

**Exercice 1** *Théorie des perturbations dégénérées sur un système à 3 états*

Dans ce problème, nous désirons appliquer la théorie des perturbations à un hamiltonien dont le spectre est partiellement dégénéré.

1. Par définition des opérateurs de moment cinétique, le commutateur de  $H$  avec  $S_z$  donne

$$[H, S_z] = -D[S_z^2, S_z] + \lambda B[S_x, S_z] = -i\hbar\lambda B S_y$$

En supposant  $B$  non nul,  $[H, S_z] = 0$  seulement si  $\lambda = 0$ . Dans ce cas les états propres de  $S_z$  sont états propres de  $H$ , et il suffit de leur appliquer  $H$  pour connaître leur énergie. Nous avons  $S_z^2|m\rangle = \hbar m S_z|m\rangle = \hbar^2 m^2|m\rangle$ , par conséquent les états propres et énergies propres de  $H$  sont:

$$\begin{aligned} |m=0\rangle & : E = 0 \\ |m=-1\rangle & : E = -D\hbar^2 \\ |m=+1\rangle & : E = -D\hbar^2 \end{aligned}$$

L'énergie propre  $-D\hbar^2$  est donc deux fois dégénérée.

2. Nous écrivons le hamiltonien dans la base  $\mathcal{B}_1 = \{|\bar{1}\rangle, |0\rangle, |1\rangle\}$ . Pour déterminer la matrice de l'opérateur  $S_x$ , nous utilisons la formule  $S_x = \frac{1}{2}(S^+ + S^-)$  et

$$S^\pm |SM\rangle = \hbar\sqrt{S(S+1) - M(M\pm 1)} |S, M\pm 1\rangle$$

Il est alors facile d'appliquer  $S_x$  sur les états de base:

$$\begin{aligned} S_x|\bar{1}\rangle &= \frac{\hbar}{2}\sqrt{2}|0\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}|0\rangle \\ S_x|0\rangle &= \frac{\hbar}{2}[\sqrt{2}|1\rangle + \sqrt{2}|\bar{1}\rangle] = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}[|\bar{1}\rangle + |1\rangle] \\ S_x|1\rangle &= \frac{\hbar}{2}\sqrt{2}|0\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}|0\rangle \end{aligned}$$

L'action de  $S_z^2$  est simplement  $S_z^2|\bar{1}\rangle = \hbar^2|\bar{1}\rangle$ ,  $S_z^2|0\rangle = 0$ , et  $S_z^2|1\rangle = \hbar^2|1\rangle$ . La matrice du hamiltonien est donc égale à

$$H = \begin{pmatrix} -D\hbar^2 & \lambda B \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ \lambda B \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 & \lambda B \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \lambda B \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & -D\hbar^2 \end{pmatrix}$$

Comme le niveau d'énergie  $E = 0$  est non dégénéré, pour  $\lambda = 0$ , on peut utiliser la théorie des perturbations non dégénérées. D'après le cours, la correction au premier ordre est (Eq. 10.14)

$$E_1^{(1)} = B\langle 0|S_x|0\rangle = 0$$

Au deuxième ordre, nous avons dans le formalisme de Rayleigh-Schrödinger (Eq. 10.17):

$$E_1^{(2)} = \frac{|\langle \bar{1} | BS_x | 0 \rangle|^2}{0 - (-D\hbar^2)} + \frac{|\langle 1 | BS_x | 0 \rangle|^2}{0 - (-D\hbar^2)} = B^2/D$$

Remarquez que dans ce calcul,  $\lambda$  n'apparaît pas. Il est introduit dans la correction à l'énergie (Eq. 10.9):

$$E_1 = \underbrace{\epsilon_0}_{=0} + \lambda \underbrace{E_1^{(1)}}_{=0} + \lambda^2 E_1^{(2)} + \mathcal{O}(\lambda^3),$$

d'où

$$E_1 = \lambda^2 B^2/D + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (1)$$

La correction au vecteur propre à l'ordre 1 est donnée par l'équation (10.16):

$$\begin{aligned} \langle \bar{1} | \Psi_1^{(1)} \rangle &= \frac{\langle \bar{1} | BS_x | 0 \rangle}{D\hbar^2} = \frac{B}{\sqrt{2}D\hbar} \\ \langle 1 | \Psi_1^{(1)} \rangle &= \frac{\langle 1 | BS_x | 0 \rangle}{D\hbar^2} = \frac{B}{\sqrt{2}D\hbar} \end{aligned}$$

Par conséquent au premier ordre en  $\lambda$  le vecteur propre associé à l'énergie  $E_1 = \lambda^2 B^2/D$  est (Eq. 10.9):

$$|\Psi_1\rangle = |0\rangle + \lambda \left( \langle \bar{1} | \Psi_1^{(1)} \rangle |\bar{1}\rangle + \langle 1 | \Psi_1^{(1)} \rangle |1\rangle \right) + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

