Introduction au langage de la seconde quantification

Brigitte Leridon
ILL mai 2013

Résumé

- Introduction au langage, idées et concepts
- Systèmes de fermions principalement
- Outils pour les systèmes de fermions
- Quelques exercices de calcul
- Reformulation de quelques opérateurs usuels
- Cas des bosons

$$H_{e-ph} = \sum_{\vec{k}\vec{q}} g_{\vec{q}} C^{+}_{\vec{k}-\vec{q}} C_{\vec{k}} (a^{+}_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}})$$

Comment décrire les états d'un système à N particules à partir des états à une particule (fermions)

- Si une base orthonormée quelconque des états à une particule est donnée par φ_l avec l décrivant les états quantiques accessibles..

Comment décrire les états d'un système à N particules à partir des états à une particule (fermions)

- Si une base orthonormée quelconque des états à une particule est donnée par φ_l avec l décrivant les états quantiques accessibles..

  ...alors une base orthonormée complète est donnée par les déterminants de Slater:

$$\Phi_{l_1 l_2 \dots l_N} = D_{l_1 l_2 \dots l_N}(1,2,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi l_1(1), \varphi l_1(2), \dots, \varphi l_1(N) \\ \varphi l_2(1), \varphi l_2(2), \dots, \varphi l_2(N) \\ \dots, \dots, \dots, \dots \\ \varphi l_N(1), \varphi l_N(2), \dots, \varphi l_N(N) \end{vmatrix}$$

i= ensemble des coordonnées de positon de de spin de la particule
l peut prendre N valeurs parmi un ensemble à priori infini de valeurs possibles

Les Φ ne sont pas vecteurs propres du Hamiltonien à N particules mais forment une base complète
Les Φ anticommuttent par échange de deux fermions. Deux Φ qui ne différent que par l'ordre des $l_1 \dots l_N$ (et leur signe éventuel) décrivent le même état.

On peut écrire : $\varphi_l = \varphi_\lambda(\vec{r}) \mid \sigma > \quad s_z \mid \sigma >= \sigma \mid \sigma > \quad l = (\lambda, \sigma)$

Le formalisme de la seconde quantification va consister à écrire l'état $\Phi_{l_1 l_2 \ldots l_N}$ comme :

$$C_{l_1}^+ C_{l_2}^+ \ldots\ldots C_{l_N}^+ \mid 0 >$$

C_l^+ est appelé opérateur de *création* d'une particule

$\mid 0 >$ désigne l'état vide de particules et d'états

On peut écrire : $\varphi_l = \varphi_\lambda(\vec{r}) \mid \sigma > \quad s_z \mid \sigma >= \sigma \mid \sigma > \quad l = (\lambda, \sigma)$

Le formalisme de la seconde quantification va consister à écrire l'état $\Phi_{l_1 l_2 \ldots l_N}$ comme :

$$C^+_{l_1} C^+_{l_2} \ldots\ldots C^+_{l_N} \mid 0 >$$

C^+_l est appelé opérateur de *création* d'une particule

$\mid 0 >$ désigne l'état vide de particules et d'états

On peut définir l'opérateur hermitique adjoint C_l de C^+_l

On a : $C_l \mid 0 >= 0$

Les opérateurs C^+_l et C_l ont des propriétés telles que l'antisymétrie et l'orthonormalisation des déterminants de Slater sont assurées par construction.

antisymétrie

- Pour assurer l'antisymétrie

$$C_l^+ C_{l'}^+ + C_{l'}^+ C_l^+ = [C_l^+, C_{l'}^+]_+ = 0$$

… et ceci assure naturellement : $$(C_l^+)^2 = 0$$

→ Principe d'exclusion de Pauli

On aura également $$C_l C_{l'} + C_{l'} C_l = [C_l, C_{l'}]_+ = 0$$

$$(C_l)^2 = 0$$

Normalisation à l'unité

- En imposant la règle de commutation :

$$C_l C_{l'}^+ + C_{l'}^+ C_l = [C_l, C_{l'}^+]_+ = \delta_{ll'}$$

- On peut calculer (exercice)

$$< \Phi_{l_1 l_2 \ldots l_N} \mid \Phi_{l_1 l_2 \ldots l_N} > = < 0 \mid C_{l_N} \ldots . C_{l_2} C_{l_1} C_{l_1}^+ C_{l_2}^+ \ldots C_{l_N}^+ \mid 0 > = ?$$

