

Mécanique Quantique

Examen

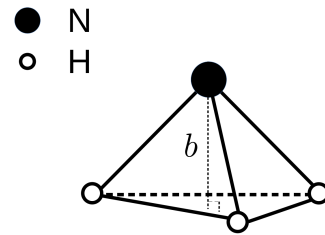
27 janvier 2023

Le double puits carré

Les 2 parties du sujet peuvent être traitées séparément.

1 Un modèle simple pour la molécule d'ammoniac

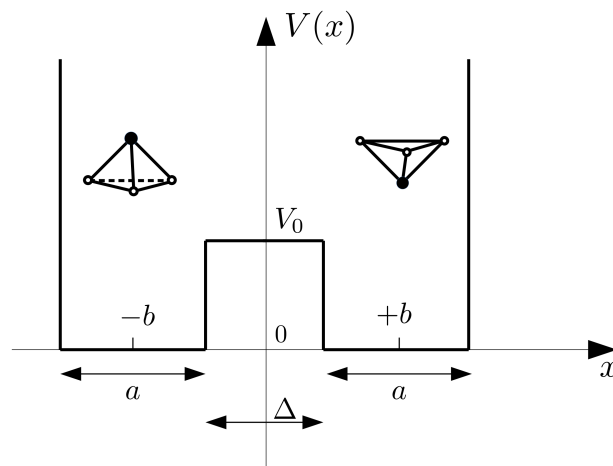
La molécule d'ammoniac NH_3 a la forme d'une pyramide dont l'atome d'azote occupe le sommet et les trois atomes d'hydrogène forment la base, en forme de triangle équilatéral. La hauteur de la pyramide (distance de l'azote au plan des hydrogènes) vaut $b = 37,7 \cdot 10^{-12} \text{ m}$.



On s'intéresse ici à un mouvement particulier des atomes de cette molécule, dans lequel l'azote traverse le plan des hydrogènes pour aboutir à une nouvelle position d'équilibre, symétrique de la précédente. On parle d'inversion de la molécule d'ammoniac.

Pour cela, on considère le modèle simple décrit ci-dessous :

- l'atome d'azote, beaucoup plus lourd que ceux d'hydrogène, est immobile
- les atomes d'hydrogène forment un triangle équilatéral de côté invariable et dont l'axe passe toujours par l'atome d'azote
- l'énergie potentielle $V(x)$ du système est alors fonction d'un seul paramètre, la distance algébrique x entre l'azote et le plan défini par les 3 hydrogènes. $V(x)$ est un potentiel carré en forme de double puits infini, représenté ci-dessous.



Pour décrire l'inversion de la molécule d'ammoniac, on se propose d'étudier le mouvement quantique à une dimension d'une particule fictive de masse $m = 3m_H$ dans le potentiel $V(x)$, où m_H est la masse d'un atome d'hydrogène.

1. Montrer que l'on peut chercher les états stationnaires du hamiltonien du système sous la forme de fonctions paires ou impaires.

Comme $V(x)$ est pair, \hat{H} commute avec l'opérateur parité $\hat{\Pi}_x$. Il existe donc une base d'états propres communs à \hat{H} et $\hat{\Pi}_x$. Les états propres de $\hat{\Pi}_x$ sont les fonctions d'ondes paires (associées à la valeur propre +1) et impaires (associées à la valeur propre -1). D'où le résultat demandé.

2. Déterminer les états stationnaires du hamiltonien d'énergie $0 < E < V_0$ sans les normaliser.

Montrer que les énergies de ces états vérifient :

$$\tan ka = -\frac{k}{K} \coth \left[K \frac{\Delta}{2} \right] \quad \text{pour les états pairs}$$

$$\tan ka = -\frac{k}{K} \operatorname{th} \left[K \frac{\Delta}{2} \right] \quad \text{pour les états impairs}$$

où on a posé

$$\hbar K = \sqrt{2m(V_0 - E)} \quad \text{et} \quad \hbar k = \sqrt{2mE}$$

Pour E donnée comprise entre 0 et V_0 , on résoud l'équation

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \right] = E\psi(x)$$

pour $0 < x < \frac{\Delta}{2}$ (barrière centrale) et $\frac{\Delta}{2} < x < \frac{\Delta}{2} + a$ (puits de droite) en imposant $\psi(\frac{\Delta}{2} + a) = 0$ et en cherchant des solutions paires ou impaires

