Solution d'examen de Problème à N-corps
1^{ere} année Master physique théorique

Questions de cours

6pt

- Dans des systèmes en équilibre

$$|\psi(t \longrightarrow \infty)\rangle = e^{i\vartheta}|\psi(t \longrightarrow -\infty)\rangle$$

  mais hors équilibre cette relation ne tient plus.**2pt**

- Il manque dans la théorie de Hartree-Fock les corrélations et l'origine du magnétisme est le terme d'échange **1pt**

- **1pt** Pour deux particules de spin 1/2 (fermions) l'état fondamental est

$$\Psi_F(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_1^{\uparrow}(r_1)\varphi_1^{\downarrow}(r_2) - \varphi_1^{\downarrow}(r_1)\varphi_1^{\uparrow}(r_2)\right)$$

- **1pt** Pour deux particules de spin 0 (bosons) l'état fondamental est

$$\Psi_B(r_1, r_2) = \varphi_1(r_1)\varphi_1(r_2)$$

- **1pt** l'état éxcité pour deux bosons est

$$\Psi_B^e(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_1(r_1)\varphi_2(r_2) + \varphi_2(r_1)\varphi_1(r_2)\right)$$

Exercice 1 (7 Points):
1) pour un gaz d'électrons libres

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

dans la limite thermodynamique

$$\sum_k \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int d^d k = \frac{v S_d}{(2\pi)^d} \int k^{d-1} dk$$

Energie totale **(2pts)**

$$E_{tot} = \sum_{occ} \varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{m} \int_0^{k_F} k^2 d^d k$$

$$E_{tot} = \frac{S_d \hbar^2}{m} \int_0^{k_F} k^{d+1} dk = \frac{S_d \hbar^2}{m} \frac{k_F^{d+2}}{d+2}$$

densité d'états **(2pts)**

$$D(E) = \frac{2}{V}\sum_k \delta(E-\varepsilon_k) = \frac{2S_d}{(2\pi)^d}\int\limits_0^\infty k^{d-1}\delta(E-\frac{\hbar^2k^2}{2m})$$

on pose $y = \dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ on obtient

$$D(E) = \frac{S_d}{(2\pi)^d}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{d}{2}} E^{\frac{d}{2}-1}$$

2) (3 pts) La fonction de corrélation des paires $\langle g(r)\rangle$ est définie

$$\langle g(r)\rangle = \frac{1}{N^2}\sum_{ij}\left(1-\delta_{\sigma_1\sigma_2}e^{i(\vec{k}_i-\vec{k}_j).\vec{r}}\right) = 1-\frac{\delta_{\sigma_1\sigma_2}}{N^2}\sum_{ij}e^{i(\vec{k}_i-\vec{k}_j).\vec{r}}$$

$$\langle g(r)\rangle = 1-\frac{\delta_{\sigma_1\sigma_2}}{N^2}\sum_i e^{i\vec{k}_i.\vec{r}}\sum_j e^{-i\vec{k}_j.\vec{r}} = 1-\delta_{\sigma_1\sigma_2}\left(\frac{\sum\limits_i e^{i\vec{k}_i.\vec{r}}}{N}\right)^2$$

On doit calculer initialement

$$\Gamma = \sum_i e^{i\vec{k}_i.\vec{r}} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k e^{i\vec{k}.\vec{r}}$$

Dans les coordonnées sphériques

$$\Gamma = \frac{2\pi}{(2\pi)^3}\int k^2dk\sin\vartheta e^{ik.r\cos\vartheta}d\vartheta$$

si $\mu = \cos\vartheta$, $d\mu = -\sin\vartheta d\vartheta$

$$\Gamma = -\frac{2\pi}{(2\pi)^3}\int k^2dke^{ik.r\mu}d\mu = -\frac{2\pi}{ir(2\pi)^3}\int kdk\left[e^{ik.r\mu}\right]_{-1}^{1}$$

$$\Gamma = -\frac{4\pi}{r(2\pi)^3}\int\limits_0^{k_F} k\sin(kr)dk$$

si on met $y = kr$

$$\Gamma = -\frac{4\pi}{r^3(2\pi)^3}\int\limits_0^{k_Fr} y\sin(y)dy$$

$$\Gamma = \frac{4\pi}{r^3(2\pi)^3}\left[\sin(y)-y\cos(y)\right]_0^{k_Fr}$$

$$\Gamma = \frac{4\pi k_F^3}{(2\pi)^3}\left(\frac{\sin(k_Fr)-k_Fr\cos(k_Fr)}{k_F^3r^3}\right)$$

si on utilise $k_F^3 = 6\pi^2N$ on aura :

$$\Gamma = 3N\left(\frac{\sin(k_Fr)-k_Fr\cos(k_Fr)}{k_F^3r^3}\right) = NF(k_Fr)$$

Donc

$$\langle g(r)\rangle = 1-\left[F(k_Fr)\right]^2$$

Exercice 2 (7 Points):
1) 3 points Si on considère l'hamiltonien

$$\hat{H} = \int \psi^\dagger(x,t)h(x,t)\psi(x,t)d^3x = \int \psi^\dagger(x,t)\left[h_0(x) + V(x,t)\right]\psi(x,t)d^3x$$

