TD de tetorat 10: théorie des perturbations

Exercice 1: spins 1/2 couplés et effet Zeeman perturbatif

On choisit la base 3 pour le proton et l'électron, et la base du système { proton + électron } et:

1++>, 1+->, 1-+>, 1-->, où le 1er vecteur correspond au spin du proton, et le deuxième à celui de l'électron.

Les veateurs propre de H sont:

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) = |4^{\circ}_{00}\rangle$$

 $|1,-1\rangle = |--\rangle = |4^{\circ}_{1-1}\rangle$
 $|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) = |4^{\circ}_{10}\rangle$
 $|1,1\rangle = |++\rangle = |4^{\circ}_{11}\rangle$

et les émergies propres sont: $|\psi_{00}\rangle = |0,0\rangle \rightarrow E_{00} = -\frac{3}{4} A R^{2}$ $|\psi_{10}\rangle = |1,-1\rangle \rightarrow E_{11} = \frac{1}{4} A R^{2}$ $|\psi_{10}\rangle = |1,0\rangle \rightarrow E_{10} = \frac{1}{4} A R^{2}$ $|\psi_{10}\rangle = |1,1\rangle \rightarrow E_{11} = \frac{1}{4} A R^{2}$

3. La théorie des perturbations dépend de si l'état est dégénéré ou non. Ju Eoû est non-dégénéré, donc, au 1er ordre:

$$|\Psi_{00}^{1}\rangle = -\sum_{m \neq 00}^{\infty} \frac{\sum |\Psi_{m,j}\rangle}{\sum |\Psi_{m,j}\rangle} \frac{\langle \Psi_{m,j}|H_{1}|\Psi_{00}\rangle}{\sum |\Psi_{m,j}\rangle - \sum |\Psi_{m,j}\rangle}$$

Appliquée ici:
$$|400\rangle = -\sum_{m \neq 00} |4m^{\circ}\rangle \frac{(4m^{\circ}|41|400)}{E_{m}^{\circ} - E_{00}^{\circ}}$$

cuec $m \in \{(1,0); (1,-1); (1,1)\}$

*
$$(9_{1-1}|H_{1}|\Psi_{00})_{=}$$
 $(1,-1|H_{1}|0,0)$
= $\frac{1}{2\sqrt{2}}$ $(--|(-\omega_{\Lambda}|+-)-\omega_{\Lambda}|-+)-\omega_{0}|+-)-\omega_{0}|+-)$
= 0 $(\alpha_{1}(--|+-)=(-|+).(-|-)=0$
 $(--|-+)=(-|-).(-|+)=0$

*
$$\langle Q_{11}^{\circ}|H_{1}|Q_{00}^{\circ}\rangle = \langle 1,1|H_{1}|Q_{00}\rangle = 0$$
 pour les mêmes raisons
* $\langle Q_{10}^{\circ}|H_{1}|Q_{00}^{\circ}\rangle = \langle 1,0|H_{1}|Q_{00}\rangle$
= $\frac{1}{4}(\langle +-|+\langle -+|)(-\omega_{1}|+-\rangle-\omega_{1}|-+\rangle-\omega_{2}|+-\rangle-\omega_{2}|-+\rangle)$
= $\frac{1}{4}(-\omega_{1}-\omega_{2}-\omega_{2}-\omega_{1}-\omega_{2}) = -\frac{1}{2}(\omega_{1}+\omega_{2})$

done
$$|\Psi_{00}\rangle = -|\Psi_{10}\rangle \frac{(-\frac{1}{2}(\omega_{p}+\omega_{e}))}{\frac{AB^{2}}{4} - (-\frac{3AB^{2}}{4})}$$

$$= \frac{h(\omega_{p}+\omega_{e})}{2AB^{2}} |\Psi_{10}\rangle = \frac{\omega_{p}+\omega_{e}}{2AB} |\Psi_{10}\rangle$$

5. Dans le cas dégénéré, la methode est différente:

il faut appliquer H1 dans le sous-espace de la valeur propre dégénérée. Les corrections $E_{m,j}$ sont les énergies de ce hamiltonien dans ce sous-espace, que l'on ablient en diagonalisal H1 dans ce sous-espace. Les vecteurs propres associés sont les états propres non perturlés 14 m's. Bour abtenir 14 m's, il faudrait itérer le processus, et obtenir les corrections d'ordre $2 E_{m,j}$ (mais c'est plus compliqué).

