Théorie des perturbation (?)

Il fait un rappel de la théorie des perturbation, qu'on a fait au dernier cours

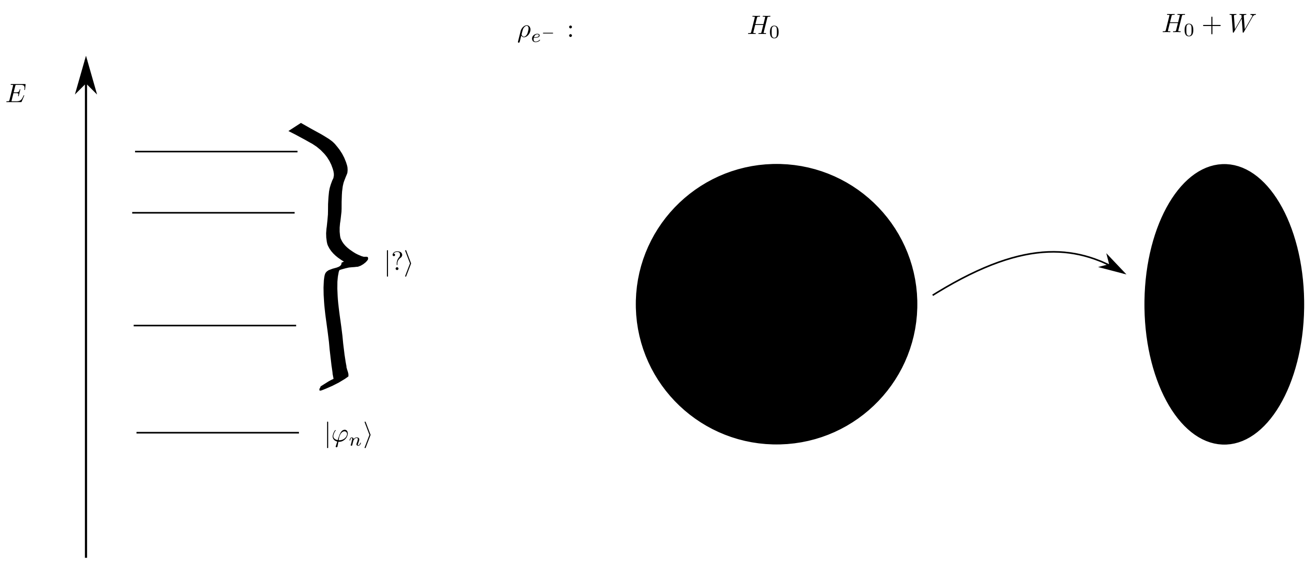

FIGURE 1 – spectre énérgétique

Cas dégénéré

On pose :

$$|\varphi_{n,\alpha}\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} c_{n,i}^{\alpha} \left|\varphi_n^i\right\rangle$$

On fait un chanement de base pour utilisel les ket α au lieu d'utiliser les ket i

$$H_0 \,|\varphi_n, \alpha\rangle = E_n^0 \,|\varphi, \alpha\rangle$$

$$H_0 \left|\varphi^{(1)}\right\rangle + W \,|\varphi_{n,\alpha}\rangle = E_n^0 \left|\varphi_n^i\right\rangle + E^{(1)} \,|\varphi_{n,\alpha}\rangle$$

$$\left\langle\varphi_n^i\right| H_0 \left|\varphi^{(1)}\right\rangle + \left\langle\varphi_n^i\right| W \,|\varphi_{n,\alpha}\rangle = \left\langle\varphi_n^i\right| E_n^0 \left|\varphi_n^i\right\rangle + \left\langle\varphi_n^i\right| E^{(1)} \,|\varphi_{n,\alpha}\rangle$$

$$\sum_{i=1}^{g_n} \langle \varphi_n^i | \bar{W} | \varphi_n^{i\prime} \rangle \langle \varphi_n^{i\prime} | \varphi_{n,\alpha} \rangle = E^{(1)} \langle \varphi_n^i | \varphi_{n,\alpha} \rangle$$

C'est essentiellement un produit matriciel

$$\det\left(P_{\mathcal{E}}\left(\bar{W} = E^(1)\not{\Vdash}\right)P_{\mathcal{E}}\right) = 0 \to E^{(1)} \text{ valeur propres}$$

On va se limiter en ordre 1 en énérgie, et donc en ordre 0 en état dans le cadre du cours.

L'odre 0 n'est pas trivial même à l'ordre 0 dans le cas dégénéré.

