Cette petite classe sera consacrée à une famille d'approches théoriques puissantes en mécanique quantique: les techniques dites perturbatives. Il s'agit de résoudre de façon approchée des problèmes pour lesquels souvent une résolution exacte n'est pas possible. Ces techniques n'ont pas été abordées en amphi bien qu'elles constituent la matière du chapitre 9 de votre livre de cours dont nous conserverons les notations. L'objet de cette petite classe est de redémontrer les résultats les plus importants et de les exploiter dans un cas simple et important: l'effet Stark dont les applications sont nombreuses (voir figure pour une application à l'étude des plasmas par spectroscopie).

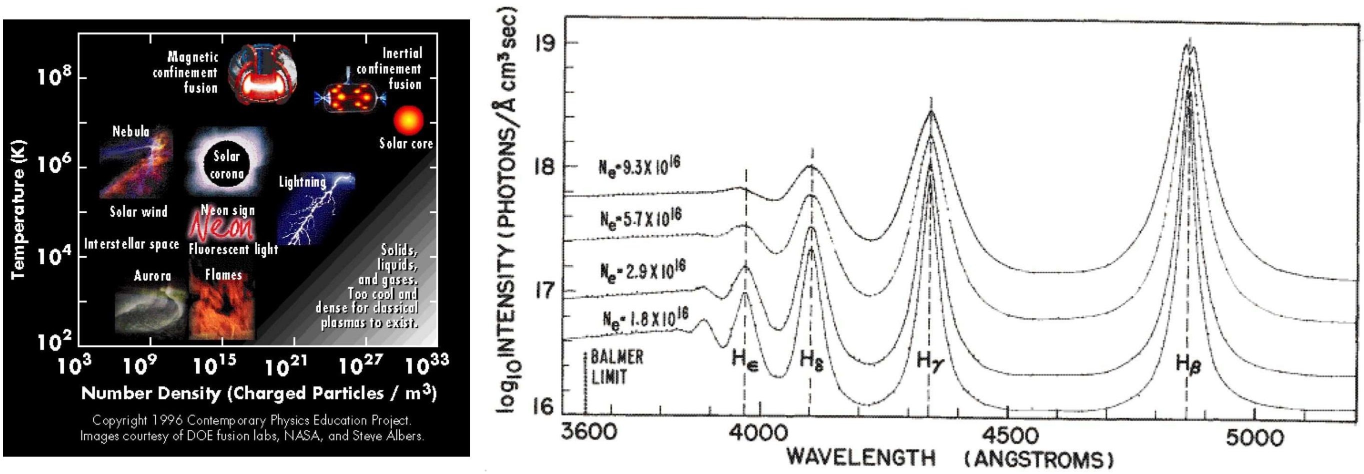

FIG. 1: Elargissement des raies spectrales d'émission dans un plasma en fonction de la densité d'électrons ionisés. Les électrons ionisés créent un champ électrique local dynamique qui élargit les raies d'émission par effet Stark. Cet élargissement donne une information sur la densité du plasma. Raies Balmer: H-β (n=4→2), H-γ (n=5→2), H-δ (n=6→2), H-ϵ (n=7→2). [Detailed study of Stark broadening of Balmer lines in High-density plasma, Phys. Rev. A **6**, 1132 (1972).]

Soit $\hat{H}_0$ un hamiltonien dont nous connaissons les vecteurs propres $|\psi_n^0>$ (orthonormés) et valeurs propres E_n^0 associées. Il s'agira de notre système de référence. Supposons désormais que nous nous interessons à un système quantique dont l'hamiltonien $\hat{H}$ ne diffère de $\hat{H}_0$ que par un terme $\lambda \hat{H}_1$ où λ est petit et réel.

Pour diagonaliser $\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$, nous effectuons un développement limité, que nous appelerons développement perturbatif, de ses vecteurs propres $|\psi_n>$ et valeurs propres $W_n = W_n(\lambda)$, soit:

$$|\psi_n(\lambda)>=|\psi_n^0> + \lambda|\psi_n^1> + \lambda^2|\psi_n^2> + ... \tag{1}$$
$$W_n(\lambda) = W_n^{(0)} + \lambda W_n^{(1)} + \lambda^2 W_n^{(2)} + ... \tag{2}$$

avec par définition $W_n^{(0)} = E_n^0$. Pour alléger les formules, nous utiliserons ci-dessous la notation: $|\psi_n^0>=|n>$.