- pour $0 < x < \frac{\Delta}{2}$:

$$\psi(x) = A \operatorname{ch}(Kx) \quad \text{pour les solution paires}$$

$$\psi(x) = B \operatorname{sh}(Kx) \quad \text{pour les solution impaires}$$

- pour $\frac{\Delta}{2} < x < \frac{\Delta}{2} + a$:

$$\psi(x) = C \sin \left(k \left(x - \frac{\Delta}{2} - a \right) \right)$$

On écrit ensuite la continuité de $\psi(x)$ et de $\frac{d}{dx}\psi(x)$ en $x = \frac{\Delta}{2}$:

- pour les solutions paires :

$$A \operatorname{ch}\left(\frac{K\Delta}{2}\right) = -C \sin(ka)$$

$$KA \operatorname{sh}\left(\frac{K\Delta}{2}\right) = Ck \cos(ka)$$

- pour les solutions impaires :

$$A \operatorname{sh}\left(\frac{K\Delta}{2}\right) = -C \sin(ka)$$

$$KA \operatorname{ch}\left(\frac{K\Delta}{2}\right) = Ck \cos(ka)$$

En divisant les deux équation obtenues pour les solutions paires (resp. impaires), on obtient les équations demandées.

3. Montrer que pour $E \ll V_0$ et $K\Delta \gg 1$, ces équations deviennent :

$$\tan ka = -\varepsilon_{\pm} ka \quad \text{avec} \quad \varepsilon_{\pm} = \frac{1 \pm 2e^{-K_0\Delta}}{K_0a}$$

où $\hbar K_0 = \sqrt{2mV_0}$ et où le signe $+$ correspond aux états pairs et le signe $-$ aux états impairs. Préciser la signification physique de l'hypothèse $K\Delta \gg 1$.

Discuter le cas $V_0 = +\infty$.

$$E \ll V_0 \Rightarrow K \approx K_0$$

$$K\Delta \gg 1 \text{ et } K \approx K_0 \Rightarrow e^{-K\Delta} \approx e^{-K_0\Delta} \ll 1 \Rightarrow \text{th} \left[K \frac{\Delta}{2} \right] \approx \frac{1-e^{-K_0\Delta}}{1+e^{-K_0\Delta}} \approx 1 - 2e^{-K_0\Delta}$$

$$\text{et } \text{coth} \left[K \frac{\Delta}{2} \right] \approx 1 + 2e^{-K_0\Delta}$$

d'où le résultat demandé.

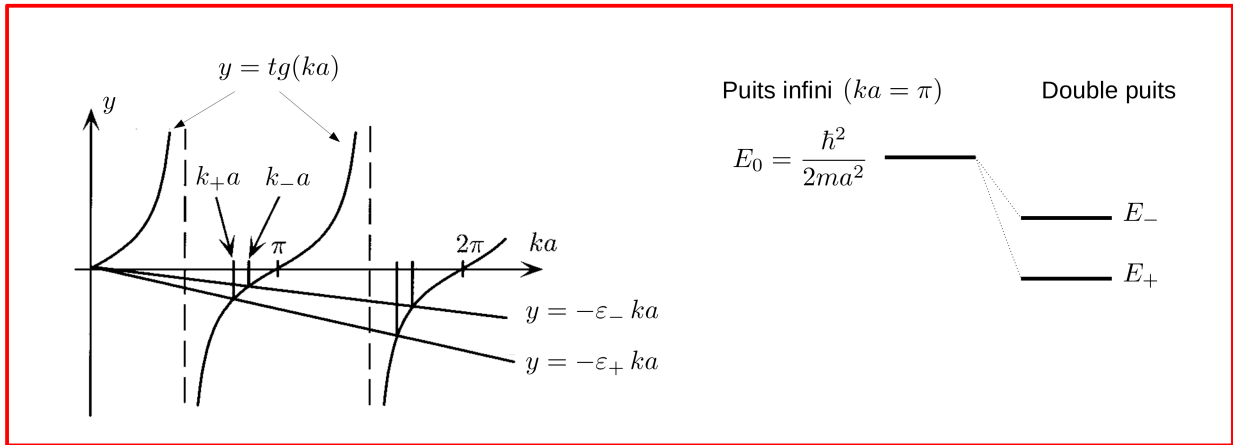
$K\Delta \gg 1$: hypothèse de barrière large.

