Classe inversée VIII : Perturbations stationnaires

On suppose que le système est décrit par un hamiltonien principal H_0 dont les vecteurs propres $\{|\varphi_n^0\rangle\}$ (qui forment donc la base canonique) et valeurs propres respectives E_n^0 sont connus. On suppose que ce système est alors perturbé par un petit terme correctif constant, d'hamiltonien noté W. Pour des raisons de commodité de raisonnement mathématique et pour bien mettre en évidence que la perturbation est faible devant l'effet principal, nous noterons cette perturbation sous la forme $W = \lambda\tilde{W}$, avec $\lambda \to 0$.

L'objet du présent travail est de chercher des expressions approchées des vecteurs et valeurs propres de l'hamiltonien total $H = H_0 + W$, notés $|\psi_k\rangle$ et E_k.

1 Cas d'un spectre non dégénéré

1.1 Notation dans la base canonique

Ecrivez pour un k donné, l'expression de $|\psi_k\rangle$ dans la base canonique, avec des coefficients qu'il est conseillé de noter $c_{n,k}$. Justifiez que parmi ces coefficients, il y en a un qui est ≈ 1 alors que tous les autres sont $\ll 1$ en valeur absolue.

1.2 Equations séculaires

Ecrivez l'équation aux valeurs propres de H pour $|\psi_k\rangle$. Projetez enfin celle-ci sur un vecteur quelconque $|\varphi_m^0\rangle$ de la base canonique, pour trouver les équations dites séculaires

$$0 = c_{m,k}(E_m^0 - E_k) + \sum_n c_{n,k} \langle\varphi_m^0|W|\varphi_n^0\rangle \tag{1}$$

1.3 Expression perturbative au premier ordre de E_k

Regardons le cas $m = k$. Identifiez dans l'équation séculaire les termes qui apparaissent au premier ordre en λ. Déduisez-en que

$$E_k \approx E_k^0 + W_{k,k} = E_k^0 + \langle\varphi_k^0|W|\varphi_k^0\rangle \tag{2}$$

1.4 Exemple

Soit

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 \\ 0 & 2E_0 & 0 \\ 0 & 0 & 3E_0 \end{pmatrix}$$

et

$$W = \lambda \begin{pmatrix} 2 & i & 5+2i \\ -i & -4 & 3 \\ 5-2i & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

les notations matricielles de H_0 et W dans la base canonique, avec $\mid \lambda \mid \ll 1$. Donnez le spectre de H au premier ordre perturbatif.

1.5 Expression perturbative au premier ordre des vecteurs propres

Reprenez les équations séculaires avec un $m \neq k$. Utilisez le fait que $|c_{n \neq k,k}| \ll |c_{k,k}| \approx 1$ et identifiez les termes apparaissant au second order en λ pour montrer que

$$c_{m \neq k,k} \approx -\frac{\langle \varphi_m^0 | W | \varphi_k^0 \rangle}{E_m^0 - E_k^0} \tag{3}$$

Donnez dans l'exemple traité dans la question 1.4 l'expression approchée de $|\psi_2\rangle$ dans la base canonique.

1.6 Expression perturbative au second ordre de E_k

Revenez à la question 1.3, mais plutôt que de négliger les termes qui apparaissent au second ordre en λ, utilisez le résultat de la question 1.5 sur l'expression des $c_{n,k}$ pour trouver

$$E_k \approx E_k^0 + W_{k,k} + \sum_{n \neq k} \frac{|W_{n,k}|^2}{E_k^0 - E_n^0} \tag{4}$$

1.7 Exemple

Discutez l'effet de la perturbation définie par

$$W = \lambda \begin{pmatrix} 0 & i & 3+4i \\ -i & 0 & 3 \\ 3-4i & 3 & 0 \end{pmatrix}$$

sur l'hamiltonien H_0 défini dans la question 1.4.

2 Cas d'une base dégénérée

Supposons que parmi les $\{|\varphi_n^0\rangle\}$, deux soient associés à la même valeur propre, notée E^0. Pour simplifier, notons ces deux vecteurs $|\varphi_1^0\rangle$ et $|\varphi_2^0\rangle$.

2.1

Expliquez en quoi le procédé utilisé dans la section précédente n'est plus valable.

