OSCILLATEUR HARMONIQUE PERTURBE

1./ Perturbation stationnaire

Une particule de masse m est soumise à un potentiel harmonique $\hat{V}^{(0)} = \frac{1}{2}k\hat{x}^2$. Une faible perturbation $\hat{V}^{(1)} = \frac{1}{2}(\delta k)\hat{x}^2$ s'ajoute à $\hat{V}^{(0)}$.

1-/ Montrer que les corrections en énergie, au premier et au second ordre (au sens de la théorie des perturbations) de l'état fondamental de l'oscillateur sont respectivement :

$$\boldsymbol{E}^{(1)} = \frac{1}{4}\frac{\delta \boldsymbol{k}}{\boldsymbol{k}}\hbar\omega \text{ et } \boldsymbol{E}^{(2)} = -\frac{1}{16}\left(\frac{\delta \boldsymbol{k}}{\boldsymbol{k}}\right)^2 \hbar\omega$$

où ω est la fréquence angulaire de l'oscillateur : $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

2-/ Montrer, par un calcul exact, que les expressions précédentes représentent une très bonne approximation de l'énergie de l'oscillateur.

On donne :

L'expression de l'opérateur position $\hat{X}$ en fonction des opérateurs création et annihilation $\hat{a}^\dagger$ et $\hat{a}$:

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)$$

dont les actions sur un état $|n\rangle$ de l'oscillateur non perturbé sont respectivement :

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad , \quad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

2./ Perturbation dépendant du temps

Oscillateur harmonique perturbé par un champ électrique créneau

On considère un oscillateur harmonique à une dimension x, de masse m et de pulsation ω_0, de charge q. Soient $|\phi_n\rangle$ et $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$ les états propres et valeurs propres de son Hamiltonien $\hat{H}_0$. Pour $t < 0$, l'oscillateur est dans l'état fondamental $|\phi_0\rangle$. A $t = 0$, il est soumis à un « créneau » de champ électrique de durée τ ; la perturbation correspondante s'écrit :

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} -q\mathsf{E}\ \hat{x} \text{ pour } 0 \le t \le \tau \\ 0 \qquad \text{pour } t < 0 \text{ et } t > \tau \end{cases}$$

E est l'amplitude du champ. Soit $\mathrm{P}_{0\to n}$ la probabilité de trouver l'oscillateur dans l'état $|\phi_n\rangle$ après la fin du créneau.

(a) Calculer $\mathrm{P}_{0\to 1}$ en utilisant la théorie des perturbation dépendant du temps au premier ordre. Comment varie $\mathrm{P}_{0\to 1}$ avec τ, ω_0 étant fixé.

(b) Montrer que pour obtenir $\mathrm{P}_{0\to 2}$, il faut pousser le calcul de perturbation dépendant du temps au moins jusqu'au second ordre. Calculer $\mathrm{P}_{0\to 2}$ à cet ordre de perturbation.

Les outils...

I-/ RAPPEL DE COURS SUR L'OSCILLATEUR HARMONIQUE

- Hamiltonien de l'oscillateur harmonique non perturbé : $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{X}^2$

on pose : $\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$ (sans dimension) $\rightarrow \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} = \frac{1}{2}\left[\frac{\hat{P}^2}{m\hbar\omega} + \frac{\hat{X}^2}{\frac{\hbar}{m\omega}}\right]$ et :

$$\begin{cases} \hat{\hat{X}} = \dfrac{\hat{X}}{\sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}} \\ \hat{\hat{P}} = \dfrac{\hat{P}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \end{cases} \quad \text{variables réduites}$$

$$\left[\hat{X}, \hat{P}\right] = i\hbar \Rightarrow \left[\hat{\hat{X}}, \hat{\hat{P}}\right] = i$$