Dans la représentation de Heisenberg

$$i\partial_t O(t) = [O(t), H]$$

donc

$$i\partial_t\psi(x,t) = [\psi(x,t), H]$$

$$i\partial_t\psi(x,t) = \int \left[\psi(x,t), \psi^\dagger(x',t)h(x',t)\psi(x',t)\right] d^3x'$$

$$\begin{aligned} i\partial_t\psi(x,t) = &\int \left\{\psi(x,t), \psi^\dagger(x',t)\right\} h(x',t)\psi(x',t)d^3x' \\ &- \int \psi^\dagger(x',t)h(x',t)\left\{\psi(x,t), \psi(x',t)\right\} d^3x' \end{aligned}$$

mais comme

$$\left\{\psi(x,t), \psi^\dagger(x',t)\right\} = \delta(x - x') \text{ et } \left\{\psi(x,t), \psi(x',t)\right\} = 0$$

on obtient

$$i\partial_t\psi(x,t) = \int \delta(x - x')h(x',t)\psi(x',t)d^3x' = h(x,t)\psi(x,t)$$

Si on définit la fonction de Green

$$\mathbf{G}(x,t,t') = -i\langle|\mathbf{T}\psi(x,t)\psi^\dagger(x,t')|\rangle$$

$$\mathbf{G}(x,t,t') = -i\theta(t-t')\langle|\psi(x,t)\psi^\dagger(x,t')|\rangle + i\theta(t'-t)\langle|\psi^\dagger(x,t')\psi(x,t)|\rangle$$

donc

$$\begin{aligned} i\partial_t\mathbf{G}(x,t,t') = &(\partial_t\theta(t-t'))\langle|\psi(x,t)\psi^\dagger(x,t')|\rangle + -i\theta(t-t')\langle|\partial_t\psi(x,t)\psi^\dagger(x,t')|\rangle \\ &- (\partial_t\theta(t'-t))\langle|\psi^\dagger(x,t')\psi(x,t)|\rangle - \theta(t'-t)\langle|\psi^\dagger(x,t')\partial_t\psi(x,t)|\rangle \end{aligned}$$

mais on a

$$\partial_t\theta(t) = \delta(t)$$

et on remplace $i\partial_t\psi$ on obtient

$$\begin{aligned} i\partial_t\mathbf{G}(x,t,t') = &\delta(t-t')\left[\langle|\psi(x,t)\psi^\dagger(x,t')|\rangle - \langle|\psi^\dagger(x,t')\psi(x,t)|\rangle\right] \\ &+ h(x,t)\left[-i\theta(t-t')\langle|\psi(x,t)\psi^\dagger(x,t')|\rangle + i\theta(t'-t)\langle|\psi^\dagger(x,t')\psi(x,t)|\rangle\right] \end{aligned}$$

$$i\partial_t\mathbf{G}(x,t,t') = \delta(t-t') + h(x,t)\mathbf{G}(x,t,t')$$

2) 3 points Comme

$$\mathbf{G}(x,\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t}\mathbf{G}(x,t,t')dt \quad \text{et} \quad \mathbf{G}(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t}\mathbf{G}(x,\omega)d\omega$$

on a donc

$$i\partial_t \mathbf{G}(x,t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \omega e^{-i\omega t}\mathbf{G}(x,\omega)d\omega \qquad \delta(t) = \int e^{i\omega t}d\omega$$

et

$$i\partial_t \mathbf{G}(x,t) = \left[\int e^{-i\omega t}d\omega\right] + h(x,t)\mathbf{G}(x,t) = \int e^{-i\omega t}\left[1 + h_0(x)\mathbf{G}(x,\omega)\right]d\omega + V(x,t)\mathbf{G}(x,t)$$

Mais on sait que le transformée de Fourier de convolution égale au produit des transformées de Fourier, ç-a-d, si on met

$$f(x,t) = V(x,t)\mathbf{G}(x,t) \quad \text{si } \widetilde{V}(x,\omega) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t}\mathbf{V}(x,t)dt$$

$$f(x,t) = \int e^{-i\omega t}\hat{f}(x,\omega)$$

et

$$\hat{f}(x,\omega) = \int \widetilde{V}(x,\omega-\omega')\mathbf{G}(x,\omega')d\omega'$$

En regroupant tous les termes

$$\int e^{-i\omega t}\left[(\omega - h_0(x))\,\mathbf{G}(x,\omega) - \int \widetilde{V}(x,\omega-\omega')\mathbf{G}(x,\omega')d\omega' - 1\right] = 0$$

On obtient finalement :

$$[\omega - h_0(x)]\,\mathbf{G}(x,\omega) = 1 + \int \widetilde{V}(x,\omega-\omega')\mathbf{G}(x,\omega')d\omega'$$

3) 1 points On obtient dans le cas $V(x,t) = v(x)$ ofinalement :

$$[\omega - h_0(x) - v(x)]\,\mathbf{G}(x,\omega) = 1$$

Dr N. Baadji