Exercice 1 *Théorie des perturbations sur un système à 2 états*

Dans un cas suffisamment simple pour pouvoir obtenir une résolution exacte, nous appliquons la théorie des perturbations de Rayleigh-Schrödinger et de Brillouin-Wigner et comparons les résultats approchés avec les résultats exacts. Dans cet exercice, nous supposons que $\epsilon_1 < \epsilon_2$ et nous définissons $\Delta \equiv \epsilon_2 - \epsilon_1$.

1. Nous écrivons explicitement la matrice associée au hamiltonien H.

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \lambda V_{12} \\ \lambda V_{21} & \epsilon_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 \\ 0 & \epsilon_2 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 0 & V_{12} \\ V_{21} & 0 \end{pmatrix}$$

2. Comme l'opérateur V est réel et hermitien, il est donc symétrique

$$V^\dagger = V \quad \Rightarrow \quad V_{12} = V_{21}^* = V_{21} = V$$

3. Nous calculons de manière exacte le spectre de H ainsi que les états propres associés. L'équation caractéristique

$$\det(H - E\mathbb{1}) = (\epsilon_1 - E)(\epsilon_2 - E) - \lambda^2 V^2 = 0$$

conduit aux valeurs propres

$$E_\pm^{\mathrm{e}} = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{2}\right)^2 + \lambda^2 V^2},$$

c'est-à-dire

$$E_\pm^{\mathrm{e}} = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \frac{1}{2}(\epsilon_2 - \epsilon_1)\sqrt{1 + \left(\frac{2\lambda V}{\Delta}\right)^2}, \tag{1}$$

puisque nous avons supposé $\epsilon_1 < \epsilon_2$. Par définition, les états propres $|\Psi_\pm^{\mathrm{e}}\rangle = \alpha_\pm|1\rangle + \beta_\pm|2\rangle$ vérifient

$$H|\Psi_\pm^{\mathrm{e}}\rangle = E_\pm^{\mathrm{e}}|\Psi_\pm^{\mathrm{e}}\rangle, \tag{2}$$

ce qui conduit à l'équation

$$\left(\epsilon_1 - E_\pm^{\mathrm{e}}\right)\alpha_\pm + \lambda V \beta_\pm = 0$$

Le système (2) fournit une seconde équation mais le fait que $E_\pm^{\mathrm{e}}$ soit valeur propre de la matrice implique que cette équation est équivalente à la première. Dans la base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, on trouve donc

$$|\Psi_\pm^{\mathrm{e}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_\pm}} \begin{pmatrix} \lambda V \\ E_\pm^{\mathrm{e}} - \epsilon_1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

avec $N_\pm \equiv (\lambda V)^2 + (E_\pm^{\mathrm{e}} - \epsilon_1)^2$. On peut contrôler que pour $\lambda \to 0$, on a $E_\mp^{\mathrm{e}} \to \epsilon_{1,2}$ et $|\Psi_\mp^{\mathrm{e}}\rangle \to |1\rangle, |2\rangle$.

4. En utilisant le développement $\sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2}x + \mathcal{O}(x^2)$, on déduit de l'équation (1) qu'au deuxième ordre

$$E_{\pm}^{\mathrm{e}} = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \frac{1}{2}(\epsilon_2 - \epsilon_1)\left[1 + 2\left(\frac{\lambda V}{\Delta}\right)^2\right] + \mathcal{O}(\lambda^4)\ . \tag{4}$$

   Autrement dit

$$E_2^{\mathrm{e}} \equiv E_+^{\mathrm{e}} = \epsilon_2 + \frac{\lambda^2 V^2}{\Delta} + \mathcal{O}(\lambda^4) \quad \text{et} \quad E_1^{\mathrm{e}} \equiv E_-^{\mathrm{e}} = \epsilon_1 - \frac{\lambda^2 V^2}{\Delta} + \mathcal{O}(\lambda^4)$$

   Or la théorie de Rayleigh–Schrödinger étudiée en cours conduit aux valeurs propres

$$E_1^{\mathrm{rs}} = \epsilon_1 + \lambda\langle 1|V|1\rangle + \frac{|\lambda\langle 2|V|1\rangle|^2}{\epsilon_1 - \epsilon_2} \quad \text{et} \quad E_2^{\mathrm{rs}} = \epsilon_2 + \lambda\langle 2|V|2\rangle + \frac{|\lambda\langle 1|V|2\rangle|^2}{\epsilon_2 - \epsilon_1}$$

   La perturbation au premier ordre étant nulle, on obtient

$$E_1^{\mathrm{rs}} = \epsilon_1 - \frac{\lambda^2 V^2}{\Delta} \quad \text{et} \quad E_2^{\mathrm{rs}} = \epsilon_2 + \frac{\lambda^2 V^2}{\Delta}$$

   Ainsi, on voit que la théorie de Rayleigh-Schrödinger au deuxième ordre est ici équivalente à un développement de Taylor des valeurs propres exactes au même ordre.

5. Nous voulons maintenant trouver les vecteurs propres du hamiltonien perturbé. Au premier ordre, la théorie de Rayleigh-Schrödinger donne

$$|\Psi_1^{\mathrm{rs}}\rangle = |1\rangle + \frac{1}{\epsilon_1 - \epsilon_2}\langle 2|\lambda V|1\rangle|2\rangle \quad \text{et} \quad |\Psi_2^{\mathrm{rs}}\rangle = |2\rangle + \frac{1}{\epsilon_2 - \epsilon_1}\langle 1|\lambda V|2\rangle|1\rangle$$

   c'est-à-dire

$$|\Psi_1^{\mathrm{rs}}\rangle = |1\rangle - \frac{\lambda V}{\Delta}|2\rangle \quad \text{et} \quad |\Psi_2^{\mathrm{rs}}\rangle = |2\rangle + \frac{\lambda V}{\Delta}|1\rangle$$

   Ces vecteurs correspondent à un développement au premier ordre des vecteurs propres exacts donnés par l'équation (3).

