Mécanique quantique I

Correction Séance d'exercices n°10: Théorie des perturbations

Exercice 1

La solution exacte du puits infini est connue. En effet, les énergies et les fonctions propres sont :

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{8mL^2}n^2 \qquad \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{2L}\right)$$

En utilisant la théorie des perturbations, l'énergie du n-ieme niveau excité sera où

$$\begin{aligned} E &= E_n + E_n^{(1)} \\ E_n^{(1)} &= \langle\psi_n|V_p(x)|\psi_n = \frac{1}{L}\int_0^{2L}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{2L}\right)V_p(x)dx \\ &= \frac{\lambda V_0}{L}\int_0^{2L}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{2L}\right)\delta(x-L)dx = \frac{\lambda V_0}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right) \end{aligned}$$

Exercice 2

1. La matrice H peut s'écrire de la manière suivante:

$$H = H_0 + H_p = E_0\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&8&0&0\\0&0&3&0\\0&0&0&7\end{pmatrix} + E_0\begin{pmatrix}\lambda&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&-2\lambda\\0&0&-2\lambda&0\end{pmatrix}$$

Puisque H_0 est diagonal, ses valeurs propres sont simplement $E_0, 8E_0, 3E_0$ et $7E_0$. Les vecteurs propres eux sont

$$|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix} \qquad |\phi_2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix} \qquad |\phi_3\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix} \qquad |\phi_4\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

2. Pour trouver de façon exacte les énergies de H, il suffit de trouver ses valeurs propres. Pour cela, on résout l'équation

$$\begin{aligned} \det(H-\eta E_0 I) &= 0 \\ (1+\lambda-\eta)E_0\,(8-\eta)E_0\left((3-\eta)E_0\,(7-\eta)E_0) - 4\lambda^2E_0^2\right) &= 0 \\ (1+\lambda-\eta)(8-\eta)(\eta^2-10\eta+21-4\lambda^2) &= 0 \end{aligned}$$

http://quic.ulb.ac.be
Evgueni.Karpov@ulb.ac.be, ahertz@ulb.ac.be

Les racines de la dernières parenthèse sont

$$\eta = \frac{10 \pm \sqrt{100 - 4(21 - 4\lambda^2)}}{2} = 5 \pm 2\sqrt{1+\lambda^2}$$

et les valeurs propres sont donc

$$\begin{aligned}
E_1 &= (1+\lambda)E_0 \\
E_2 &= 8E_0 \\
E_3 &= (5 - 2\sqrt{1+\lambda^2})E_0 \approx (3-\lambda^2)E_0 \\
E_4 &= (5 + 2\sqrt{1+\lambda^2})E_0 \approx (7+\lambda^2)E_0
\end{aligned}$$

où on a utilisé le fait que $\sqrt{1+\lambda^2} \approx 1 + \lambda^2/2$.

3. Au premier ordre, la correction de l'énergie se calcule de la façon suivante:

$$E_1^{(1)} = \langle \phi_1 | H_p | \phi_1 \rangle = E_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\lambda \\ 0 & 0 & -2\lambda & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda E_0$$

$$E_2^{(1)} = \langle \phi_2 | H_p | \phi_2 \rangle = E_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\lambda \\ 0 & 0 & -2\lambda & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$E_3^{(1)} = \langle \phi_3 | H_p | \phi_3 \rangle = E_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\lambda \\ 0 & 0 & -2\lambda & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$E_4^{(1)} = \langle \phi_4 | H_p | \phi_4 \rangle = E_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\lambda \\ 0 & 0 & -2\lambda & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