Finalement,

$$|\Psi_1\rangle = |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{B\lambda}{D\hbar} \left( |\bar{1}\rangle + |1\rangle \right) + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (2)$$

3. D'après la théorie des perturbations dégénérées, la correction au premier ordre à l'énergie est donnée par les valeurs propres de la de la restriction  $\tilde{V}$  de  $V = \lambda BS_x$  au sous-espace  $\{|\bar{1}\rangle, |1\rangle\}$  (Eq. 10.34). Cette matrice s'écrit

$$\tilde{V} = \begin{pmatrix} \langle \bar{1} | V | \bar{1} \rangle & \langle \bar{1} | V | 1 \rangle \\ \langle 1 | V | \bar{1} \rangle & \langle 1 | V | 1 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ici les valeurs propres de  $\tilde{V}$  sont 0 et par conséquent la correction à l'énergie au premier ordre est nulle.

4. D'après l'équation (10.51), pour obtenir la correction au deuxième ordre à l'énergie, il faut diagonaliser la matrice

$$M_{ij} = V_{ij} + \sum_{|\varphi_m\rangle \neq \{|\varphi_{n_i}\rangle\}} \frac{\langle \varphi_{n_i} | \hat{V} | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | \hat{V} | \varphi_{n_j} \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m}, \quad \text{où } \epsilon_n = -D\hbar^2,$$

dans le sous-espace  $\{|\bar{1}\rangle, |1\rangle\}$ . Ici il n'y a qu'un seul état  $m$  en dehors de ce sous-espace, l'état  $|0\rangle$ , et par conséquent la somme ne comporte qu'un seul terme. Comme nous avons de plus  $\langle \varphi_{n_i} | V | \varphi_{n_j} \rangle = 0$ , la matrice s'écrit

$$M_{ij} = \frac{\langle \varphi_{n_i} | \hat{V} | 0 \rangle \langle 0 | \hat{V} | \varphi_{n_j} \rangle}{-D\hbar^2 - 0}$$

Ainsi, en prenant  $\varphi_{n_1} = |\bar{1}\rangle$  et  $\varphi_{n_2} = |1\rangle$ , nous avons

$$\begin{aligned} M_{11} &= \frac{\langle \bar{1}|V|0\rangle\langle 0|V|\bar{1}\rangle}{-D\hbar^2} = -\frac{\lambda^2 B^2}{2D} \\ M_{22} &= \frac{\langle 1|V|0\rangle\langle 0|V|1\rangle}{-D\hbar^2} = -\frac{\lambda^2 B^2}{2D} \\ M_{12} &= \frac{\langle \bar{1}|V|0\rangle\langle 0|V|1\rangle}{-D\hbar^2} = -\frac{\lambda^2 B^2}{2D} \\ M_{21} &= \frac{\langle 1|V|0\rangle\langle 0|V|\bar{1}\rangle}{-D\hbar^2} = -\frac{\lambda^2 B^2}{2D} \end{aligned}$$

Au final, la matrice  $M$  est

$$M = -\frac{\lambda^2 B^2}{2D} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Si l'on note  $\mu_2$  et  $\mu_3$  ses valeurs propres, puisque  $\text{Det}M = \mu_2\mu_3 = 0$ ,  $\mu_2 = 0$  est une valeur propre évidente de la matrice, et comme  $\text{Tr} M = \mu_2 + \mu_3$ , l'autre valeur propre est  $\mu_3 = -\frac{\lambda^2 B^2}{D}$ . Les corrections  $E_2^{(2)}$  et  $E_3^{(2)}$  vérifient donc  $E_2^{(2)} = 0$  et  $E_3^{(2)} = -\frac{\lambda^2 B^2}{D}$  et on a

$$E_2 = -D\hbar^2 + \mathcal{O}(\lambda^3), \quad (3)$$

$$E_3 = -D\hbar^2 - \lambda^2 \frac{B^2}{D} + \mathcal{O}(\lambda^3), \quad (4)$$

avec les vecteurs propres associés

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |\bar{1}\rangle) \quad \text{et} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |\bar{1}\rangle) \quad (5)$$