A. Théorie générale: niveaux non dégénérés.

1) En imposant que $|\psi_n(\lambda)>$ soit normalisé pour tout λ et en choisissant le terme de phase de $|\psi_n^1>$ tel que $<n|\psi_n^1>$ est réel, montrer que: $<n|\psi_n^1>=0$.

2) Etablir les relations suivantes:

$$\hat{H}_0|\psi_n^1> + \hat{H}_1|n>= E_n^0|\psi_n^1> + W_n^{(1)}|n> \tag{3}$$
$$\hat{H}_0|\psi_n^2> + \hat{H}_1|\psi_n^1>= E_n^0|\psi_n^2> + W_n^{(1)}|\psi_n^1> + W_n^{(2)}|n> \tag{4}$$

3) *Correction du premier ordre à l'énergie.* Démontrer que: $W_n^{(1)} =< n|\hat{H}_1|n >$

Dans le cas d'un niveau non dégénéré, la correction à l'énergie du niveau $|\psi_n^0 >= |n >$ s'obtient au premier ordre en prenant la valeur moyenne de la perturbation sur le niveau $|n >$.

4) *Correction du premier ordre au vecteur propre.* Montrer l'expression suivante:

$$|\psi_n^1 >= \sum_{k \neq n} \frac{< k|\hat{H}_1|n >}{E_n^0 - E_k^0}|k >, \tag{5}$$

On voit que cette formule ne s'applique qu'au cas considéré ici de niveau non-dégénéré.

5) *Correction au deuxième ordre à l'énergie.* Montrer que la correction au deuxième ordre s'écrit:

$$W_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{| < k|\hat{H}_1|n > |^2}{E_n^0 - E_k^0} \tag{6}$$

B. Application: effet Stark du fondamental de l'atome d'hydrogène.

Considérons un atome d'hydrogène plongé dans un champ électrique statique uniforme $\mathcal{E}$ parallèle à Oz. A l'Hamiltonien étudié en cours pour l'atome isolé (énergie cinétique et interaction électron/proton), il faut ajouter le terme "Stark" d'interaction du moment dipolaire électrique q$\vec{r}$ avec le champ électrique: $W_S = -q\vec{\mathcal{E}}\vec{r} = -q\mathcal{E}\hat{z}$. Pour tout champ réaliste, ce terme est petit par rapport aux énergies des premiers niveaux de l'atome non perturbé. On rappelle l'expression des harmoniques sphériques $Y_{l,m}$ pour l=(0,1) (page 215 du cours):

$$Y_{0,0}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \qquad Y_{1,0}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}cos\theta, \qquad \text{et:} \qquad Y_{1,0}(\theta,\phi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(sin\theta)e^{\pm i\phi}$$

1) Montrer que le déplacement en énergie du fondamental est quadratique en $\mathcal{E}$.

2) Montrer que (a) le moment dipolaire induit est linéaire en champ et (b) parallèle au champ appliqué.

C. Théorie générale: niveaux dégénérés. Etudier le cas de la correction au premier ordre à l'énergie dans le cas d'un niveau d'énergie E_n^0 dégénéré p fois.

D: Application: effet Stark du niveau n=2 de l'atome d'hydrogène. Etudier la "levée de dégénérescence" du niveau n=2. Montrer que l'énergie des photons émis par relaxation d'électrons du niveau n=2 au nivau n=1 (raie Lyman α) peut être ajustée par un champ électrique. Indication: on posera $\gamma = -q < 2,1,0|\hat{z}|2,0,0 >$ sans chercher à le calculer, et on s'attachera à la parité des Y_{lm} sous inversion: ($\vec{r} \to -\vec{r}$), soit: ($r \to r$, $\theta \to \pi - \theta$, $\phi \to \pi + \phi$).