Normalisation à l'unité

- En imposant la règle de commutation :

$$C_l C_{l'}^+ + C_{l'}^+ C_l = [C_l, C_{l'}^+]_+ = \delta_{ll'}$$

- On peut vérifier que (exercice)

$$< \Phi_{l_1 l_2 \ldots l_N} \mid \Phi_{l_1 l_2 \ldots l_N} > = < 0 \mid C_{l_N} \ldots . C_{l_2} C_{l_1} C_{l_1}^+ C_{l_2}^+ \ldots C_{l_N}^+ \mid 0 > = 1$$

Base grand-canonique

- On peut travailler avec un nombre non défini de particules

$$| n_1, n_2, \ldots n_\infty >= \prod_{l=1}^{\infty} (C_l^+)^{n_l} \mid 0 >$$

Ici bien sûr n_l=0 ou 1 et on obtient les états à une, à deux, à N ou une infinité de particules.

On peut écrire :

$$C_l^+ \mid n_1, n_2, \ldots, n_l, .., n_\infty >= (-1)^{\nu_l} \sqrt{1 - n_l} \mid n_1, n_2, \ldots, n_l + 1, .., n_\infty >$$

$$C_l \mid n_1, n_2, \ldots, n_l, .., n_\infty >= (-1)^{\nu_l} \sqrt{n_l} \mid n_1, n_2, \ldots, n_l - 1, .., n_\infty >$$

Car : $n_l = \sqrt{n_l}$ et $1 - n_l = \sqrt{1 - n_l}$

Opérateur nombre d'occupation

- On peut montrer que

$$C_l^+ C_l \mid n_1, n_2, \ldots, n_l, .., n_\infty >= n_l \mid n_1, n_2, \ldots, n_l, .., n_\infty >$$

$\mid n_1, n_2, \ldots, n_l, .., n_\infty >$ est l'état propre de $C_l^+ C_l$

$C_l^+ C_l$ est l'opérateur nombre de particules de l'état l

Propriétés :

(Montrer que) $(C_l^+ C_l)^2 = C_l^+ C_l$

Les seules valeurs propres possibles de $C_l^+ C_l$ sont donc 0 ou 1.

Opérateur nombre total de particules

- On définit $$\widehat{N} = \sum_l C_l^+ C_l$$
- (Montrer que) les états $| \{n_l\} >$ sont aussi vecteurs propres de $\widehat{N}$ avec la valeur propre associée $$N = \sum_l n_l$$

Opérateurs champs

- On définit $$\Psi_\sigma(\vec{r}) = \sum_\lambda \varphi_\lambda(\vec{r}) C_{\lambda\sigma} \qquad \Psi_\sigma^+(\vec{r}) = \sum_\lambda \varphi_\lambda^*(\vec{r}) C_{\lambda\sigma}^+$$

les φ_λ décrivent les états orbitaux de la base orthonormée $| \lambda, \sigma >$

$\Psi_\sigma^+(\vec{r})$ crée une particule au point $\vec{r}$ et dans l'état $| \sigma >$

$$C_{\lambda\sigma} = \int d^3r \varphi_\lambda^*(\vec{r}) \Psi_\sigma(\vec{r}) \qquad C_{\lambda\sigma}^+ = \int d^3r \varphi_\lambda(\vec{r}) \Psi_\sigma^+(\vec{r})$$

Propriétés :

$$\Psi_\sigma(\vec{r}) \mid 0 >= 0$$

$$[\Psi_\sigma(\vec{r}), \Psi_{\sigma'}^+(\vec{r'})]_+ = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\vec{r} - \vec{r'})$$

$$[\Psi_\sigma(\vec{r}), \Psi_{\sigma'}(\vec{r'})]_+ = [\Psi_\sigma^+(\vec{r}), \Psi_{\sigma'}^+(\vec{r'})]_+ = 0$$

$$(\Psi_\sigma(\vec{r})^2 = (\Psi_\sigma^+(\vec{r}))^2 = 0$$

Opérateur densité

- On définit l'opérateur densité de particules de spin sigma au point r

$$\rho_{\sigma(\vec{r})} = \Psi_\sigma^+(\vec{r})\Psi_\sigma(\vec{r})$$

- Et donc l'opérateur densité totale de particules au point r :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_\sigma \rho_{\sigma(\vec{r})}$$

$$\int \rho(\vec{r}) d^3r = \sum_{\sigma\lambda\lambda'} C_{\lambda\sigma}^+ C_{\lambda'\sigma} \int \varphi_\lambda^*(\vec{r})\varphi_{\lambda'}(\vec{r}) d^3r = \sum_{\lambda\sigma} C_{\lambda\sigma}^+ C_{\lambda\sigma} = \widehat{N}$$

Car les orbitales sont orthonormées.