2.2

Soient $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ les deux vecteurs propres en lesquels se sont "transformés" $|\varphi_1^0\rangle$ et $|\varphi_2^0\rangle$ après perturbation. Justifiez qu'ils peuvent s'écrire à l'ordre le plus bas en λ

$$|\psi_1\rangle = \alpha|\varphi_1^0\rangle + \beta|\varphi_2^0\rangle$$
$$|\psi_2\rangle = \beta^*|\varphi_1^0\rangle - \alpha^*|\varphi_2^0\rangle$$

avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

2.3 Déterminant

Ecrivez l'action de H sur $|\psi_1\rangle$ et justifiez que l'on est ramené à résoudre un système de deux équations linéaires dont le déterminant doit être nul.

2.4

Déduisez-en les deux valeurs possibles de l'énergie propre de $|\psi_1\rangle$, notées E_+ et E_-. On admettra que l'on trouve les mêmes solutions pour $|\psi_2\rangle$.

2.5

Supposons maintenant

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 \\ 0 & E_0 & 0 \\ 0 & 0 & 3E_0 \end{pmatrix}$$

et

$$W = \lambda \begin{pmatrix} 2 & i & 5+2i \\ -i & -4 & 3 \\ 5-2i & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

Donnez le spectre approché de $H = H_0 + W$.

Solutions

1.1
$|\psi_k\rangle = \sum_n c_{n,k}\,|\varphi_n^0\rangle$.
Lorsque $\lambda \to 0$, par continuité on a $c_{k,k} \to 1$ et par conséquent $c_{n\neq k,k} \to 0$.

1.2 On cherche donc la valeur de l'énergie propre E_k associée à $|\psi_k\rangle$
On a

$$H\,|\psi_k\rangle = E_k|\psi_k\rangle$$

$$0 = (H_0 - E_k + W)|\psi_k\rangle = (H_0 - E_k + W)\sum_n c_{n,k}\,|\varphi_n^0\rangle$$

$$= \sum_n c_{n,k}\,\left((E_n^0 - E_k)|\varphi_n^0\rangle + W|\varphi_n^0\rangle\right)$$

Soit un m quelconque ; on multiplie à gauche par $\langle\varphi_m^0|$:

$$0 = c_{m,k}(E_m^0 - E_k) + \sum_n c_{n,k}\,\langle\varphi_m^0|W|\varphi_n^0\rangle = c_{m,k}(E_m^0 - E_k) + \lambda\sum_n c_{n,k}\,\tilde{W}_{m,n}$$

1.3 Cas $m = k$:

$$0 = c_{k,k}(E_k^0 - E_k) + \lambda\sum_n c_{n,k}\,\tilde{W}_{k,n} = c_{k,k}(E_k^0 - E_k) + \lambda\,c_{k,k}\,\tilde{W}_{k,k} + \lambda\sum_{n\neq k} c_{n,k}\,\tilde{W}_{k,n}$$

Comme $c_{k,k} \gg c_{n\neq k,k}$, on commence par négliger le dernier terme de cette équation, ce qui conduit à :

$$E_k \approx E_k^0 + W_{k,k} = E_k^0 + \langle\varphi_k^0|W|\varphi_k^0\rangle$$

1.4 La forme diagonale de H s'écrit ainsi

$$H \approx \begin{pmatrix} E_0 + 2\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 2E_0 - 4\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 3E_0 + \lambda \end{pmatrix}$$

1.5 Cas $m \neq k$:

$$0 = c_{m,k}(E_m^0 - E_k) + \lambda\,c_{k,k}\,\tilde{W}_{m,k} + \lambda\sum_{n\neq k} c_{n,k}\,\tilde{W}_{m,n}$$

Ici aussi on commence par négliger le dernier terme. Par ailleurs comme $c_{k,k} \approx 1$, on a

$$0 = c_{m,k}(E_m^0 - E_k) + \lambda \tilde{W}_{m,k}$$

ce qui conduit à

$$c_{m,k} = -\frac{W_{m,k}}{(E_m^0 - E_k)} \approx -\frac{W_{m,k}}{(E_m^0 - E_k^0)}$$