$V_0 = +\infty \Rightarrow K_0 = +\infty \Rightarrow k = +n\frac{\pi}{a}$ avec $n \in \mathbb{Z}$ pour les solutions paires et pour les solutions impaires. Les 2 puits ne sont pas couplés et on retrouve les énergies d'un puits infini de largeur a . Chaque niveau d'énergie est 2 fois dégénéré (une solution paire et une solution impaire).

4. En supposant que les 2 hypothèses de la question précédente sont vérifiées, proposer une détermination graphique des 2 premiers niveaux du double puits.

Quelle est la parité de l'état fondamental? Quelle est celle du premier état excité?

Préciser qualitativement la position de ces niveaux d'énergie par rapport à ceux obtenus dans le cas $V_0 = +\infty$.



L'état fondamental est pair, le premier état excité est impair.

5. On note k_+ et E_+ (resp. k_- et E_-) les vecteurs d'onde et énergies associés au premier état pair (resp. impair).

Montrer que :

$$k_{\pm} \approx \frac{\pi}{a(1 + \varepsilon_{\pm})}$$

En déduire :

$$\frac{E_+ + E_-}{2} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2}{K_0 a}\right) \quad \text{et} \quad E_- - E_+ \approx \frac{4\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \frac{e^{-K_0 \Delta}}{K_0 a}$$

Commenter.

$$\varepsilon_{\pm} \ll 1 \Rightarrow k_{\pm} \approx \frac{\pi}{a} \Rightarrow \tan(k_{\pm} a) \approx (k_{\pm} a - \pi)$$

On a donc $(k_{\pm} a - \pi) = -\varepsilon_{\pm} k_{\pm} a$ d'où on déduit le résultats demandés pour k_{\pm} .

On a :

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2 k_{\pm}^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (1 - 2\varepsilon_{\pm})$$

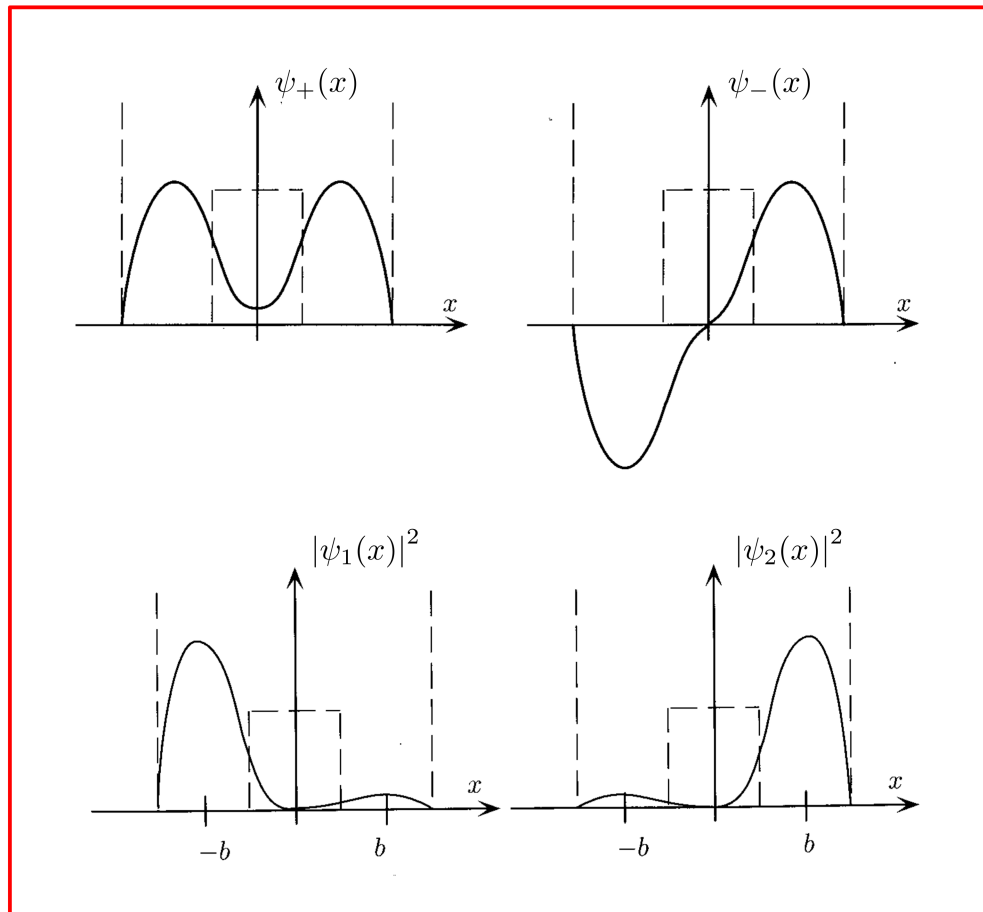
d'où les résultats demandés pour $\frac{E_+ + E_-}{2}$ et $E_- - E_+$.