- Prenons un opérateur *ne dépendant que de r* et dont l'expression

  en langage usuel est $$F = \sum_{j=1}^{N} f(\vec{r_j})$$

- En langage usuel F s'écrit aussi $$F = \int f(\vec{r})\rho(\vec{r})d^3r$$

  où l'opérateur densité est donné par : $$\rho(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r_j})$$

  dans le nouveau langage il est donné par $$\rho_{SC}(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \rho_{\sigma}(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r})\Psi_{\sigma}(\vec{r})$$

  et on a : $$F = \sum_{\sigma} \int \Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r}) f(\vec{r}) \Psi_{\sigma}(\vec{r}) d^3r$$

  Montrer que $$F = \sum_{\sigma\lambda\lambda'} f_{\lambda\lambda'} C_{\lambda\sigma}^{+} C_{\lambda'\sigma}$$ avec $$f_{\lambda\lambda'} = < \varphi_{\lambda} \mid f \mid \varphi_{\lambda'} >$$

- Prenons un opérateur *ne dépendant que de r* et dont l'expression en langage usuel est $$F = \sum_{j=1}^{N} f(\vec{r_j})$$
- En langage usuel F s'écrit aussi $$F = \int f(\vec{r})\rho(\vec{r})d^3r$$

où l'opérateur densité est donné par : $$\rho(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r_j})$$

dans le nouveau langage il est donné par $$\rho_{SC}(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \rho_\sigma(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \Psi_\sigma^+(\vec{r})\Psi_\sigma(\vec{r})$$

et on a : $$F = \sum_{\sigma} \int \Psi_\sigma^+(\vec{r}) f(\vec{r}) \Psi_\sigma(\vec{r}) d^3r$$

ce qui peut aussi s'écrire $F = \sum_{\sigma\lambda\lambda'} f_{\lambda\lambda'} C_{\lambda\sigma}^+ C_{\lambda'\sigma}$ avec $f_{\lambda\lambda'} =< \varphi_\lambda \mid f \mid \varphi_{\lambda'} >$

Expression des opérateurs usuels

- On peut réexprimer tout opérateur connu dans ce langage.
- Intuitivement c'est souvent assez facile, formellement c'est long !

$$< 0 \mid C_{l_N} \ldots C_{l_1} O_{SC} C^{+}_{l'_1} \ldots C^{+}_{l'_{N'}} \mid 0 > = < D_{l_1 l_2 \ldots l_N}(1,2,\ldots,N) \mid O \mid D_{l'_1 l'_2 \ldots l'_{N'}}(1,2,\ldots,N') >$$

- Avantage : l'expression des opérateurs dans le langage de la SC ne dépend pas de l'état d'occupation réel du système des états à une particule. En d'autres termes, on fait intervenir des particules absentes. Ce sont les éléments de matrice des opérateurs calculés sur les états qui eux font intervenir le peuplement réel des états.

Expression des opérateurs usuels

- On peut réexprimer tout opérateur connu dans ce langage.
- Intuitivement c'est souvent assez facile, formellement c'est long !

$$< 0 \mid C_{l_N} \dots C_{l_1} O_{SC} C^+_{l'_1} \dots C^+_{l'_{N'}} \mid 0 > = < D_{l_1 l_2 \dots l_N}(1,2,\dots,N) \mid O \mid D_{l'_1 l'_2 \dots l'_{N'}}(1,2,\dots,N') >$$

- Avantage : l'expression des opérateurs dans le langage de la SC ne dépend pas de l'état d'occupation réel du système des états à une particule. En d'autres termes, on fait intervenir des particules absentes. Ce sont les éléments de matrice des opérateurs calculés sur les états qui eux font intervenir le peuplement réel des états.
- Cas le plus simple : Opérateurs somme de termes à un corps

  exemple : N particules indiscernables toutes soumises à au même potentiel à un corps (et éventuellement au même potentiel vecteur)

$$V = \sum_{j=1}^{N} v(\vec{r_j}) \qquad H = \sum_{j=1}^{N} h(\vec{r_j})$$

- Ou bien opérateur énergie cinétique de particules indépendantes $E_C = \sum_{j=1}^{N} \epsilon_c(\vec{r_j})$

Expression des opérateurs usuels

- On peut réexprimer tout opérateur connu dans ce langage.
- Intuitivement c'est souvent assez facile, formellement c'est long !