A l'ordre 0 en λ, on a bien sûr $|\psi_1\rangle = |\varphi_1^0\rangle$. Au premier ordre perturbatif, l'expression devient dans la base canonique

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{i}{E_0} \\ -\frac{5+2i}{2E_0} \end{pmatrix}$$

1.6 Plutôt que de négliger les termes en $c_{m\neq k,k}$ comme dans la question 1.3, insérons leur expression trouvée dans la question 1.5 dans les équations séculaires. On peut cependant continuer à prendre $c_{k,k} \approx 1$. On trouve

$$0 = (E_k^0 - E_k) + W_{k,k} + \sum_{n\neq k} \frac{|W_{n,k}|^2}{(E_k^0 - E_n^0)}$$

1.7 Cet exemple illustre une situation où l'effet perturbatif est nul au premier ordre, car $W_{k,k} = 0$. On trouve alors par exemple

$$E_1 \approx E_1^0 + \lambda^2 \left(\frac{|i|^2}{-E_0} + \frac{|3+4i|^2}{-2E_0} \right) = E_1^0 - \frac{7}{2}\frac{\lambda^2}{E_0}$$

2.1 On avait supposé précédemment que $E_k^0 - E_{n\neq k}$ était une échelle d'énergie plus grande que l'amplitude de la perturbation $W_{k,n}$, ce qui n'est bien sûr plus vrai si $E_k^0 = E_{n\neq k}$.

2.2 A l'intérieur du sous-espace associé à une même valeur propre dégénérée, le choix des vecteurs est arbitraire (l'hamiltonien non-perturbé est proportionnel à l'identité dans ce sous-espace). Ce n'est plus le cas suite à la perturbation, donc à l'ordre le plus faible on peut s'attendre à ce que la perturbation brise cette invariance. On va donc a minima écrire que les nouveaux vecteurs propres sont une combinaison linéaires des anciens vecteurs propres dégénérés. Le choix des coefficients garantit le caractère orthonormé de la nouvelle base propre.

2.3 On cherche les solutions de

$$H|\psi_1\rangle = E|\psi_1\rangle$$

$$(H_0 - E + W)(\alpha|\varphi_1^0\rangle + \beta|\varphi_2^0\rangle) = 0$$

ce qui donne, après projection sur $|\varphi_1^0\rangle$ et $|\varphi_2^0\rangle$:

$$\begin{cases} (E_0 - E + W_{1,1})\,\alpha + W_{1,2}\,\beta = 0 \\ W_{2,1}\,\alpha + (E_0 - E + W_{2,2})\,\beta = 0 \end{cases}$$

Ceci peut être vu comme un système linéaire à deux équations et deux inconnues, α et β. Ce couple de paramètres n'est pas identiquement nul (normalisation), donc le déterminant du système doit l'être.

2.4 On en déduit (avec $\delta E = E_0 - E$)

$$(\delta E + W_{1,1})(\delta E + W_{2,2}) - |W_{2,1}|^2 = 0$$

$$\delta E^2 + (W_{1,1} + W_{2,2})\delta E + W_{1,1}W_{2,2} - |W_{2,1}|^2 = 0$$

On trouve les racines de ce trinôme en δE, ce qui conduit à deux solutions

$$E_\pm = E_0 + \frac{W_{1,1} + W_{2,2}}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(W_{1,1} - W_{2,2})^2 + 4|W_{2,1}|^2}$$

En effectuant les m êmes opérations avec $H|\psi_2\rangle$, on trouve les mêmes résultats. Le premier terme $(W_{1,1} + W_{2,2})/2$ correspond simplement à un décalage global des énergies ; il ne lève pas la dégénéréscence dans ce sous-espace. Ceci est fait par le deuxième terme. Ce terme n'est jamais nul, à moins que la perturbation soit complètement triviale. Les deux états se "repoussent" en énergie, d'une quantité $E_{\text{gap}} = \sqrt{(W_{1,1} - W_{2,2})^2 + 4|W_{2,1}|^2}$

2.5 Pour la valeur propre proche de $3E_0$, le résultat est comme en 1.4. Pour les deux états d'énergie propre E_0, les énergies après perturbation sont

$$E_\pm = E_0 - \lambda \pm |\lambda|\sqrt{10}$$