L'écart entre les deux niveaux E_+ et E_- décroît exponentiellement lorsque la largeur de barrière augmente.

6. Représenter l'allure des fonctions d'onde $\Psi_+(x)$ et $\Psi_-(x)$.

Représenter également l'allure de

$$\Psi_1(x) = \frac{\Psi_+(x) - \Psi_-(x)}{\sqrt{2}} \quad \text{et} \quad \Psi_2(x) = \frac{\Psi_+(x) + \Psi_-(x)}{\sqrt{2}}$$



7. On suppose qu'à l'instant $t = 0$, la molécule d'ammoniac est dans l'état décrit par la fonction d'onde $\Psi_1(x)$.

Décrire quantitativement l'évolution du système sachant que $E_- - E_+ \approx 10^{-4}$ eV pour la molécule NH_3 .

$$\begin{aligned}
 \psi(x, t = 0) &= \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_+(x) - \Psi_-(x)] \\
 \Rightarrow \psi(x, t = 0) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_+(x) e^{-i \frac{E_+ t}{\hbar}} - \Psi_-(x) e^{-i \frac{E_- t}{\hbar}} \right] \\
 \Rightarrow \psi(x, t = 0) &= \frac{1}{2} \left[(\psi_1(x) + \psi_2(x)) e^{-i \frac{E_+ t}{\hbar}} + (\psi_1(x) - \psi_2(x)) e^{-i \frac{E_- t}{\hbar}} \right] \\
 \Rightarrow \psi(x, t = 0) &= e^{-i \frac{(E_+ + E_-) t}{2\hbar}} \left[\psi_1(x) \cos \frac{(E_- - E_+) t}{2\hbar} + i \psi_2(x) \sin \frac{(E_- - E_+) t}{2\hbar} \right]
 \end{aligned}$$

La particule, initialement dans le puits de gauche, oscille entre le puits de droite et le puits de gauche. La probabilité de trouver la particule à coup sûr dans le puits de droite (resp. de gauche) oscille entre 0 et 1 à la fréquence

$$\nu = \frac{E_- - E_+}{h}$$

Application numérique : $\nu \approx 24$ GHz

2 Interaction d'échange

On considère à nouveau le double puits de potentiel $V(x)$ représenté sur la première page de l'énoncé. On note $|g\rangle$ et $|d\rangle$ les états fondamentaux dans les puits gauche et droit lorsque l'effet tunnel à travers la barrière centrale est négligeable. On choisit l'origine des énergies de telle sorte que $E_g = E_d = 0$ et on oublie les autres niveaux d'énergie des 2 puits. Le double puits est donc traité ici comme un système à 2 niveaux.

Dans la base $\{|g\rangle, |d\rangle\}$, le couplage tunnel entre les 2 puits est décrit par la matrice :

$$\begin{pmatrix} 0 & -J \\ -J & 0 \end{pmatrix}$$

où $J > 0$.

1. Quelles sont les niveaux d'énergie du système en présence du couplage tunnel entre les 2 puits? Quels sont les états correspondants?

Faire le lien avec la partie précédente.

Les valeurs propres de la matrice de couplage tunnel entre les deux puits sont $+J$ et $-J$.

L'état propre correspondant à l'énergie $\pm J$ est $\frac{1}{\sqrt{2}}[|g\rangle \pm |d\rangle]$.