Ces vecteurs sont donc les bons vecteurs initiaux  $|\Psi_{2,3}^{(0)}\rangle$  à choisir dans le sous-espace propre dégénéré. Mais comme rappelé au départ, pour obtenir les vecteurs  $|\Psi_{2,3}\rangle$  à l'ordre 1, il faut encore calculer la correction  $|\Psi_{2,3}^{(1)}\rangle$  qui sera une petite composante selon  $|0\rangle$ . Ces états sont donc seulement les projections des états  $|\Psi_{2,3}\rangle$  (voir (10.45)) dans le sous-espace  $\{|\bar{1}\rangle, |1\rangle\}$ . Pour trouver les composantes  $\langle 0|\Psi_{2,3}\rangle$  il faut utiliser les équations sous (10.51)

$$\langle 0|\Psi_{2,3}\rangle = \sum_{m=\bar{1},1} \frac{\langle m|\Psi_{2,3}\rangle\langle 0|V|m\rangle}{\epsilon(m = \pm 1) - \epsilon(m = 0)}$$

On trouve donc

$$\langle 0|\Psi_2\rangle = \frac{1}{-D\hbar^2} \left[ 1 \cdot \frac{\lambda B\hbar}{2} - 1 \cdot \frac{\lambda B\hbar}{2} \right] = 0$$

et

$$\langle 0|\Psi_3\rangle = \frac{1}{-D\hbar^2} \left[ 1 \cdot \frac{\lambda B\hbar}{2} + 1 \cdot \frac{\lambda B\hbar}{2} \right] = -\frac{\lambda B}{D\hbar}$$

Finalement

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |\bar{1}\rangle) + \mathcal{O}(\lambda^2), \quad (6)$$

$$|\Psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |\bar{1}\rangle) - \frac{\lambda B}{D\hbar}|0\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (7)$$

*Remarque* : dans le cas présent, les expressions (3) et (6) restent valables à n'importe quel ordre de perturbation, car  $(|1\rangle - |\bar{1}\rangle)/\sqrt{2}$  est vecteur propre non seulement de  $-DS_z^2$  (valeur propre  $-D\hbar^2$ ), mais aussi de la perturbation  $\lambda BS_x$ , pour la valeur propre 0, indépendante de  $\lambda$ ; le sous-espace engendré par ce vecteur est donc stable sous la perturbation et, qui plus est, l'énergie propre correspondant à cet état ne dépend pas de  $\lambda$ .

## Exercice 2 Théorie des perturbations

1.  $H_0 = \hbar\omega \left( \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \frac{1}{2} \right).$

L'état fondamental est noté  $|0\rangle$  (c'est le vide de particules en seconde quantification) et le premier état excité est  $|1\rangle = \hat{a}_x^\dagger |0\rangle$  (état à une particule en seconde quantification).

2. Comme  $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger),$

$$\hat{H}_I = \frac{\lambda}{4} \left( \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger) \right)^4 = \frac{\lambda\hbar^2}{16m^2\omega^2} (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)^4$$

3. La correction de l'énergie du fondamental au premier ordre en  $\lambda$  est

$$\Delta E_0^{(1)} = \langle 0 | \hat{H}_I | 0 \rangle.$$

Il faut développer les termes de  $(\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)^4$  et conserver seulement ceux qui donnent un résultat non nul. Il n'y en a en fait pas beaucoup :

$$\Delta E_0^{(1)} = \frac{\lambda\hbar^2}{16m^2\omega^2} \langle 0 | \hat{a}_x \hat{a}_x \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x \hat{a}_x^\dagger | 0 \rangle.$$

En utilisant les formules

$$\begin{cases} \hat{a}_x |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \\ \hat{a}_x^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \end{cases} \quad (8)$$

on obtient

$$\Delta E_0^{(1)} = \frac{\lambda\hbar^2}{16m^2\omega^2} (2+1) \langle 0 | 0 \rangle = \frac{3\lambda\hbar^2}{16m^2\omega^2}.$$

4. La correction de l'énergie du premier niveau excité au premier ordre en  $\lambda$  est

$$\Delta E_1^{(1)} = \langle 1 | \hat{H}_I | 1 \rangle \quad (9)$$

$$= \frac{\lambda\hbar^2}{16m^2\omega^2} \langle 1 | (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)^4 | 1 \rangle. \quad (10)$$

Si l'on cherche à éliminer des termes du produit, on peut remarquer qu'il faut deux opérateurs de création et deux d'annihilation, sinon, on ne peut pas avoir le même nombre de particules à gauche et à droite. Il ne reste plus que 6 des 16 termes. On peut éliminer  $\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x \hat{a}_x$ . Il reste :

$$\begin{aligned} \Delta E_1^{(1)} &= \frac{\lambda\hbar^2}{16m^2\omega^2} \langle 1 | \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x \hat{a}_x \hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_x \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x \hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x \hat{a}_x \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x^\dagger | 1 \rangle \\ &= \frac{\lambda\hbar^2}{m^2\omega^2} (1 + 2 + 2 + 4 + 6) = \frac{15\lambda\hbar^2}{16m^2\omega^2}. \end{aligned}$$