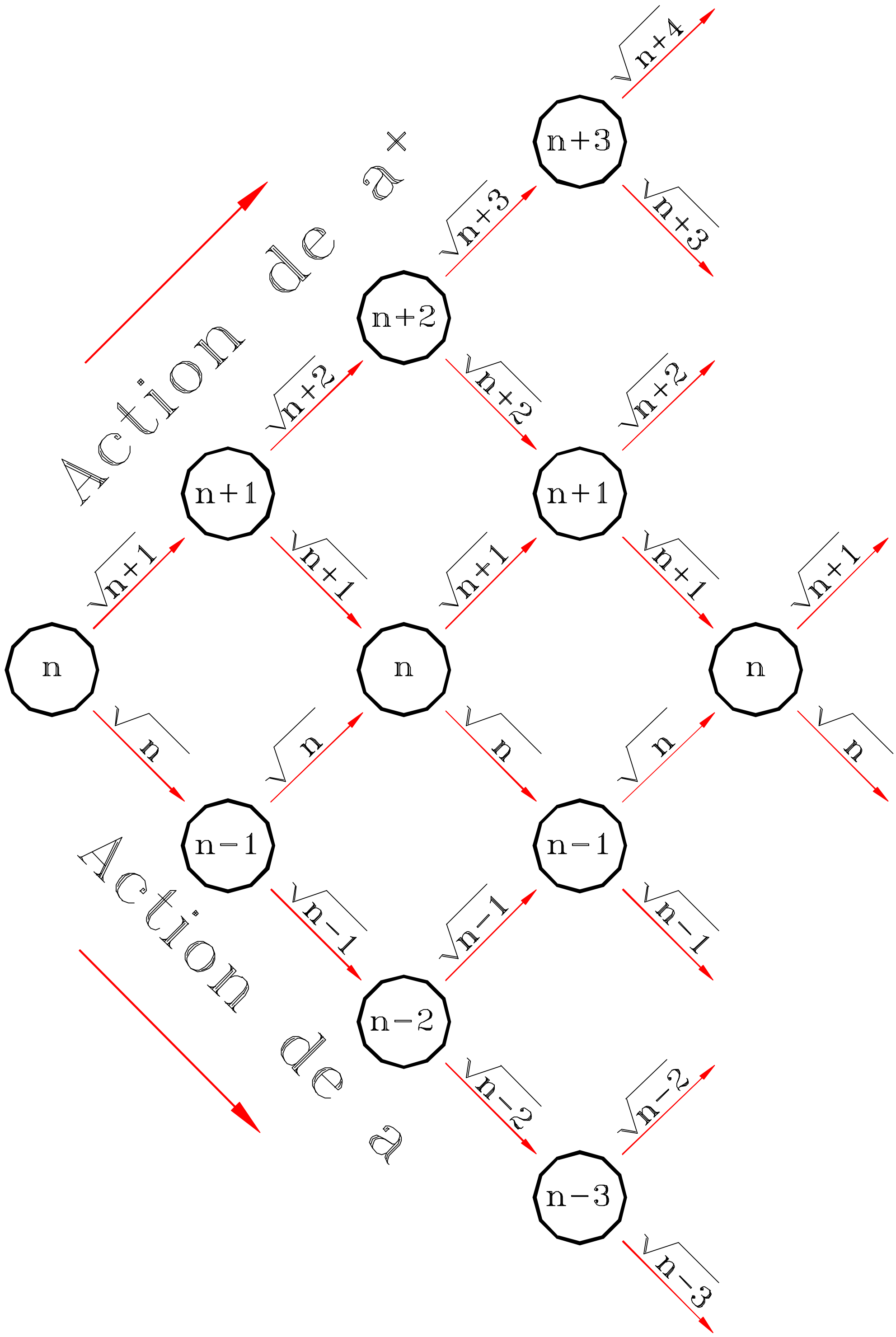
$$\hat{\hat{H}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\hat{P}}^2 + \hat{\hat{X}}^2\right) = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\hat{X}} - i\hat{\hat{P}}\right)}_{\hat{a}^\dagger}\underbrace{\left(\hat{\hat{X}} + i\hat{\hat{P}}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}}_{\hat{a}} - \frac{i}{2}\underbrace{\left[\hat{\hat{X}}, \hat{\hat{P}}\right]}_{i}$$

$$\hat{\hat{H}} = \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \rightarrow \hat{H} = \hbar\omega\left(\underbrace{\hat{a}^\dagger\hat{a}}_{\hat{N}} + \frac{1}{2}\right) = \left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$\begin{cases} \hat{a}^\dagger = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\hat{X}} - i\hat{\hat{P}}\right) \\ \hat{a} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\hat{X}} + i\hat{\hat{P}}\right) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \hat{\hat{X}} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right) \\ \hat{\hat{P}} = \dfrac{i}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right) \end{cases} \text{d'où : } \begin{cases} \hat{X} = \sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right) \\ \hat{P} = i\sqrt{\dfrac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right) \end{cases}$$