$$< 0 \mid C_{l_N} \dots C_{l_1} O_{SC} C^{+}_{l'_1} \dots C^{+}_{l'_{N'}} \mid 0 >=< D_{l_1 l_2 \dots l_N}(1,2,\dots,N) \mid O \mid D_{l'_1 l'_2 \dots l'_{N'}}(1,2,\dots,N') >$$

- Avantage : l'expression des opérateurs dans le langage de la SC ne dépend pas de l'état d'occupation réel du système des états à une particule. En d'autres termes, on fait intervenir des particules absentes. Ce sont les éléments de matrice des opérateurs calculés sur les états qui eux font intervenir le peuplement réel des états.
- Cas le plus simple : Opérateurs somme de termes à un corps

  exemple : N particules indiscernables toutes soumises à au même potentiel à un corps (et éventuellement au même potentiel vecteur)

$$V = \sum_{j=1}^{N} v(\vec{r_j}) \qquad H = \sum_{j=1}^{N} h(\vec{r_j})$$

- Ou bien opérateur énergie cinétique de particules indépendantes $E_C = \sum_{j=1}^{N} \epsilon_c(\vec{r_j})$

- Cas le plus général $$F = \sum_{ll'} f_{ll'} C_l^+ C_{l'}$$
- Avec
- $$f_{ll'} = < l \mid f \mid l' >$$
- Où $l = (\lambda, \sigma) \qquad l' = (\lambda', \sigma')$

$$f_{ll'} = < l \mid f \mid l' > = < \lambda, \sigma \mid f \mid \lambda', \sigma' > = < \sigma \mid \int d^3 r \varphi_\lambda^*(\vec{r}) f(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}) \varphi_{\lambda'}(\vec{r}) \mid \sigma' >$$

$$f_{ll'} = \int d^3 r \varphi_\lambda^*(\vec{r}) < \sigma \mid f(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}) \mid \sigma' > \varphi_{\lambda'}(\vec{r})$$

- Cas le plus général $$F = \sum_{ll'} f_{ll'} C_l^+ C_{l'}$$
- Avec
- $$f_{ll'} = < l \mid f \mid l' >$$
- Où

$$l = (\lambda, \sigma) \qquad l' = (\lambda', \sigma')$$

$$f_{ll'} = < l \mid f \mid l' > = < \lambda, \sigma \mid f \mid \lambda', \sigma' > = < \sigma \mid \int d^3r \varphi_\lambda^*(\vec{r}) f(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}) \varphi_{\lambda'}(\vec{r}) \mid \sigma' >$$

$$f_{ll'} = \int d^3r \varphi_\lambda^*(\vec{r}) < \sigma \mid f(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}) \mid \sigma' > \varphi_{\lambda'}(\vec{r})$$

On peut exprimer F en fonction des opérateurs champs (exercice)

- Cas le plus général $$F = \sum_{ll'} f_{ll'} C_l^+ C_{l'}$$
- Avec
- $$f_{ll'} =< l \mid f \mid l' >$$
- Où

$$l = (\lambda, \sigma) \qquad l' = (\lambda', \sigma')$$

$$f_{ll'} =< l \mid f \mid l' >=< \lambda, \sigma \mid f \mid \lambda', \sigma' >=< \sigma \mid \int d^3 r \varphi_\lambda^*(\vec{r}) f(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}) \varphi_{\lambda'}(\vec{r}) \mid \sigma' >$$

$$f_{ll'} = \int d^3 r \varphi_\lambda^*(\vec{r}) < \sigma \mid f(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}) \mid \sigma' > \varphi_{\lambda'}(\vec{r})$$

On peut exprimer F en fonction des opérateurs champs

$$F = \sum_{\sigma\sigma'} c_{\lambda\sigma}^+ C_{\lambda'\sigma'} \int d^3 r \varphi_\lambda^*(\vec{r}) < \sigma \mid f(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}) \mid \sigma' > \varphi_{\lambda'}(\vec{r})$$

Et en utilisant : $$\Psi_\sigma^+(\vec{r}) = \sum_\lambda \varphi_\lambda^*(\vec{r}) C_{\lambda\sigma}^+ \qquad \Psi_{\sigma'}(\vec{r}) = \sum_{\lambda'} C_{\lambda'\sigma'} \varphi_{\lambda'}(\vec{r})$$

$$F = \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3 r \Psi_\sigma^*(\vec{r}) < \sigma \mid f(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}) \mid \sigma' > \Psi_{\sigma'}(\vec{r})$$

Cas d'un opérateur décrivant une interaction à deux corps

$$V = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} v(\vec{r_i},\vec{r_j})$$

