Exercice 1 *2 niveaux dégénérés*

1. Ici nous considérons 2 niveaux dégénérés. La théorie des perturbations nous indique de diagonaliser la matrice $\hat{V}$ en définissant ses éléments V_{ij} où $\{i,j\} \in \{1,2\}$ afin de déterminer la correction d'énergie à l'ordre 1. On trouve facilement

$$E^{(1)} = \frac{1}{2}\left(V_{11} + V_{22} + \hbar\omega^{(1)}\right),$$

$$E'^{(1)} = \frac{1}{2}\left(V_{11} + V_{22} - \hbar\omega^{(1)}\right),$$

avec la définition

$$\hbar\omega^{(1)} := \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}.$$

Les vecteurs propres normalisés correspondants sont

$$c_1^{(0)} = \sqrt{\frac{V_{12}}{2|V_{12}|}\left(1 \pm \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}}\right)},$$

$$c_2^{(0)} = \pm\sqrt{\frac{V_{21}}{2|V_{12}|}\left(1 \mp \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}}\right)}.$$

2. Partant des expressions

$$\left|\psi^{(0)}\right\rangle = c_1^{(0)}\left|\psi_1^{(0)}\right\rangle + c_2^{(0)}\left|\psi_2^{(0)}\right\rangle, \tag{1}$$

$$\left|\psi'^{(0)}\right\rangle = c_1'^{(0)}\left|\psi_1^{(0)}\right\rangle + c_2'^{(0)}\left|\psi_2^{(0)}\right\rangle \tag{2}$$

Que l'on peut renverser pour obtenir $\psi_1^{(0)}$ en fonction des états propres non-perturbés

$$\left|\psi_1^{(0)}\right\rangle = \frac{c_2'^{(0)}\left|\psi^{(0)}\right\rangle - c_2^{(0)}\left|\psi'^{(0)}\right\rangle}{c_1^{(0)}c_2'^{(0)} - c_1'^{(0)}c_2^{(0)}}, \tag{3}$$

et donc au temps t en applicant l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t)\left|\psi_1^{(0)}\right\rangle$, chaque état propre évolue bien sure avec sa fréquence propre,

$$\left|\psi_1^{(0)}(t)\right\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}Et}\frac{c_2'^{(0)}e^{-\frac{i}{\hbar}E^{(1)}t}\left|\psi^{(0)}\right\rangle - c_2^{(0)}e^{-\frac{i}{\hbar}E'^{(1)}t}\left|\psi'^{(0)}\right\rangle}{c_1^{(0)}c_2'^{(0)} - c_1'^{(0)}c_2^{(0)}}. \tag{4}$$

et la fréquence associée à $\hat{H}_0$ introduit un préfacteur de phase globale. Maintenant nous cherchons la probabilité de se trouver dans l'état $\left|\psi_2^{(0)}\right\rangle$ à l'instant t il est donc necessaire de retravailler avec les états propres en réinjectant (1,2) dans (4), et nous effectons le produit scalaire avec $\left|\psi_2^{(0)}\right\rangle$ pour trouver la probabilité

$$w_{21} = |\langle\psi_2^{(0)}|\psi_1^{(0)}(t)\rangle|^2 = 2\frac{|V_{21}|^2}{(\hbar\omega^{(1)})^2}\left[1 - \cos(\omega^{(1)}t)\right]. \tag{5}$$

La probabilité d'excitation oscille à la fréquence $\omega^{(1)}$ et en d'autres terms le système oscille entre ses 2 états propres. Dans le cas $t \ll 1/\omega^{(1)}$, w_{21} se réduit à,

$$w_{21} = \frac{1}{\hbar^2}|V_{21}|^2 t^2. \tag{6}$$

en dévelopant le cosinus à l'ordre 2.

3. Ayant
$$\langle\psi_2^{(0)}|\hat{U}(t)|\psi_1^{(0)}\rangle = \langle\psi_2^{(0)}|\mathrm{e}^{iE/\hbar t}|\psi_1^{(0)}\rangle + \langle\psi_2^{(0)}|\mathrm{e}^{i\hat{V}/\hbar t}|\psi_1^{(0)}\rangle \tag{7}$$
et étant donné que $\langle\psi_2^{(0)}|\psi_1^{(0)}\rangle = 0$, on a $\langle\psi_2^{(0)}|\mathrm{e}^{iE/\hbar t}|\psi_1^{(0)}\rangle = 0$. Maintenant on peut développer $\exp(i\hat{V}/\hbar t)$ au premier ordre en $\hat{V}$ pour immediatement retrouver
$$w_{21} = \frac{1}{\hbar^2}|V_{21}|^2 t^2. \tag{8}$$

Exercice 2 *Oscillateur harmonique perturbé*

L'astuce de cet exercice est de remarquer que $\hat{U} = \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 - F\hat{x}$ peut se mettre sous la forme

$$U(x) = \frac{m\omega^2}{2}(x - x_0)^2 + \texttt{Const}. \tag{9}$$

On peut alors déduire que les fonctions d'ondes perturbées $|\psi_n(x)\rangle$ seront simplement les fonctions d'onde non-perturbées $\left|\psi_n^{(0)}(x)\right\rangle$ déplacées de

$$x_0 = \frac{F}{m\omega^2}. \tag{10}$$

à savoir $\left|\psi_n^{(0)}(x - x_0)\right\rangle$.