Notez que la formule a utiliser est différente si on avait des énergies dégénérées. Au deuxième ordre maintenant, on trouve les corrections ainsi :

$$E_1^{(2)} = \sum_{m=2,3,4} \frac{\left| \langle \phi_m | H_p | \phi_1 \rangle \right|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} = 0$$

car $\langle \phi_m | H_p | \phi_1 \rangle = 0$ pour $m = 2, 3, 4$. De la même façon,

$$E_2^{(2)} = \sum_{m=1,3,4} \frac{\left| \langle \phi_m | H_p | \phi_2 \rangle \right|^2}{E_2^{(0)} - E_m^{(0)}} = 0$$

car $\langle \phi_m | H_p | \phi_2 \rangle = 0$ pour $m = 1, 3, 4$. Par contre,

$$E_3^{(2)} = \sum_{m=1,2,4} \frac{\left| \langle \phi_m | H_p | \phi_3 \rangle \right|^2}{E_3^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{\left| \langle \phi_4 | H_p | \phi_3 \rangle \right|^2}{E_3^{(0)} - E_4^{(0)}} = \frac{(-2\lambda E_0)^2}{(3-7)E_0} = -\lambda^2 E_0$$

$$E_4^{(2)} = \sum_{m=1,2,3} \frac{\left|\langle\phi_m|H_p|\phi_4\rangle\right|^2}{E_4^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{\left|\langle\phi_3|H_p|\phi_4\rangle\right|^2}{E_4^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{(-2\lambda E_0)^2}{(7-3)E_0} = \lambda^2 E_0$$

En regroupant tous nos résultats on trouve

$$\begin{aligned}
E_1 &= E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} = (1+\lambda)E_0 \\
E_2 &= E_2^{(0)} + E_2^{(1)} + E_2^{(2)} = 8E_0 \\
E_3 &= E_3^{(0)} + E_3^{(1)} + E_3^{(2)} = (3-\lambda^2)E_0 \\
E_4 &= E_4^{(0)} + E_4^{(1)} + E_4^{(2)} = (7+\lambda^2)E_0
\end{aligned}$$

On remarque que ces valeurs sont bien les mêmes que celles trouvées précédemment. Il reste maintenant simplement à trouver les vecteurs propres

$$|\phi_1^{(1)}\rangle = \sum_{m=2,3,4} \frac{\langle\phi_m|H_p|\phi_1\rangle}{E_m^{(0)} - E_1^{(0)}} |\phi_m\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

car $\langle\phi_m|H_p|\phi_1\rangle = 0$ pour $m = 2,3,4$. De la même façon,

$$|\phi_2^{(1)}\rangle = \sum_{m=1,3,4} \frac{\langle\phi_m|H_p|\phi_2\rangle}{E_m^{(0)} - E_2^{(0)}} |\phi_m\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Par contre,

$$|\phi_3^{(1)}\rangle = \sum_{m=1,2,4} \frac{\langle\phi_m|H_p|\phi_3\rangle}{E_m^{(0)} - E_3^{(0)}} |\phi_m\rangle = \frac{\langle\phi_4|H_p|\phi_3\rangle}{E_4^{(0)} - E_3^{(0)}} |\phi_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\lambda/2 \end{pmatrix}$$

$$|\phi_4^{(1)}\rangle = \sum_{m=1,2,3} \frac{\langle\phi_m|H_p|\phi_4\rangle}{E_m^{(0)} - E_4^{(0)}} |\phi_m\rangle = \frac{\langle\phi_3|H_p|\phi_4\rangle}{E_3^{(0)} - E_4^{(0)}} |\phi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \lambda/2 \end{pmatrix}$$

Ainis, en regroupant tous nos résultats on trouve

$$
\begin{aligned}
|\phi_1\rangle &= |\phi_1^{(0)}\rangle + |\phi_1^{(1)}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
|\phi_2\rangle &= |\phi_2^{(0)}\rangle + |\phi_2^{(1)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
|\phi_3\rangle &= |\phi_3^{(0)}\rangle + |\phi_3^{(1)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -\lambda/2 \end{pmatrix} \\
|\phi_4\rangle &= |\phi_4^{(0)}\rangle + |\phi_4^{(1)}\rangle \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \lambda/2 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Exercice 3

1. Définissons l'état

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|\phi_n\rangle$$

où

$$|\phi_1\rangle = |{+}{+}\rangle \qquad |\phi_2\rangle = |{-}{-}\rangle \qquad |\phi_3\rangle = |{+}{-}\rangle \qquad |\phi_4\rangle = |{-}{+}\rangle$$

On note ici que les $|\phi_n\rangle$ sont les états propres de l'Hamiltonien non perturbé H_0. On supposera ici qu'il est indépendant du temps.