Ne dépend que de r

On écrit $$v(\vec{r_i},\vec{r_j}) = \int d^3r \int d^3r' v(\vec{r},\vec{r'})\delta(\vec{r}-\vec{r_i})\delta(\vec{r'}-\vec{r_j})$$

$$V = \frac{1}{2}\int d^3r \int d^3r' v(\vec{r},\vec{r'})\sum_{i\neq j}\delta(\vec{r}-\vec{r_i})\delta(\vec{r'}-\vec{r_j})$$

Soit la densité volumique de particules au point r : $$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N}\delta(\vec{r}-\vec{r_i})$$

$$\sum_{i\neq j}\delta(\vec{r}-\vec{r_i})\delta(\vec{r'}-\vec{r_j}) = \sum_{ij}\delta(\vec{r}-\vec{r_i})\delta(\vec{r'}-\vec{r_j}) - \sum_{i}\delta(\vec{r}-\vec{r_i})\delta(\vec{r'}-\vec{r_i})$$

$$= \sum_{ij}\delta(\vec{r}-\vec{r_i})\delta(\vec{r'}-\vec{r_j}) - \sum_{i}\delta(\vec{r}-\vec{r_i})\delta(\vec{r'}-\vec{r}) = \rho(\vec{r})\rho(\vec{r'}) - \rho(\vec{r})\delta(\vec{r}-\vec{r'})$$

$$V = \frac{1}{2}\int d^3r \int d^3r' v(\vec{r},\vec{r'})(\rho(\vec{r})\rho(\vec{r'}) - \rho(\vec{r})\delta(\vec{r}-\vec{r'}))$$

Ceci est valable en « 1ère quantification »

Expression correspondante en SQ

$$V_{SQ} = \frac{1}{2}\int d^3r \int d^3r' v(\vec{r},\vec{r'})[\rho_{SQ}(\vec{r})\rho_{SQ}(\vec{r'}) - \rho_{SQ}(\vec{r})\delta(\vec{r}-\vec{r'})]$$

où $$\rho_{SQ}(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r})\Psi_{\sigma}(\vec{r})$$

$$\rho_{SQ}(\vec{r})\rho_{SQ}(\vec{r'}) - \rho_{SQ}(\vec{r})\delta(\vec{r}-\vec{r'}) = ?$$

Expression correspondante en SQ

$$V_{SQ} = \frac{1}{2}\int d^3r \int d^3r' v(\vec{r},\vec{r'})[\rho_{SQ}(\vec{r})\rho_{SQ}(\vec{r'}) - \rho_{SQ}(\vec{r})\delta(\vec{r}-\vec{r'})]$$

où $$\rho_{SQ}(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r})\Psi_{\sigma}(\vec{r})$$

$$\rho_{SQ}(\vec{r})\rho_{SQ}(\vec{r'}) - \rho_{SQ}(\vec{r})\delta(\vec{r}-\vec{r'}) = \sum_{\sigma}\sum_{\sigma'} \Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r})\Psi_{\sigma}(\vec{r})\Psi_{\sigma'}^{+}(\vec{r'})\Psi_{\sigma'}(\vec{r'}) - \delta(\vec{r}-\vec{r'})\sum_{\sigma}\Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r})\Psi_{\sigma}(\vec{r})$$

Expression correspondante en SQ

$$V_{SQ} = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' v(\vec{r}, \vec{r'}) [\rho_{SQ}(\vec{r}) \rho_{SQ}(\vec{r'}) - \rho_{SQ}(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r'})]$$

où $\rho_{SQ}(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r}) \Psi_{\sigma}(\vec{r})$

$$\begin{aligned}
\rho_{SQ}(\vec{r}) \rho_{SQ}(\vec{r'}) - \rho_{SQ}(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r'}) &= \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r}) \Psi_{\sigma}(\vec{r}) \Psi_{\sigma'}^{+}(\vec{r'}) \Psi_{\sigma'}(\vec{r'}) - \delta(\vec{r} - \vec{r'}) \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r}) \Psi_{\sigma}(\vec{r}) \\
&= \sum_{\sigma\sigma'} \Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r}) (\delta(\vec{r} - \vec{r'}) \delta_{\sigma\sigma'} - \Psi_{\sigma'}^{+}(\vec{r'}) \Psi_{\sigma}(\vec{r})) \Psi_{\sigma'}(\vec{r'}) - \delta(\vec{r} - \vec{r'}) \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r}) \Psi_{\sigma}(\vec{r}) \\
&= -\sum_{\sigma\sigma'} \Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r}) \Psi_{\sigma'}^{+}(\vec{r'}) \Psi_{\sigma}(\vec{r}) \Psi_{\sigma'}(\vec{r'}) = \sum_{\sigma\sigma'} \Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r}) \Psi_{\sigma'}^{+}(\vec{r'}) \Psi_{\sigma'}(\vec{r'}) \Psi_{\sigma}(\vec{r})
\end{aligned}$$

Ce qui donne : $$V_{SQ} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r \int d^3r' \Psi_{\sigma}^{+}(\vec{r}) \Psi_{\sigma'}^{+}(\vec{r'}) v(\vec{r}, \vec{r'}) \Psi_{\sigma'}(\vec{r'}) \Psi_{\sigma}(\vec{r})$$

Attention à l'ordre si V contient des termes différentiels !