Algorithme

si

$$H = H_0 + W$$

si $|\varphi_n\rangle$ est non-dégénéré : formule sinon

$$E_0 = E_n^0 + \lambda E_\alpha^{(1)}$$

Application : structure fine de l'atome H

rappel : eq dirac :

$$(c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 + V(r))\psi = E\psi \quad V = -\frac{e^2}{r}$$

$$H_{sf} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V + \underbrace{W_{mv} + W_D + W_{SD}}_{\text{perturbation}}$$

$$\boxed{|n = 1, l = 0, n = 0, \pm\rangle = |\varphi_{1s}\rangle}$$

$$|n = 2, l = 0, m = 0, \pm\rangle = |2s\rangle$$

$$|n = 2, l = 1, m \in \{1, 0, -11\}, \pm\rangle = |2p\rangle$$

on définit

$$E_n^0 = -\frac{E_I}{n^2} \qquad E_I = \frac{me^4}{2\hbar^2} = \frac{1}{2}mc^2\alpha^2$$

et

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$$

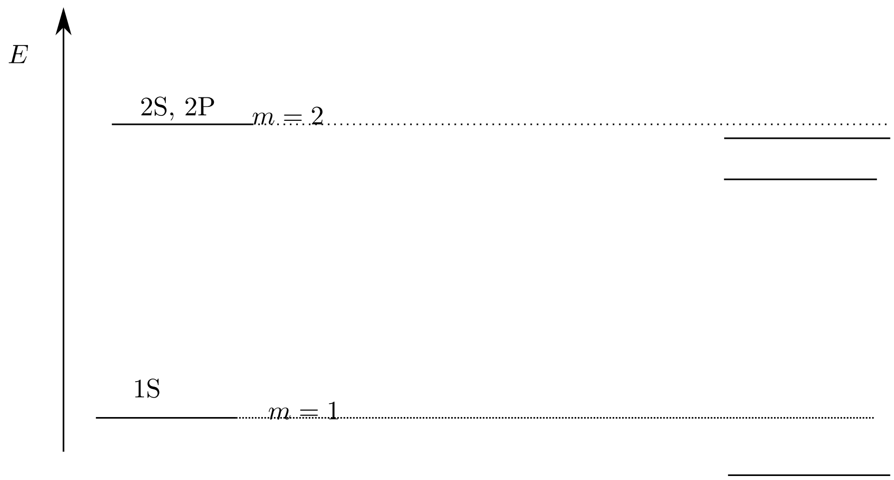

FIGURE 2 – spectre de l'atome d'hydrogene

Niveau 1s

$$E_{1s} = E^0_{1s} \langle 1,0,0,\pm| W_{mv} + W_0 |1,0,0,\pm\rangle$$

$$\langle 1,0,0| \otimes \langle 1,0,0| \pm W_0 |1,0,0\rangle \otimes |\pm\rangle = \langle 1,0,0| W_0 |1,0,0\rangle$$

$$= \int \mathrm{d}^3r \, \langle 1,0,0| W_D |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}|1,0,0\rangle = \int \mathrm{d}^3r \varphi_{1s}(r) \frac{\hbar^2 e^2 \pi}{2m^2c^2} \delta(\vec{r}) \varphi_{1s}(r) = \frac{\hbar^2 e^2 \pi}{2m^2c^2} \underbrace{\|\varphi_{1s}(0)\|^2}_{\frac{1}{\pi a_0^2}} = \frac{1}{2} mc^2 \alpha^4$$

$$\langle 1,0,0,\pm| \underbrace{W_{mv}}_{\frac{-\vec{p}^4}{8m^3c^2}} |1,0,0,\pm\rangle$$

si $\frac{p^2}{2m} H_{0-V} \implies P^4 = (2m)^2 (H_0 - V)^2 = 4m^2 (H_0^2 - H_0 V - V H_0 + V^2)$

$$\langle 1,0,0| W_{mv} |1,0,0\rangle = -\frac{1}{2mc^2} \langle 1,0,0| H_{0^2} - H_0 V - V H_0 + V^2 |1,0,0\rangle =$$
$$-\frac{1}{2mc^2} \left(E_{1s}^2 + E_{1s} \langle 1,0,0| V |1,0,0\rangle + \langle 1,0,0| V^2 |1,0,0\rangle \right) = -\frac{5}{8} mc^2 \alpha^4$$

(On obtien le résultat après avoir intergrés sur V)

Donc :

$$E_{1s} = E_{1S}^0 + \left(\frac{1}{2} - \frac{5}{8}\right) mc^2\alpha^2$$

<u>Niveau n=2</u>

$$2s : |2, 0, 0, \pm\rangle, \quad g = 2$$
$$2p : |1, 2, (\pm 1, 0), \pm\rangle, \quad g = 6$$

$$[\mathbf{L}^2, \mathbf{P}^4] = [\mathbf{L}^2, P^2P^2] = p^2[L^2, P^2] + [L^2, P^2]P^2$$

$$\mathbf{P}^2 = P_{r^2} + L^2 \implies \text{tout commute}$$

$$\implies P^4 \text{ conserve } l$$

$$[L^2, \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}] = L^2, \mathbf{L}]\cdot\ + \mathbf{L}[\mathbf{L}, \mathbf{S}] = 0$$

$$\implies W_{so} \text{ conserve } l$$

$$\langle \pm, 2, 0, 0| \, W_D \, |2, 0, 0, \pm\rangle = \langle 2, 0, 0| \, W_d \, |2, 0, 0\rangle$$

$$\varphi_{2s}(r) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) r^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$(W_{SF})_{E_n = 2p} = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} l=0 & l=1 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 2\times 2 & 0 \\ 0 & 6\times 6 \end{pmatrix} \end{array}$$

FIGURE 3 – matrice de Wsf