On retrouve bien les résultats de la partie précédente, l'état de plus basse énergie est *pair* le premier état excité est *impair*.

Dans la suite, on place **2 fermions identiques de spin $\frac{1}{2}$** , numérotés 1 et 2, dans le potentiel $V(x)$.

On note par exemple $|1 : g+ ; 2 : d-\rangle$ l'état où la particule 1 est dans l'état $|g\rangle$ avec la composante z de son spin égale à $+\frac{\hbar}{2}$ et la particule 2 est dans l'état $|d\rangle$ avec la composante z de son spin égale à $-\frac{\hbar}{2}$.

On suppose que le couplage tunnel entre les 2 puits est indépendant du spin. On suppose également que les 2 particules interagissent répulsivement entre elles lorsqu'elles occupent le même puits mais que leur interaction lorsqu'elles occupent des puits différents est négligeable. On suppose par ailleurs l'interaction indépendante du spin des particules. Le potentiel d'interaction \hat{V}_{int} vérifie donc:

$$\begin{aligned} \hat{V}_{int} |1 : g\sigma ; 2 : g\sigma'\rangle &= U |1 : g\sigma ; 2 : g\sigma'\rangle & \hat{V}_{int} |1 : d\sigma ; 2 : d\sigma'\rangle &= U |1 : d\sigma ; 2 : d\sigma'\rangle \\ \hat{V}_{int} |1 : g\sigma ; 2 : d\sigma'\rangle &= \hat{V}_{int} |1 : d\sigma ; 2 : g\sigma'\rangle &= 0 \end{aligned}$$

où $U > 0$ et $\sigma = \pm, \sigma' = \pm$.

2. Montrer qu'on peut chercher une base de vecteurs propres communs à \hat{H} , \hat{S}^2 et \hat{S}_z où $\hat{\vec{S}}$ est le spin total des 2 particules.

Le couplage tunnel et le potentiel d'interaction sont indépendants du spin. \hat{H} commute donc avec \hat{S}^2 et \hat{S}_z et on peut donc chercher une base de vecteurs propres communs à ces 3 opérateurs.

3. On note $s(s+1)\hbar^2$ les valeurs propres de \hat{S}^2 et $s_z\hbar$ celles de \hat{S}_z . Rappeler quelles sont les valeurs possibles de s et s_z et donner l'expression des vecteurs propres de \hat{S}^2 et \hat{S}_z associés à ces valeurs dans la base des états $|\sigma, \sigma'\rangle$. Préciser leurs propriétés de symétrie.

Les valeurs possibles de s sont $s = 0$ (état singulet) et $s = 1$ (état triplet).

Pour $s = 0$, on a $s_z = 0$. L'état propre correspondant est $\frac{1}{\sqrt{2}}[|+, -\rangle - |-, +\rangle]$.

Pour $s = 1$, on a $s_z = +1$ (vecteur propre associé $|+, +\rangle$), $s_z = 0$ (vecteur propre associé $\frac{1}{\sqrt{2}}[|+, -\rangle + |-, +\rangle]$) et $s_z = -1$ (vecteur propre associé $|-, -\rangle$)

On se place dans le sous-espace propre $s = 0$.

4. Quelle propriété doit vérifier la partie orbitale du vecteur d'état des 2 particules? Quelle est la dimension du sous-espace $s = 0$? Donner une base de ce sous-espace.

L'état des 2 particules, qui sont des fermions, doit être antisymétrique dans l'échange des 2 particules. Pour $s = 0$, la partie spin de l'état est antisymétrique, la partie orbitale doit donc être symétrique.

La dimension du sous-espace $s = 0$ est donc 3. Une base de ce sous-espace est :

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= |1 : g ; 2 : g\rangle \otimes |s = 0 ; s_z = 0\rangle \\ |\beta\rangle &= |1 : d ; 2 : d\rangle \otimes |s = 0 ; s_z = 0\rangle \\ |\gamma\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|1 : g ; 2 : d\rangle + |1 : d ; 2 : g\rangle] \otimes |s = 0 ; s_z = 0\rangle \end{aligned}$$

5. L'opérateur \hat{V}_{tunnel} décrivant l'effet tunnel des 2 particules à travers la barrière centrale s'écrit :

$$\hat{V}_{tunnel} = \hat{V}_{tunnel}^{(1)} \otimes \hat{\mathbb{I}}^{(2)} + \hat{\mathbb{I}}^{(1)} \otimes \hat{V}_{tunnel}^{(2)}$$

où $\hat{V}_{tunnel}^{(i)}$ et $\hat{\mathbb{I}}^{(i)}$ sont respectivement les opérateurs tunnel et identité de la particule i .