Alors, l'évolution des coefficient c_n est donnée par

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t) + \sum_k W_{nk} c_k(t)$$

En effet,

$$c_n(t) = \langle \phi_n |\, \psi(t) \rangle$$

et donc

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{d}{dt}\left|\psi(t)\right\rangle &= H(t)\left|\psi(t)\right\rangle \\
&= (H_0+W(t))\left|\psi(t)\right\rangle \\
i\hbar\frac{d}{dt}\Big(\sum_k\left|\phi_k\right\rangle\left\langle\phi_k\right|\Big)\left|\psi(t)\right\rangle &= (H_0+W(t))\Big(\sum_k\left|\phi_k\right\rangle\left\langle\phi_k\right|\Big)\left|\psi(t)\right\rangle \\
i\hbar\frac{d}{dt}\sum_k\left|\phi_k\right\rangle c_k(t) &= (H_0+W(t))\sum_k\left|\phi_k\right\rangle c_k(t) \\
\left\langle\phi_n\right| i\hbar\frac{d}{dt}\sum_k\left|\phi_k\right\rangle c_k(t) &= \left\langle\phi_n\right|(H_0+W(t))\sum_k\left|\phi_k\right\rangle c_k(t) \\
i\hbar\frac{d}{dt}c_n(t) &= \sum_k\Big(\left\langle\phi_n\right|H_0\left|\phi_k\right\rangle+\left\langle\phi_n\right|W(t)\left|\phi_k\right\rangle c_k(t)\Big) \\
i\hbar\frac{d}{dt}c_n(t) &= \sum_k\Big(\left\langle\phi_n\right|E_k\left|\phi_k\right\rangle+\left\langle\phi_n\right|W(t)\left|\phi_k\right\rangle c_k(t)\Big) \\
i\hbar\frac{d}{dt}c_n(t) &= E_nc_n(t)+\sum_k\left\langle\phi_n\right|W(t)\left|\phi_k\right\rangle c_k(t) \\
i\hbar\frac{d}{dt}c_n(t) &= E_nc_n(t)+\sum_k W_{nk}(t)c_k(t) \qquad (1)
\end{aligned}
$$

Dans l'équation précédente, les $W_{nk}(t)$ se calculent de la façon suivante:

$$
\begin{aligned}
W_{nk}(t) &= \left\langle\phi_n\right|W(t)\left|\phi_k\right\rangle \\
&= a(t)\left\langle\phi_n\right|S_1\cdot S_2\left|\phi_k\right\rangle \\
&= \frac{a(t)}{2}\left\langle\phi_n\right|S_{1+}S_{2-}+S_{1-}S_{2+}+2S_{1z}S_{2z}\left|\phi_k\right\rangle
\end{aligned}
$$

Sans tous les calculer, voici ici quelques exemples du calcul de ces éléments de matrice.

$$
\begin{aligned}
W_{41}(t) &= \frac{a(t)}{2}\left\langle -+\right|S_{1+}S_{2-}+S_{1-}S_{2+}+2S_{1z}S_{2z}\left|++\right\rangle \\
&= \frac{a(t)}{2}\left\langle -+\right|\left(0+0+2\frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{2}\left|++\right\rangle\right) \\
&= 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
W_{43}(t) &= \frac{a(t)}{2}\left\langle -+\right|S_{1+}S_{2-}+S_{1-}S_{2+}+2S_{1z}S_{2z}\left|+-\right\rangle \\
&= \frac{a(t)}{2}\left\langle -+\right|\left(\hbar^2\left|-+\right\rangle+0+2\frac{\hbar}{2}\Big(-\frac{\hbar}{2}\Big)\left|+-\right\rangle\right) \\
&= \frac{a(t)}{2}\hbar^2
\end{aligned}
$$

ce qui donnera au final

$$\hat{W}(t) = \hbar^2 \frac{a(t)}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & -1 \end{pmatrix}$$