Il faut calculer H1 dans ce sous-espace:

$$\begin{pmatrix}
(1,0 | H_1 | 1,0) & (1,0 | H_1 | 1,-1) & (1,0 | H_1 | 1,1) \\
(1,-1 | H_1 | 1,0) & (1,-1 | H_1 | 1,-1) & (1,-1 | H_1 | 1,1) \\
(1,1 | H_1 | 1,0) & (1,1 | H_1 | 1,-1) & (1,1 | H_1 | 1,1)
\end{pmatrix}$$

*
$$H_1|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\omega_{R} S_{12} \otimes 11 + \omega_{e} 116 S_{e2}\right) \left(1+-\rangle + 1-+\rangle^{2}\right)...$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(-\omega_{R} |+-\rangle + \omega_{R} |-+\rangle - \omega_{e} |+-\rangle + \omega_{e} |-+\rangle\right)$$

$$= -\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\omega_{R} (|+-\rangle - |-+\rangle) + \omega_{e} (|+-\rangle - |-+\rangle)\right)$$

$$= -\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\omega_{R} (|+-\rangle - |-+\rangle) + \omega_{e} (|+-\rangle - |-+\rangle)\right)$$

$$= -\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\omega_{R} (|+-\rangle - |-+\rangle) + \omega_{e} (|+-\rangle - |-+\rangle)\right)$$

danc H1/1,0) = 0 dans ce sous-espace propre

donc
$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{12}(w_e - w_h) & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(w_e - w_h) \end{pmatrix}$$

done
$$E_{10}^{1} = 0$$

 $E_{1-1}^{1} = -\frac{1}{2}(\omega_{e} - \omega_{p}) \langle 0 \rangle$
 $E_{11}^{1} = \frac{1}{2}(\omega_{e} - \omega_{p}) \rangle 0$

Dans le cas dégénéré, lorsqu'on calcule les corrections de l'énergie à l'ordre 1, on n'a que les états propres à l'ordre 0. En effet, en reprenant le développement perturbatif, à l'ordre 1 on obtient l'équation

- . dans le cas mon-dégénère, le deroiser terme est $\neq 0$, et on peut multiplier par $\sum_{m\neq m} \sum_{j} |\{f_m,j\}\rangle$ et diviser par $\sum_{m} \sum_{m\neq m} |\{f_m\}\}$
- dans le cas dégénére, ce terme est nul, et pour avoir $|\Psi_{n,i}\rangle$ (au 1er ordre), il faut aller au 2ème ordre en énergies ($E_{n,i}$); c'est-à-dire le deuxième ordre de la perturbation.
- Les états propres (Pn,i), sont les états propres de H1, dans le sous-espace propre de E10 = E1-1 = E11.

les états propres sont
$$|\Psi_1^{\circ}\rangle = |1,0\rangle = |\Psi_0^{\circ}\rangle$$

$$|\Psi_2^{\circ}\rangle = |1,-1\rangle = |\Psi_{1-1}\rangle$$

$$|\Psi_3^{\circ}\rangle = |1,1\rangle = |\Psi_{11}\rangle$$

$$E_{00}^{2} = \frac{(400|H_{1}|400)^{2}}{(400|H_{1}|400)^{2}} = -\sum_{m \neq n} \frac{1(4ng^{0}|H_{1}|4n^{0})|^{2}}{E_{m}-E_{n}^{0}}$$

civec m € { (1,0); (1,-1); (1,1)}

$$= -\frac{h}{2}(\omega_{p} + \omega_{e}) |1,0\rangle$$

done
$$E_{00}^{2} = -\frac{|\langle \Psi_{10} | H_{1} | \Psi_{00}^{\circ} \rangle|^{2}}{E_{10}^{2} - E_{00}^{\circ}} = -\frac{|\frac{1}{2} [\omega_{\mu} + \omega_{e})|^{2}}{\frac{4\pi^{2}}{4} - (-\frac{3A\pi^{2}}{4})}$$

$$= -\frac{(\omega \rho + we)^2}{4 A}$$

7. Pour résondre de façon exacte $H=H_0+H_1$, on calcule H dans la base { $|0,0\rangle$, $|1,0\rangle$, $|1,-1\rangle$, $|1,1\rangle$ } puis on le diagonalise.

On a déja calculé précédemment les éléments de matrice:

Il suffit de diagonalisé la 1ère sous-matrice 2x2:

$$\det \left(M - \lambda \mathcal{I}\right) = \left(-\frac{3A\hbar^2}{4} - \lambda\right) \left(\frac{A\hbar^2}{4} - \lambda\right) - \left(\frac{\hbar}{2}(\omega_n + \omega_e)^2\right)^2$$

$$= \lambda^2 - \lambda \left(-\frac{3A\hbar^2}{4} + \frac{A\hbar^2}{4}\right) - \frac{3(A\hbar^2)^2}{16} - \left(\frac{\hbar}{2}(\omega_n + \omega_e)\right)^2$$

$$= \lambda^2 + \lambda \frac{A\hbar^2}{2} - 3\left(\frac{A\hbar^2}{4}\right)^2 - \left(\frac{\hbar}{2}(\omega_n + \omega_e)\right)^2 = 0$$

$$\Delta = \left(\frac{A \pi^{2}}{2}\right)^{2} + 4 \times 3 \left(\frac{A \pi^{2}}{4}\right)^{2} + 4 \frac{\pi^{2}}{4} (\omega_{p} + \omega_{e})^{2}$$

$$= \left(A \pi^{2}\right)^{2} + \pi^{2} (\omega_{p} + \omega_{e})^{2}$$

Les solutions sont:

$$E_1 = \frac{-b - \sqrt{\Delta}}{2a} = -\frac{AR^2}{4} - \sqrt{\left(\frac{AR^2}{2}\right)^2 + \left(\frac{R}{2}(\omega_{p} + \omega_e)\right)^2}$$

$$E_{z} = \frac{1}{2a} + \sqrt{\frac{4}{4}} + \sqrt{\frac{4}{2}} + \left(\frac{1}{2}(\omega_{1} + \omega_{e})\right)^{2}$$

et
$$E_3 = \frac{AR^2}{4} - \frac{R}{2}(\omega_{p} + \omega_{e})$$

$$E_4 = \frac{AR^2}{4} + \frac{R}{2}(\omega_{p} + \omega_{e})$$

. Ilu calad perturbatif, on a trouvé:

$$E_{00} = -\frac{3A\pi^2}{4} - \frac{(\omega_{\Lambda} + \omega_{e})^2}{4A} + O(\Lambda^2)$$

$$E_{1-1} = \frac{A^{2}}{4} - \frac{4}{2} \left(\omega_{e} - \omega_{p} \right) + o(\lambda)$$

avec
$$\lambda = \frac{A tr}{\gamma e B}$$

Or le calcul exact, en faisant un dévelopmement limite, donne:

$$E_1 = -\frac{A\hbar^2}{4} - \frac{A\hbar^2}{2} \left(1 + \frac{(\omega_n + \omega_e)^2}{2(4 + \hbar^2)^2}\right) = -3\frac{A\hbar^2}{4} - \frac{(\omega_n + \omega_e)^2}{4A}$$

$$E_{z} = -\frac{A f^{2}}{4} + \frac{A f^{2}}{2} \left(1 + \frac{(\omega_{1} + \omega_{2})^{2}}{2(A f^{2})^{2}} \right) = \frac{A f^{2}}{4} + \frac{(\omega_{1} + \omega_{2})^{2}}{4A}$$

=
$$\frac{Ah^2}{4}$$
 cur 1er ordre

=> on retrouve bien les mêmes expressions!

Exercice 2: spin 1/2 dans un chang magnétique oscillant perturbatif

1. Le hamiltonien est
$$\hat{H} = -\hat{m} \cdot \vec{B}_o = -y \vec{B}_o \cdot \vec{S} = -y \vec{B}_o \cdot \vec{S} \vec{z}$$

On suppose que la particule est un électron: y (0 donc E0 (E1

3. En évivant $H = H_0 + H_1$ et en développant $|\Psi(t)\rangle$ sur la base $\{1+3, 1-3\}$ de \mathcal{H} , on évit $|\Psi(t)\rangle = C_0(t) e^{-iE_0t|\Re(1-)} + C_4(t) e^{-iE_1t|\Re(1+)}$

De manière générale, on développe $|\Psi(t)\rangle$ sur une base propre de Ho: $|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\frac{\pi}{n}t/\hbar} c_n(t) |\Psi_n\rangle$

ou HIVn' = En IVn')

En évrivant l'équation de Schrödinger:

$$i \frac{d}{dt} | \Psi(t) \rangle = H | \Psi(t) \rangle = H_0 | \Psi(t) \rangle + H_1 | \Psi(t) \rangle$$

alors
$$\sum_{n} E_{n}^{o} c_{n}(t)e^{-iE_{n}tt}h_{1}(q_{n}) + ih \sum_{n} c_{n}(t)e^{-iE_{n}tt}h_{1}(q_{n})$$

$$= \sum_{n} c_{n}(t)e^{-iE_{n}tt}h_{1}(q_{n}) + \sum_{n} c_{n}(t)e^{-iE_{n}tt}h_{1}(q_{n})$$

$$= \sum_{n} c_{n}(t)e^{-iE_{n}tt}h_{1}(q_{n})$$

en multipliant par (Voil à gauche puis par et i En th

On développe les coefficients perturbativement. :

$$C_n(t) = C_n(t) + \lambda C_n(t) + \lambda^2 C_n(t) + \dots$$

avec the qui est en >

. Donc à l'ordre O en à :

$$i t \cdot c_n(t) = 0$$
 => $c_n = cste$

. A Cordre 1:

en integrant:
$$C_n(t) = \sum_{m \in \mathbb{N}} \int_{0}^{t} dt' e^{-i(t_m - t_m)t/M} \langle \psi_m | H_1 | \psi_m \rangle$$