Donner l'action de \hat{V}_{tunnel} sur chacun des vecteurs de la base déterminée à la question précédente.

\hat{V}_{tunnel} n'agit pas sur le spin.

On a :

$$\begin{aligned} \hat{V}_{tunnel} |1 : g ; 2 : g\rangle &= -J [|1 : d ; 2 : g\rangle + |1 : g ; 2 : d\rangle] \\ \hat{V}_{tunnel} |1 : d ; 2 : d\rangle &= -J [|1 : g ; 2 : d\rangle + |1 : d ; 2 : g\rangle] \\ \hat{V}_{tunnel} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} [|1 : g ; 2 : d\rangle + |1 : d ; 2 : g\rangle] \right) &= -\sqrt{2} J [|1 : g ; 2 : g\rangle + |1 : d ; 2 : d\rangle] \end{aligned}$$

et donc :

$$\begin{aligned} \hat{V}_{tunnel} |\alpha\rangle &= -\sqrt{2} J |\gamma\rangle \\ \hat{V}_{tunnel} |\beta\rangle &= -\sqrt{2} J |\gamma\rangle \\ \hat{V}_{tunnel} |\gamma\rangle &= -\sqrt{2} J [|\alpha\rangle + |\beta\rangle] \end{aligned}$$

6. Procéder de même pour l'opérateur \hat{V}_{int} .

\hat{V}_{int} n'agit pas sur le spin.

On a :

$$\begin{aligned} \hat{V}_{int} |1 : g ; 2 : g\rangle &= U |1 : g ; 2 : g\rangle \\ \hat{V}_{int} |1 : d ; 2 : d\rangle &= U |1 : d ; 2 : d\rangle \\ \hat{V}_{int} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} [|1 : g ; 2 : d\rangle + |1 : d ; 2 : g\rangle] \right) &= 0 \end{aligned}$$

et donc :

$$\begin{aligned} \hat{V}_{int} |\alpha\rangle &= U |\alpha\rangle \\ \hat{V}_{int} |\beta\rangle &= U |\beta\rangle \\ \hat{V}_{int} |\gamma\rangle &= 0 \end{aligned}$$

7. Déterminer les énergies propres des états $s = 0$.

Représenter graphiquement la variation de ces énergies (normalisées à J) en fonction de $\frac{U}{J}$.

Dans la base $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle\}$, la matrice de \hat{H} est

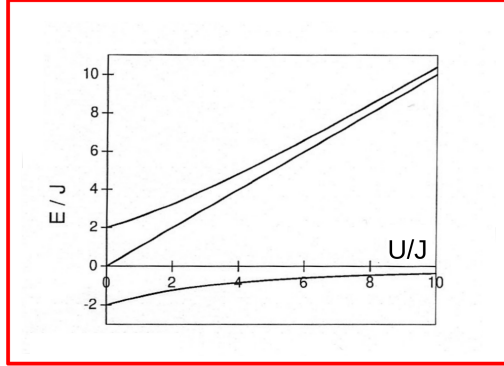
$$\begin{pmatrix} U & 0 & -\sqrt{2}J \\ 0 & U & -\sqrt{2}J \\ -\sqrt{2}J & -\sqrt{2}J & 0 \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres de la matrice sont solutions de l'équation :

$$(U - \lambda) [(U - \lambda) - 2J^2] - 2J^2(U - \lambda) = 0$$

Les 3 niveaux d'énergie du sous-espace $s = 0$ sont donc :

$$U \quad \text{et} \quad \frac{U \pm \sqrt{U^2 + 16J^2}}{2}$$



8. Dans le cas de particules en interaction forte ($J \ll U$), donner l'expression des énergies du sous-espace $s = 0$ à l'ordre le plus bas en $\frac{J}{U}$.

Préciser les vecteurs propres correspondants.