En utilisant ces résultats dans l'équation de l'évolution des c_n on obtient les 4 équations différentielles suivantes:

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_1 = E_1 c_1 + \hbar^2 \frac{a(t)}{4} c_1 \tag{2}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_2 = E_2 c_2 + \hbar^2 \frac{a(t)}{4} c_2 \tag{3}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_3 = E_3 c_3 - \hbar^2 \frac{a(t)}{4} c_3 + \hbar^2 \frac{a(t)}{2} c_4 \tag{4}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_4 = E_4 c_4 - \hbar^2 \frac{a(t)}{4} c_4 + \hbar^2 \frac{a(t)}{2} c_3 \tag{5}$$

En considérant que $H = H_0 + W = 0 + a(t) S_1 \cdot S_2$ on a que

$$E_1 = E_2 = E_3 = E_4 = 0.$$

Alors, des équations (2) et (3) on tire

$$c_1 = A e^{\hbar I/4i} \qquad c_2 = B e^{\hbar I/4i} \qquad \text{où } I = \int_{-\infty}^{t} a(t')dt'$$

Remarquez bien ici que l'intégrale I dépend du temps! En additionnant les équations (4) et (5) on trouve

$$i\hbar \frac{d}{dt}(c_3 + c_4) = -\frac{\hbar^2}{4} a(t)(c_3 + c_4) + \frac{\hbar}{2} a(t)(c_3 + c_4)$$

En posant $c_3 + c_4 = X$, l'équation différentielle devient

$$i\hbar \frac{d}{dt} X = \frac{\hbar^2}{4} a(t) X \qquad \Rightarrow \qquad X = D e^{\hbar I/4i}$$

De la même façon, en soustrayant (4) à (3) et en posant $Y = c_3 - c_4$ on trouve

$$i\hbar \frac{d}{dt} Y = -\frac{3\hbar^2}{4} a(t) Y \qquad \Rightarrow \qquad \ln Y = -\frac{3\hbar}{4i} \int a(t)dt + C \qquad \Rightarrow \qquad Y = F e^{-3\hbar I/4i}$$

Pour retrouver les coefficients c_3 et c_4 il suffit d'additionner et soustraire X et Y :

$$c_3 = \frac{X+Y}{2} = \frac{1}{2}\Big(D e^{\hbar I/4i} + F e^{-3\hbar I/4i}\Big) \qquad c_4 = \frac{X-Y}{2} = \frac{1}{2}\Big(D e^{\hbar I/4i} - F e^{-3\hbar I/4i}\Big)$$

Utilisons maintenant les conditions initiales pour trouver la valeur des constantes. À $t = -\infty$, $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle = |\phi_3\rangle$. Ainsi, $c_1 = c_2 = c_4 = 0$ et $c_3 = 1$. De là on tire que

$$A = B = 0 \qquad \text{et} \qquad \begin{cases} \frac{1}{2}(D+F) = 1 \\ \frac{1}{2}(D-F) - 0 \end{cases} \qquad \Rightarrow \qquad D = F = 1$$

En résumé, l'état du système à un temps t est

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{2}\Big(e^{\hbar I/4i} + e^{-3\hbar I/4i}\Big)\,|+-\rangle + \frac{1}{2}\Big(e^{\hbar I/4i} - e^{-3\hbar I/4i}\Big)\,|-+\rangle \\
&= e^{-\hbar I/4i}\left[\frac{1}{2}\Big(e^{\hbar I/2i} + e^{-\hbar I/i}\Big)\,|+-\rangle + \frac{1}{2}\Big(e^{\hbar I/2i} - e^{-3\hbar I/2i}\Big)\,|-+\rangle\right] \\
&= e^{-\hbar I/4i}\left[\cos\left(\frac{\hbar I}{2}\right)|+-\rangle + i\sin\left(\frac{\hbar I}{2}\right)|-+\rangle\right]
\end{aligned}$$

où l'on peut négliger la phase globale.