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = \hat{1}$$

$\begin{cases} \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \\ \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \end{cases}$ où $\hat{a}^\dagger$ et $\hat{a}$ sont les opérateurs *création* et *annihilation.*



II- / Problèmes stationnaires

I-/ Théorie des perturbations stationnaires - *Définition :*

L'étude quantique des systèmes physiques **conservatifs** (c'est-à-dire dont l'Hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps) est basée sur l'équation aux valeurs propres de l'opérateur Hamiltonien.
La théorie des perturbations stationnaires est une méthode d'approximation qui permet dans certains cas, d'obtenir **analytiquement** des solutions approchées de cette équation aux valeurs propres.

Résultats de la théorie :

La théorie est applicable lorsque l'Hamiltonien $\hat{H}$ du système étudié peut être mis sous la forme

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{hamiltonien non perturbe}} + \underbrace{\hat{W}}_{\text{perturbation}} \quad \left(\hat{W} << \hat{H}_0\right)$$

- ***Perturbation d'un niveau non dégénéré $E_n^{(0)}$:***

  - ***-Correction au premier ordre à l'énergie :***

La correction au **premier ordre** à une énergie non dégénérée $E_n^{(0)}$ est simplement égale à la valeur moyenne du terme de perturbation $\hat{W}$ dans l'état propre non perturbé $|\varphi_n\rangle$.

$$\boxed{E_n = E_n^{(0)} + \underbrace{\langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle}_{E_n^{(1)}}}$$

  - ***-Correction au premier ordre au vecteur propre :***

$$\boxed{|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \underbrace{\sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}} |\varphi_p\rangle}_{\text{correction au 1er ordre}}}$$

  - ***-Correction au second ordre à l'énergie :***

$$\boxed{E_n^{(2)} = \sum_{p \neq n} \frac{\left|\langle \varphi_p | \hat{W} | \varphi_n \rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}}}$$

d'où, à l'ordre 2 :

$$\boxed{E_n = E_n^{(0)} + \underbrace{\langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle}_{E_n^{(1)}} + \underbrace{\sum_{p \neq n} \frac{\left|\langle \varphi_p | \hat{W} | \varphi_n \rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}}}_{E_n^{(2)}}}$$

Perturbation d'un niveau dégénéré $E_n^{(0)}$:

La correction au premier au premier ordre de l'énergie est obtenue en diagonalisant la perturbation dans le sous-espace de dégénérescence associé à $E_n^{(0)}$. Les vecteurs propres correspondent à l'approximation d'ordre 0.

III- / Problèmes non stationnaires

Le développement en perturbation

Les 3 représentations :

- Soit $|\psi_S(t_0)\rangle$ un vecteur d'état en **représentation de Schrödinger**, i.e. son évolution dans le temps est régie par l'équation de Schrödinger. La représentation de Schrödinger emploie une transformation unitaire **ACTIVE** :

$$|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi_S(t_0)\rangle = \hat{U}^{\dagger}(t_0, t)|\psi_S(t_0)\rangle$$

où $\hat{U}(t, t_0)$ est l'opérateur d'évolution.

Le vecteur est transformé mais tous <u>les opérateurs sont constants dans le temps</u> (à moins qu'ils ne dépendent EXPLICITEMENT du temps). Les vecteurs de base sont inchangés. Les opérateurs sont définis par leur action sur les vecteurs de base.

