$$\begin{array}{rccc} & p'_1, & p'_2, & p'_3,\cdots \\ & \downarrow & \downarrow & \downarrow ... \\ \mid m >= & \mid M_1, & M_2, & M_3,...> \end{array}$$

c'est à dire que $\mid n >$ et $\mid m >$ peuvent ne pas concerner les mêmes états à une particule. Cependant dans (10), A_1 n'agit que sur x_1 et il est donc nécessaire pour obtenir un élément non nul que les $N-1$ autres variables apparaissent dans les mêmes fonctions à une particule.
Afin de fixer les idées nous allons prendre un exemple:
On considère deux fonctions à N particules (ici $N = 2$)

$$\begin{array}{c} \mid m >=\mid 2,0,0,... >\equiv \phi_1(x_1)\phi_1(x_2) \\ \mid n >=\mid 0,0,2,... >\equiv \phi_3(x_1)\phi_3(x_2) \end{array}$$

avec

$$\tilde{A}_t = \tilde{A}_1 + \tilde{A}_2$$

on aura évidemment de (3)

$$< n \mid \tilde{A}_t \mid m >=< n \mid \tilde{A}_1 \mid m > + < n \mid \tilde{A}_2 \mid m >= 0$$

Si l'on considère par contre

$$\begin{aligned} \mid m >= \mid 1,1,0,... >\equiv [\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) + \phi_1(x_2)\phi_2(x_1)]/\sqrt{2} \\ \mid n >= \mid 0,1,1,... >\equiv [\phi_2(x_1)\phi_3(x_2) + \phi_2(x_2)\phi_3(x_1)]/\sqrt{2} \end{aligned}$$

On veut calculer $< n \mid \tilde{A}_t \mid m >$ sachant que $\tilde{A}_t = \tilde{A}_1 + \tilde{A}_2$.
On considère l'opérateur $\tilde{A}_1$
On écrira par définition

$$\int \phi_l^*(x_i)\tilde{A}_i\phi_k(x_i)dx_i =< l \mid \tilde{A} \mid k >, \forall i$$

Puisque cette intégrale ne dépend pas de la variable x_i et dépend seulement des fonctions ϕ_l et ϕ_k. On obtient

$$\begin{aligned} < l \mid \tilde{A} \mid k >= 1/2 \int \phi_l^*(x_1)\phi_2^*(x_2)\tilde{A}_1\phi_2(x_1)\phi_3(x_2)dx_1dx_2 \\ +1/2 \int \phi_l^*(x_1)\phi_2^*(x_2)\tilde{A}_1\phi_2(x_2)\phi_3(x_1)dx_1dx_2 \\ +1/2 \int \phi_l^*(x_2)\phi_2^*(x_1)\tilde{A}_1\phi_2(x_1)\phi_3(x_2)dx_1dx_2 \\ +1/2 \int \phi_l^*(x_2)\phi_2^*(x_1)\tilde{A}_1\phi_2(x_2)\phi_3(x_1)dx_1dx_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} = 1/2 < 1 \mid \tilde{A}_1 \mid 2 >< 2 \mid 3 >! = 0 \\ +1/2 < 1 \mid \tilde{A}_1 \mid 3 >< 2 \mid 2 >! \neq 0 \\ +1/2 < 2 \mid \tilde{A}_1 \mid 2 >< 1 \mid 3 >! = 0 \\ +1/2 < 2 \mid \tilde{A}_1 \mid 3 >< 1 \mid 2 >! = 0 \\ = 1/2 < 1 \mid \tilde{A}_1 \mid 3 > \end{aligned}$$

Il est clair que les éléments non nuls n'apparaissent que lorsque les mêmes fonctions apparaissent à droite et à gauche pour toutes les variables x_i différentes de x_1 concerné par l'opérateur $\tilde{A}_1$.
Autrement dit les seuls éléments de matrice non nuls sont ceux qui concerneront des vecteurs de base $\mid n >$ et $\mid m >$ qui ne seront différent l'un de l'autre par une seule fonction (à 1 particule) au maximum.
Puisque qu'on repère la présence des fonctions à 1 particule par le nombre de fois N_1 que la fonction ϕ_{p_1} apparait, par le nombre de fois N_2 que la fonction ϕ_{p_2} apparait, ...etc, cela signifie que la seule possibilité pour obtenir des éléments non nuls entre