À $t = \infty$, il suffit de remplacer t par ∞ dans l'intégrale I. On définit alors

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} a(t)dt$$

On peut alors calculer la probabilité

$$\begin{aligned}
P(+- \to -+) &= |\langle -+|\,\psi(\infty)\rangle|^2 \\
&= \left| i\sin\left(\frac{\hbar J}{2}\right)\right|^2 \\
&= \sin^2\left(\frac{\hbar J}{2}\right)
\end{aligned}$$

2. Selon la théorie des perturbation au premier ordre la correction, les coefficients évoluent comme

$$c_n(t) = b_n(t)e^{-iE_n t/\hbar} \tag{6}$$

Il faut donc trouver l'évolution des $b_n(t)$. Pour cela, on remplace (6) dans l'équation (7) et on trouve :

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{d}{dt}\left(b_n(t)e^{-iE_n t/\hbar}\right) &= E_n(t)\left(b_n(t)e^{-iE_n t/\hbar}\right) + \sum_k W_{nk}(t)\left(b_k(t)e^{-iE_k t/\hbar}\right) \\
i\hbar e^{-iE_n t/\hbar}\frac{d}{dt}\left(b_n(t)\right) + E_n(t)b_n(t)e^{-iE_n t/\hbar} &= E_n(t)b_n(t)e^{-iE_n t/\hbar} + \sum_k W_{nk}(t)\left(b_k(t)e^{-iE_k t/\hbar}\right) \\
i\hbar e^{-iE_n t/\hbar}\frac{d}{dt}\left(b_n(t)\right) &= \sum_k W_{nk}(t)\left(b_k(t)e^{-iE_k t/\hbar}\right) \\
i\hbar\frac{d}{dt}b_n(t) &= \sum_k e^{iE_n t/\hbar}e^{-iE_k t/\hbar}W_{nk}(t)b_k(t)e \\
i\hbar\frac{d}{dt}b_n^{(1)}(t) &= \sum_k e^{iw_{nk}}W_{nk}(t)b_k^{(0)}(t)
\end{aligned}$$

où $w_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}$ et

$$i\hbar\frac{d}{dt}b_n^{(0)} = E_n = 0 \qquad \Rightarrow \qquad b_n^{(0)} = \text{const} = b_n(t = -\infty) = \delta_{3n}$$

car au moment “initial” $(t = -\infty)$ notre système se trouvait dans l'êtat

$$|+,-\rangle = |\psi_3\rangle\,.$$

Ainsi

$$i\hbar\frac{d}{dt}b_4^{(1)}(t) = \sum_k e^{iw_{4k}}W_{4k}(t)\delta_{3k} = e^{iw_{43}}W_{43}(t) = e^{i\cdot 0}\frac{\hbar^2}{2}a(t) \qquad \Rightarrow \qquad b_4^{(1)} = \frac{\hbar}{2i}I$$

Alors, la probabilité devient

$$P(+- \to -+) = |b_4^{(1)}|^2 = \frac{\hbar^2}{4}J^2$$

On sait que $\sin x \approx x$ et donc $\sin^2 x \approx x^2$ quand $x \ll 1$. Alors,

$$\sin^2\left(\frac{\hbar J}{2}\right) \approx \frac{\hbar^2 J}{4} \qquad \text{si} \qquad \frac{\hbar J}{2} \ll 1 \qquad \Rightarrow \qquad \int_{-\infty}^{\infty} a(t)dt \ll \frac{2}{\hbar}.$$