Dans le cas $J \ll U$ ($\Leftrightarrow \frac{J^2}{U} \ll U$), les niveaux d'énergie sont à l'ordre le plus bas en $\frac{J}{U}$:

$$E = -\frac{4J^2}{U} \quad (\text{état singulet } s = 0)$$

$$E = U \quad (\text{état singulet } s = 0)$$

$$E = U + \frac{4J^2}{U} \quad (\text{état singulet } s = 0)$$

On les vecteurs propres associés aux différentes valeurs de E en résolvant :

$$\begin{pmatrix} U & 0 & -\sqrt{2}J \\ 0 & U & -\sqrt{2}J \\ -\sqrt{2}J & -\sqrt{2}J & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad c = \frac{(U - E)}{\sqrt{2}J} a = \frac{(U - E)}{\sqrt{2}J} b \quad \text{et} \quad a + b = -\frac{E}{\sqrt{2}J} c$$

L'état propre d'énergie $E = U$ est donc $\frac{1}{\sqrt{2}} [|\alpha\rangle - |\beta\rangle]$.

Pour $E \neq U$, on a $a = b$ et $c = -2\sqrt{2}\frac{J}{E} a$.

Pour $E = -\frac{4J^2}{U}$, on a donc $a = b$ et $c = \frac{U}{\sqrt{2}J} a$. A l'ordre le plus bas en $\frac{U}{J}$, le vecteur propre associé est donc $|\gamma\rangle$.

Pour $E = U + \frac{4J^2}{U}$, on a donc $a = b$ et $c = -2\sqrt{2}\frac{J}{U} a$. A l'ordre le plus bas en $\frac{U}{J}$, le vecteur propre associé est donc $\frac{1}{\sqrt{2}} [|\alpha\rangle + |\beta\rangle]$.

On se place maintenant dans le sous-espace propre $s = 1$.

9. Reprendre les questions 4 à 6.

Dans le sous-espace $s = 1$, la composante spin des différents états est symétrique. La partie orbitale doit donc être antisymétrique. Elle vaut donc : $\frac{1}{\sqrt{2}} [|1 : g ; 2 : d\rangle - |1 : d ; 2 : g\rangle]$

Le sous-espace $s = 1$ est donc de dimension 3. Une base de ce sous-espace est constituée des 3 vecteurs d'états: $\frac{1}{\sqrt{2}} [|1 : g ; 2 : d\rangle - |1 : d ; 2 : g\rangle] \otimes |s = 1 ; s_z = 0, \pm 1\rangle$.

$$\hat{V}_{tunnel} [|1 : g ; 2 : d\rangle - |1 : d ; 2 : g\rangle] = \hat{V}_{int} [|1 : g ; 2 : d\rangle - |1 : d ; 2 : g\rangle] = 0$$

Dans le sous espace $s = 1$, on a donc un niveau d'énergie nulle dégénéré 3 fois.

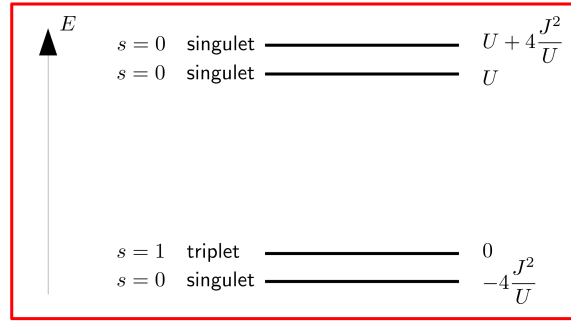
10. Représenter l'ensemble du spectre énergétique obtenu dans le cas de particules en interaction forte ($J \ll U$). Dans le cas $J \ll U$ ($\Leftrightarrow \frac{J^2}{U} \ll U$), les niveaux d'énergie sont :

$$E = -\frac{4J^2}{U} \text{ (état singulet } s = 0)$$

$$E = 0 \text{ (état triplet } s = 1)$$

$$E = U \text{ (état singulet } s = 0)$$

$$E = U + \frac{4J^2}{U} \text{ (état singulet } s = 0)$$



11. A suffisamment basse température, seuls les 2 niveaux de plus basses énergies sont peuplés. Montrer que :

- les deux particules ne sont alors jamais dans le même puits
- tout se passe comme si il existait une interaction entre les spins \hat{S}_1 et \hat{S}_2 des 2 particules de la forme :

$$A + B \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$

Cette interaction est appelée interaction d'échange.