Expression correspondante en SQ
en fonction des opérateurs C et C+

On considère une base orthonormée complète de fonctions d'onde orbitales :

$$\Psi_\sigma(\vec{r}) = \sum_\lambda \varphi_\lambda(\vec{r}) C_{\lambda\sigma} \qquad \Psi_{\sigma'}(\vec{r'}) = \sum_\lambda \varphi_\lambda(\vec{r'}) C_{\lambda\sigma'}$$

$$\Psi_\sigma^+(\vec{r}) = \sum_\lambda \varphi_\lambda^*(\vec{r}) C_{\lambda\sigma}^+ \qquad \Psi_{\sigma'}^+(\vec{r'}) = \sum_\lambda \varphi_\lambda^*(\vec{r'}) C_{\lambda\sigma'}^+$$

Expression correspondante en SQ en fonction des opérateurs C et C+

On considère une base orthonormée complète de fonctions d'onde orbitales :

$$\Psi_\sigma(\vec{r}) = \sum_\lambda \varphi_\lambda(\vec{r}) C_{\lambda\sigma} \qquad \Psi_{\sigma'}(\vec{r'}) = \sum_\lambda \varphi_\lambda(\vec{r'}) C_{\lambda\sigma'}$$

$$\Psi^+_\sigma(\vec{r}) = \sum_\lambda \varphi^*_\lambda(\vec{r}) C^+_{\lambda\sigma} \qquad \Psi^+_{\sigma'}(\vec{r'}) = \sum_\lambda \varphi^*_\lambda(\vec{r'}) C^+_{\lambda\sigma'}$$

$$V_{sq} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} C^+_{\lambda_4\sigma} C^+_{\lambda_3\sigma'} C_{\lambda_2\sigma'} C_{\lambda_1\sigma} \int d^3r \int d^3r' \varphi^*_{\lambda_4}(\vec{r}) \varphi^*_{\lambda_3}(\vec{r'}) v(\vec{r}, \vec{r'}) \varphi_{\lambda_2}(\vec{r'}) \varphi_{\lambda_1}(\vec{r})$$

$$V_{sq} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} v_{\lambda_4\lambda_3\lambda_2\lambda_1} C^+_{\lambda_4\sigma} C^+_{\lambda_3\sigma'} C_{\lambda_2\sigma'} C_{\lambda_1\sigma}$$

$$v_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} = \int d^3r \int d^3r' \varphi^*_{\lambda_4}(\vec{r}) \varphi^*_{\lambda_3}(\vec{r'}) v(\vec{r}, \vec{r'}) \varphi_{\lambda_2}(\vec{r'}) \varphi_{\lambda_1}(\vec{r})$$

Ici le spin reste inchangé car on a supposé v indépendant de s

Généralisation

Si F est un opérateur à deux corps dépendant à priori de r, p et s :

$$F_{sq} = \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} f_{l_4 l_3 l_2 l_1} C^+_{l_4} C^+_{l_3} C_{l_2} C_{l_1}$$

où $l_i = (\lambda_i, \sigma_i)$

En fonction des opérateurs champ, ceci peut s'écrire :

$$F = \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4} \int d^3r \int d^3r' \Psi^*_{\sigma_4}(\vec{r}) \Psi^*_{\sigma_3}(\vec{r'}) < \sigma_4 \sigma_3 \mid f(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}) \mid \sigma_2 \sigma_1 > \Psi_{\sigma_2}(\vec{r}) \Psi_{\sigma_1}(\vec{r})$$

Cas particulier

- Potentiel ne dépendant que r-r' $$V = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} v(\vec{r_i} - \vec{r_j})$$

Base de fonctions d'onde orbitales = fonctions de Bloch $$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}$$

$$v_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}} = \frac{1}{\Omega^2}\int d^3r \int d^3r' e^{-i(\vec{k_4}.\vec{r})} e^{-i(\vec{k_3}.\vec{r'})} v(\vec{r'} - \vec{r'}) e^{i(\vec{k_2}.\vec{r'})} e^{i(\vec{k_1}.\vec{r})}$$

