

Mécanique quantique I

Correction Séance d'exercices n°9: Théorie des perturbations

Exercice 1

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

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

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

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

Exercice 2

(a) 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

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

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

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

Les racines de la dernière 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 $\sqrt{1 + \lambda^2} \approx 1 + \lambda^2/2$.

(c) 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 à utiliser est différente si on avait des énergies dégénérées.

Au deuxième ordre maintenant, on trouve les corrections ainsi :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Par contre,

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

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

Ainisi, 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

(a) Définissons l'état

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

où

$$|\phi_1\rangle = |++\rangle \quad |\phi_2\rangle = |--\rangle \quad |\phi_3\rangle = |+-\rangle \quad |\phi_4\rangle = |-+\rangle$$

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

- (b) Selon la théorie des perturbation au premier ordre la correction, les coefficients évoluent comme

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

Il faut donc trouver l'évolution des $b_n(t)$. Pour cela, on remplace (6) dans l'équation (1) et on trouve :

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

Souvenez-vous que l'on peut écrire $b_n(t) = b_n^{(0)}(t) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + \dots$. Si on remplace cette expression dans l'équation précédente, on va avoir une équation différentielle pour les termes constants, une pour ceux multipliés par λ , une autre

pour les termes multipliés par λ^2 etc. Puisqu'il y a un λ inclu dans la définition de W_{nk} , l'équation différentielle au premier ordre sera donc

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(1)}(t) = \sum_k e^{iw_{nk}t} W_{nk}(t) b_k^{(0)}(t)$$

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

À l'ordre 0, on a l'équation différentielle suivante:

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

car au moment "initial" ($t = -\infty$) notre système se trouvait dans l'état

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

Ainsi

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

Alors, la probabilité devient

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

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

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