. Appliqué à notre cas:

$$H_{1}|+\rangle = -y B_{1}(\cos(\omega t)) S_{\infty}|+\rangle + \sin(\omega t) S_{y}|+\rangle) = -y \frac{\pi B_{1}}{2} (\cos(\omega t)|-\rangle - i \sin(\omega t)|+\rangle$$

$$= -y \frac{\pi B_{1}}{2} e^{-i\omega t}|+\rangle$$

$$H_1 | - \rangle = - \chi B_1 \left(\cos(\omega t) S_2 | - \rangle + \sin(\omega t) S_3 | - \rangle \right) = - \chi \frac{R_1}{2} \left(\cos(\omega t) + i \sin(\omega t) \right) | + \rangle$$

$$= - \chi \frac{R_1}{2} e^{i\omega t} | + \rangle$$

done
$$C_n(t) = \frac{1}{i\hbar} \int dt' e^{-i(E_0' - E_n'')t/\hbar} (-|H_1| P_n'')$$

$$\begin{array}{ll} \text{C1(t)} = \frac{1}{i\hbar} \int dt' \, e^{-i(E_0 - E_1)t/\hbar} \, \left\langle -|H_1|+\right\rangle \\ = -\frac{y_B 1}{i\hbar} \, \frac{\hbar}{2} \int dt' \, e^{-i(E_0 - E_1)t'/\hbar} \, e^{-i\omega t} \end{array}$$

$$c_{1}^{1}(t) = -\frac{1}{2i} \int_{0}^{t} dt e^{i(\omega_{01} - \omega)t}$$

$$= i \frac{1}{2} \left(\frac{e^{i(\omega_{01} - \omega)t} - 1}{a(\omega_{01} - \omega)} \right) = \frac{1}{2(\omega_{01} - \omega)} \left(e^{i(\omega_{01} - \omega)t} - 1 \right)$$

. Finalement:
$$|\Psi(t)\rangle = c_0(t) |-\rangle + c_1(t) |+\rangle$$

$$= (c_0^\circ(t) + c_0^1(t)) |-\rangle + (c_1^\circ(t) + c_1^1(t)) |+\rangle$$

$$|\Psi(t)\rangle = |-\rangle + \frac{\gamma B_1}{2(\omega_{01} - \omega)} (e^{i(\omega_{01} - \omega)t} - 1) |+\rangle$$

4. La probabilité que le système soit dans l'état excité
$$|+\rangle$$
 à un temps t est:

$$P_{g \to e}(t) = |\langle +| \Psi(t) \rangle|^2 = \frac{|\langle B_1 \rangle|^2}{|\langle \omega_{01} - \omega \rangle|^2} |e^{i(\omega_{01} - \omega)t}|^2 |e^{i(\omega_{01} - \omega)t}|^2 |e^{i(\omega_{01} - \omega)t}|^2$$

$$= \frac{\left(\sqrt{B1}\right)^2}{4\left(\omega_{01}-\omega\right)^2} + \sin^2\left(\frac{\left(\omega_{01}-\omega\right)t}{2}\right) = \frac{\left(\sqrt{B1}\right)^2}{\left(\omega_{01}-\omega\right)^2} \sin^2\left(\frac{\left(\omega_{01}-\omega\right)t}{2}\right)$$

Dans le cours, on a vu que une résolution exacte de H donne: $P_{g \to e(t)} = \frac{\omega_1^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)$

et
$$\Omega = \sqrt{(\omega_0 - \omega_0)^2 + \omega_1^2}$$

. Dans la limite u1 « wo-w, ça donne:

$$P_g \rightarrow e(t) = \frac{\omega_1^2}{(\omega_0 - \omega)^2} \sin^2((\omega_0 - \omega)t)$$
, à l'ordre 1 en $\frac{B_1}{B_0} = \frac{\omega_1}{\omega_0}$

donc la même chose que la calcul perturbatif.

Le calcul perturbatif est valide si ω_1 ((ω_0 et ω_1 ((ω_0) et ω_1)) même si ω_1 ((ω_0), if faut que le champ oscillant soit hors de la résonance E_1 - E_0 entre les 2 niveaux d'énergie, car même si le champ est petit, P_0 > e diverge quand ω_1 > ω_01 , pour le calcul perturbatif et la perturbation n'est plus négligeable.