On change la variable r' en r ''=r-r'

Cas particulier

- Potentiel ne dépendant que r-r'

$$V = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} v(\vec{r_i} - \vec{r_j})$$

Base de fonctions d'onde orbitales = fonctions de Bloch

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}$$

$$v_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}} = \frac{1}{\Omega^2}\int d^3r \int d^3r' e^{-i(\vec{k_4}.\vec{r})} e^{-i(\vec{k_3}.\vec{r'})} v(\vec{r'} - \vec{r'}) e^{i(\vec{k_2}.\vec{r'})} e^{i(\vec{k_1}.\vec{r})}$$

On change la variable r' en r ''=r-r'

$$v_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}} = \frac{1}{\Omega}\int d^3r'' v(\vec{r''}) e^{-i(\vec{k_3}-\vec{k_2}).\vec{r''}} \frac{1}{\Omega}\int d^3r e^{i(\vec{k_1}+\vec{k_2}-\vec{k_3}-\vec{k_4}).\vec{r}}$$

$$v_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}} = \widetilde{v}(\vec{k_3} - \vec{k_2})\delta_{\vec{k_1}+\vec{k_2},\vec{k_3}+\vec{k_4}}$$

$$\widetilde{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\Omega}\int d^3r v(\vec{r}) e^{i\vec{k}.\vec{r}}$$

$$\vec{q} = \vec{k_3} - \vec{k_2} = \vec{k_1} - \vec{k_4}$$

$$V_{sq} = \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{q}} \widetilde{v}(\vec{q}) C^{+}_{\vec{k_1}-\vec{q},\sigma} C^{+}_{\vec{k_2}+\vec{q},\sigma'} C_{\vec{k_2}\sigma'} C_{\vec{k_1}\sigma}$$

Cas particulier

- Potentiel ne dépendant que r-r' $V = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} v(\vec{r_i} - \vec{r_j})$

Base de fonctions d'onde orbitales = fonctions de Bloch $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}$

$$v_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}} = \frac{1}{\Omega^2}\int d^3r \int d^3r' e^{-i(\vec{k_4}.\vec{r})} e^{-i(\vec{k_3}.\vec{r'})} v(\vec{r'} - \vec{r'}) e^{i(\vec{k_2}.\vec{r'})} e^{i(\vec{k_1}.\vec{r})}$$

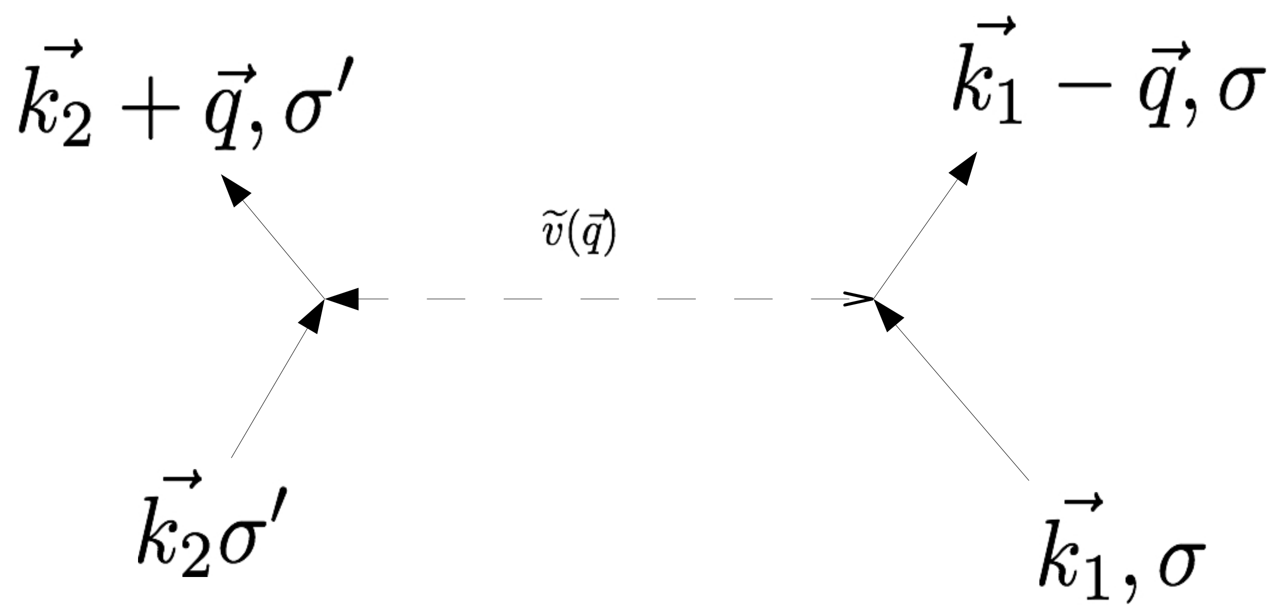
On change la variable r' en r ''=r-r'