1. Le but ici est de calculer $\left|\left\langle\psi_0^{(0)}|\psi_n\right\rangle\right|^2$, où $\left|\psi_0^{(0)}(x)\right\rangle$ est l'état fondamental non-perturbé, and $\psi_n(x) = \psi_n^{(0)}(x-x_0)$ est le nième état excité de l'oscillateur harmonique perturbé. Les états propres du système sont bien connus et on a en particulier
$$\psi_0^{(0)}(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right), \tag{11}$$
$$\psi_n^{(0)}(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x - x_0)^2\right)H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right), \tag{12}$$
$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2}\frac{d^n e^{-y^2}}{dy^n}. \tag{13}$$

Puis

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^{(0)} \psi_n dx = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n \pi n!}} e^{-y_0^2/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-yy_0} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2+2yy_0} dy, \tag{14}$$

où l'on introduit le changement de variable $y_{(0)} = x_{(0)}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$. On doit calculer cet intégrale à travers n intégrations par parties à savoir

$$\begin{gathered}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-yy_0} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2+2yy_0} dy = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-yy_0} d\frac{d^{n-1}}{dy^{n-1}} e^{-y^2+2yy_0} = \\ y_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-yy_0} \frac{d^{n-1}}{dy^{n-1}} e^{-y^2+2yy_0} dy = ... = y_0^n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2+yy_0} dy = y_0^n \sqrt{\pi} e^{y_0^2/4}.\end{gathered} \tag{15}$$

Finalement la probabilité de transition est

$$w_{n0} = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^{(0)} \psi_n dx \right|^2 = \frac{e^{-y_0^2}}{2^n n!} y_0^{2n} e^{y_0^2/2} = \frac{z^n}{n!} e^{-z}, \tag{16}$$

avec

$$z = \frac{y_0^2}{2} = \frac{F^2}{2m\hbar\omega^3}. \tag{17}$$

Ce qui n'est rien d'autre qu'un distribution Poissonienne de paramètre z.

2. La théorie des perturbation est applicable si $z \ll 1$. Dans ce cas la transition dominante est évidement celle vers le premier état excité à savoir $w_{10} \approx z$.

3. Selon la théorie des perturbations dépendantes du temps on peut écrire

$$w_{n0} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{n0}^2} \left| \int \frac{\partial V_{n0}}{\partial t} e^{i\omega_{n0} t} dt \right|^2 = \frac{|V_{n0}|^2}{\hbar^2 \omega_{n0}^2}, \tag{18}$$

avec $\omega_{n0} = (E_n^{(0)} - E_0^{(0)})/\hbar$. La dernière égalité tient du fait que la perturbation est soudaine, l'intégrale dans (18) est saturée rapidement pour $t \ll \omega_{n0}^{-1}$ et l'exponentielle peut être prise égale à 1. Pour calculer w_{10}, on doit expliciter V_{10} qui est donné par

$$V_{10} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^{*(0)}(x) F x \psi_0^{(0)}(x) dx = \frac{m\omega}{\hbar}\sqrt{\frac{2}{\pi}} F \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) dx = F\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{19}$$

Ainsi,

$$w_{10} = \frac{F^2}{\hbar^2\omega^2}\frac{\hbar}{2m\omega} = z. \tag{20}$$

Exercice 3 *Secousse atomique*

Travaillons de le référentiel en mouvement avec l'atome après la perturbation. Etant donné que le temps caractéristique de secousse satisfait $\tau \ll a/v$, les coordonnés des électrons en orbite autour du noyau sont les mêmes dans le nouveau référentiel que dans celui initial du laboratoire. La fonction d'onde initiale dans le référentiel en mouvement s'exprime en fonction de la fonction d'onde non-perturbée selon

$$\psi_0'(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) \exp\left(-i\mathbf{q}\sum_a \mathbf{a}\right), \tag{21}$$

avec

$$\mathbf{q} = \frac{m\mathbf{v}}{\hbar}. \tag{22}$$

et où la somme court sur tous les électrons. La probabilité de trouver l'atome dans le kième état excité est

$$w_{k0} = \left| \left\langle \psi_k \left| \exp\left(-i\mathbf{q} \sum_a \mathbf{a} \right) \right| \psi_0 \right\rangle \right|^2. \tag{23}$$

et en particulier

$$w_{00} = \left| \int \psi_0^2(\mathbf{x}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) dV \right|^2 \tag{24}$$

est la probabilité de demeurer dans l'état fondamental. La probabilité totale d'excitation est donc

$$P = 1 - w_{00}. \tag{25}$$

Pour un atome d'Hydrogène l'état fondamental est

$$\psi_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \tag{26}$$

où a est son rayon de Bohr. Ainsi en intégrant en coordinnées sphériques on obtient,

$$P = 1 - \frac{2}{a^3} \int_0^\infty r^2 dr \int_{-1}^1 d\cos\theta e^{-2r/a} e^{-iqr\cos\theta} = 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{q^2 a^2}{4}\right)^4}. \tag{27}$$