Déterminer les valeurs de A et B .

D'après ce qui précède :

- la partie orbitale de l'état fondamental est celle de $|\gamma\rangle$ soit $\frac{1}{\sqrt{2}} [|1 : g ; 2 : d\rangle + |1 : d ; 2 : g\rangle]$.
- celle du premier état excité est $\frac{1}{\sqrt{2}} [|1 : g ; 2 : d\rangle - |1 : d ; 2 : g\rangle]$.

Dans la situation où seuls les 2 niveaux de plus basses énergies sont peuplés, les 2 particules ne sont donc jamais dans le même puits.

$$\begin{aligned} \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 &= \frac{1}{2} [\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2] \quad \Rightarrow \quad \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 |s = 0; s_z = 0\rangle = -\frac{3}{4} \hbar^2 |s = 0; s_z = 0\rangle \\ \text{et} \quad \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 |s = 1; s_z = 0\rangle &= \frac{1}{4} \hbar^2 |s = 1; s_z = 0\rangle \end{aligned}$$

Tout se passe donc comme si on avait une interaction entre les spins de la forme $A + B \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ avec

$$A = 4 \frac{J^2}{U \hbar^2} \quad \text{et} \quad B = -\frac{J^2}{U \hbar^2}$$

Désormais, les particules ne sont plus des fermions identiques de spin 1/2.

12. Quelle serait la dimension de l'espace des états si les deux particules de spin $\frac{1}{2}$ étaient discernables? Quels seraient les niveaux d'énergie? Le postulat de symétrisation est-il responsable de la levée de dégénérescence des 2 premiers niveaux observée pour $J \ll U$ par rapport au cas sans effet tunnel? Quel est son rôle?

Si les 2 particules sont discernables, la dimension de l'espace des états est 16. On trouve les 4 mêmes niveaux que précédemment mais tous dégénérés 4 fois.

Le postulat de symétrisation n'est pas responsable de la levée de dégénérescence des 2 premiers niveaux observée pour $J \ll U$ par rapport au cas sans effet tunnel. Il ne fait qu'interdire au niveau inférieur d'avoir un spin 0 et au niveau supérieur d'avoir un spin 1.

13. Quels seraient les niveaux d'énergie si les 2 particules étaient des bosons de spin nul? Dans le cas $J \ll U$, montrer qu'on peut appliquer la théorie des perturbations au second ordre pour retrouver l'énergie de l'état fondamental et celle du premier état excité.

Pour des bosons, l'espace des états est de dimension 3. En effet, l'espace des états de spin est de dimension 1 ($|s = 0; s_z = 0\rangle$, composante de spin symétrique dans l'échange entre les 2 particules). La partie orbitale doit donc être symétrique. Une base de l'espace des états est :

$$|\alpha\rangle = |1 : g; 2 : g\rangle$$

$$|\beta\rangle = |1 : d; 2 : d\rangle$$

$$|\gamma\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1 : g; 2 : d\rangle + |1 : d; 2 : g\rangle]$$

La détermination des niveaux d'énergie est identique à celle effectuée dans le sous-espace $s = 0$ des fermions. On trouve 3 niveaux d'énergie $E = U$ et $E = \frac{U \pm \sqrt{U^2 + 16J^2}}{2}$.

Dans la limite $J \ll U$, on peut retrouver l'énergie du niveau fondamental en appliquant la théorie des perturbations.

Lorsque $J = 0$, l'état fondamental, d'énergie $E = 0$ est $|\gamma\rangle$. Le niveau excité, d'énergie $E = U$ est 2 fois dégénéré (états $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$).

Au premier ordre en perturbation, l'effet du couplage tunnel sur $|\gamma\rangle$ est nul.

Au second ordre, on a :

$$E = \frac{\left| \langle \alpha | \hat{V}_{tunnel} | \gamma \rangle \right|^2}{-U} + \frac{\left| \langle \beta | \hat{V}_{tunnel} | \gamma \rangle \right|^2}{-U} = -\frac{4J^2}{U}$$