$$v_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}} = \frac{1}{\Omega}\int d^3r'' v(\vec{r''}) e^{-i(\vec{k_3}-\vec{k_2}).\vec{r''}} \frac{1}{\Omega}\int d^3r e^{i(\vec{k_1}+\vec{k_2}-\vec{k_3}-\vec{k_4}).\vec{r}}$$

$$v_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}} = \widetilde{v}(\vec{k_3} - \vec{k_2})\delta_{\vec{k_1}+\vec{k_2},\vec{k_3}+\vec{k_4}}$$

$$\widetilde{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\Omega}\int d^3r v(\vec{r}) e^{i\vec{k}.\vec{r}} \qquad \vec{q} = \vec{k_3} - \vec{k_2} = \vec{k_1} - \vec{k_4}$$

$$V_{sq} = \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{q}} \widetilde{v}(\vec{q}) C^+_{\vec{k_1}-\vec{q},\sigma} C^+_{\vec{k_2}+\vec{q},\sigma'} C_{\vec{k_2}\sigma'} C_{\vec{k_1}\sigma}$$



$$V_{sq}=\frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{q}}\widetilde{v}(\vec{q})C^{+}_{\vec{k_1}-\vec{q},\sigma}C^{+}_{\vec{k_2}+\vec{q},\sigma'}C_{\vec{k_2}\sigma'}C_{\vec{k_1}\sigma}$$

Répulsion coulombienne

$$v(\vec{r}-\vec{r'})=\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{\mid\vec{r}-\vec{r'}\mid}$$

$$\widetilde{v}(\vec{q})=\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\Omega}\int\frac{e^{i\vec{q}.\vec{r}}}{\mid\vec{r}-\vec{r'}\mid}d^3r=\frac{e^2}{\epsilon_0\Omega q^2}$$

Seconde quantification pour les systèmes de bosons

- Les fonctions d'onde sont symétriques pour l'échange de bosons

$$a_l^+ a_{l'}^+ - a_{l'}^+ a_l^+ = [a_l^+, a_{l'}^+] = 0$$

$$a_l a_{l'} - a_{l'} a_l = [a_l, a_{l'}] = 0$$

$$(a_l)^2 = (a_l^+)^2 \neq 0$$

$$n_l = 0, 1, \ldots, \infty$$

$$a_l^+ \mid n_1, n_2, \ldots, n_l, .., n_\infty >= \sqrt{1 + n_l} \mid n_1, n_2, \ldots, n_l + 1, .., n_\infty >$$

$$a_l \mid n_1, n_2, \ldots, n_l, .., n_\infty >= \sqrt{n_l} \mid n_1, n_2, \ldots, n_l - 1, .., n_\infty >$$

Seconde quantification pour les systèmes de bosons

- Les fonctions d'onde sont <u>symétriques</u> pour l'échange de bosons

$$a_l^+ a_{l'}^+ - a_{l'}^+ a_l^+ = [a_l^+, a_{l'}^+] = 0$$

$$a_l a_{l'} - a_{l'} a_l = [a_l, a_{l'}] = 0$$

$$(a_l)^2 = (a_l^+)^2 \neq 0$$

$$n_l = 0, 1, \ldots, \infty$$

$$a_l^+ \mid n_1, n_2, \ldots, n_l, .., n_\infty >= \sqrt{1 + n_l} \mid n_1, n_2, \ldots, n_l + 1, .., n_\infty >$$

$$a_l \mid n_1, n_2, \ldots, n_l, .., n_\infty >= \sqrt{n_l} \mid n_1, n_2, \ldots, n_l - 1, .., n_\infty >$$

Références

- Mahan, G.D. « Many Particle Physics. » New York: Springer (1981)
- Dirac, P. A. M. (1927). "The Quantum Theory of the Emission and Absorption of Radiation". Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 114 (767)
- V. Fock, Z. Phys. 75 (1932), 622-647
- M.C. Reed, B. Simon, "Methods of Modern Mathematical Physics, Volume II", Academic Press (1975)
- Cours de DEA de J. Labbé (1991)