Exercice 2 *Puit de potentiel déformé*

1. Pour rappel, les valeurs propres non-perturbées associées à $\hat{H}_0$ sont obtenue facilement en resolvant l'équation de Schrödinger $\hat{H}\,|\psi(x)\rangle = E\,|\psi(x)\rangle$ et étant donné l'ansatz $\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$. On trouve que les conditions aux bords du puits où $\psi(0) = \psi(a) = 0$ plus la necessité de travailler avec des fonctions continues imposent
$$\psi_n(x) = u_n^{(0)}(x) = A_n \sin(k_n x) \ \text{ si } 0 < x < a \tag{5}$$
où $k = n\pi/a$. De la condition de normalisation de la fonction d'onde on déduit $|A| = \sqrt{2/a}$. Les énergies propres associées sont
$$E_n^{(0)} = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2} = n^2 E_1^{(0)} \tag{6}$$

2. D'après la théorie des perturbations indépendante du temps la correction d'énergie à l'ordre 1 en $\hat{H}_1$ est donnée par
$$E_n^{(1)} = \left\langle u_n^{(0)}(x)\right| \hat{H}_1 \left|u_n^{(0)}(x)\right\rangle = W\int_0^a u_n^{(0)}(x)\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)u_n^{(0)}(x)\,dx \tag{7}$$
En utilisant l'identité trogonométrique $\cos(x)\sin(y) = [\sin(x+y) + \sin(x-y)]/2$ on trouve
$$\hat{H}_1\left|u_n^{(0)}(x)\right\rangle = \frac{W}{2}\left|u_{n+2}^{(0)}(x)\right\rangle + \frac{W}{2}\left|u_{n-2}^{(0)}(x)\right\rangle \tag{8}$$
Autrement dit la perturbation transforme chaque état propre en une combinaison linéaire de 2 autres états propres. Remarquons ici que pour $n = 1$, on a
$$\hat{H}_1\left|u_1^{(0)}(x)\right\rangle = \frac{W}{2}\left|u_3^{(0)}(x)\right\rangle - \frac{W}{2}\left|u_1^{(0)}(x)\right\rangle \tag{9}$$
en utilisant $u_{-1}^{(0)}(x) = -u_1^{(0)}(x)$, qui découle de l'imparité de la fonction sinus. D'autre part pour $n = 2$ on obtient un seul terme à savoir
$$\hat{H}_1\left|u_2^{(0)}(x)\right\rangle = \frac{W}{2}\left|u_4^{(0)}(x)\right\rangle \tag{10}$$
On peut maintenant en déduire
$$\left\langle u_n^{(0)}(x)\right| \hat{H}_1 \left|u_n^{(0)}(x)\right\rangle = \frac{W}{2}\left\langle u_n^{(0)}(x) \,\middle|\, u_{n+2}^{(0)}(x)\right\rangle + \frac{W}{2}\left\langle u_n^{(0)}(x) \,\middle|\, u_{n-2}^{(0)}(x)\right\rangle \tag{11}$$
Etant donnée l'orthogonalité mutuelle des états $\left|u_n^{(0)}(x)\right\rangle$ la seule contribution non-nulle est obtenue pour $n = 1$ c'est à dire
$$E_1^{(1)} = -\frac{W}{2}\left\langle u_1^{(0)}(x) \,\middle|\, u_1^{(0)}(x)\right\rangle = -\frac{W}{2} \tag{12}$$
En résumé seul le premier niveau d'énergie du puit est affecté par la perturbation et cela est bien sûre dû à la forme bien spécifique en cosinus de la modulation.

On trouve maintenant facilement la pertubation des états propres correspondante

$$\left|u_n^{(1)}(x)\right\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{\left\langle u_m^{(0)}(x)\right| \hat{H}_1 \left|u_n^{(0)}(x)\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \left|u_m^{(0)}(x)\right\rangle \tag{13}$$

ou plus précisément dans notre cas

$$\begin{aligned}\left|u_n^{(1)}(x)\right\rangle &= \frac{W}{2}\frac{\left\langle u_{n+2}^{(0)}(x) \,\middle|\, u_{n+2}^{(0)}(x)\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_{n+2}^{(0)}}\left|u_{n+2}^{(0)}(x)\right\rangle + \frac{W}{2}\frac{\left\langle u_{n-2}^{(0)}(x) \,\middle|\, u_{n-2}^{(0)}(x)\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_{n-2}^{(0)}}\left|u_{n-2}^{(0)}(x)\right\rangle \\ &= \frac{W}{8E_1^{(0)}}\left[\frac{1}{n-1}\left|u_{n-2}^{(0)}(x)\right\rangle - \frac{1}{n+1}\left|u_{n+2}^{(0)}(x)\right\rangle\right] \end{aligned} \tag{14}$$

3. Les corrections d'énergie à l'ordre 2 sont données par

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{\left|\left\langle u_m^{(0)}(x)\right| \hat{H}_1 \left|u_n^{(0)}(x)\right\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{15}$$

Qui découle immédiatement du calcul précédent à savoir

$$E_{n>2}^{(2)} = \frac{W^2}{8E_1^{(0)}}\frac{1}{n^2-1} \tag{16}$$

Attention encore une fois aux cas $n = 1$ et $n = 2$ pour lesquels

$$E_1^{(2)} = -\frac{W^2}{32E_1^{(0)}},\ E_2^{(2)} = \frac{W^2}{48E_1^{(0)}} \tag{17}$$