• La **représentation de Heisenberg** utilise une transformation unitaire équivalente mais **PASSIVE**. <u>Le vecteur d'état est constant</u> :

$$|\psi_H\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle = \hat{U}(t_0,t)|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t,t_0)|\psi_S(t)\rangle$$

Les vecteurs de base sont modifiés et par conséquent, les opérateurs aussi. L'opérateur $\hat{A}_H(t)$ (dans la nouvelle base) s'exprime en fonction de $\hat{A}_S(t)$ (dans l'ancienne base) par la relation :

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}(t_0,t)\hat{A}_S(t)\hat{U}^\dagger(t_0,t) = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}_S(t)\hat{U}(t,t_0)$$

Passage d'une représentation à l'autre :

La représentation de Heisenberg est obtenue par une transformation unitaire, pour tout instant t, à partir de la représentation de Schrödinger :

$$|\psi_H\rangle = \hat{U}(t_0,t)|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t,t_0)|\psi_S(t)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle$$

Les éléments de matrice de tout opérateur $\hat{A}$ sont indépendants de la représentation.

$$\langle\psi_S(t)|\hat{A}_S(t)|\Phi_S(t)\rangle = \langle\psi_S(t)|\hat{U}(t,t_0)\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}_S(t)\hat{U}(t,t_0)\hat{U}^\dagger(t,t_0)|\Phi_S(t)\rangle$$
$$= \langle\psi_H|\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}_S(t)\hat{U}(t,t_0)|\Phi_H\rangle = \langle\psi_H|\hat{A}_H(t)|\Phi_H\rangle$$

Les prédictions de la mécanique quantique sont indépendantes de la représentation.

• La représentation d'interaction (dite : intermédiaire)

Supposons que le Hamiltonien d'un système quelconque soit $\hat{H}_{0S}(t)$ (en représentation de Schrödinger) et l'opérateur (unitaire) d'évolution correspondant, soit $\hat{U}_0(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{0S}(t-t_0)}$. Nous avons :

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}_0(t,t_0) = \hat{H}_{0S}(t)\hat{U}_0(t,t_0) \text{ avec } \hat{U}_0(t_0,t_0) = \hat{I} \text{ et } \hat{U}_0(t,t_0)\hat{U}_0^\dagger(t,t_0) = \hat{I} \qquad (1)$$

Supposons maintenant que le système soit perturbé de telle façon que son Hamiltonien devienne $\hat{H}_S(t) = \hat{H}_{0S}(t) + \hat{W}_S(t)$. Pour un tel système, le vecteur d'état en représentation d'interaction, $|\psi_I(t)\rangle$ est défini à partir du vecteur d'état en représentation de Schrödinger par :

$$\boxed{|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)|\psi_S(t)\rangle}$$

Comment évolue $|\psi_I(t)\rangle$?

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_I(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}_0^\dagger(t,t_0)|\psi_S(t)\rangle = i\hbar\left[\left(\frac{d}{dt}\hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\right)|\psi_S(t)\rangle + \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\frac{d}{dt}|\psi_S(t)\rangle\right]$$
$$= -\hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\hat{H}_{0S}(t)|\psi_S(t)\rangle + \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\hat{H}_S(t)|\psi_S(t)\rangle$$

(où nous avons utilisé $(1)^\dagger = -i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}_0^\dagger(t,t_0) = \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\hat{H}_0(t)$)

Nous pouvons maintenant écrire :

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_I(t)\rangle = -\underbrace{\hat U_0^\dagger \hat H_{0S}(t)\hat U_0}_{\hat H_{0I}(t)}\underbrace{\hat U_0^\dagger|\psi_S(t)\rangle}_{|\psi_I(t)\rangle}+\underbrace{\hat U_0^\dagger \hat H_S(t)\hat U_0}_{\hat H_I(t)}\underbrace{\hat U_0^\dagger|\psi_S(t)\rangle}_{|\psi_I(t)\rangle}$$

$$= -H_{0I}(t)|\psi_I(t)\rangle + \left[\underbrace{H_{0I}(t)+W_I(t)}_{\hat H_I(t)}\right]|\psi_I(t)\rangle = W_I(t)|\psi_I(t)\rangle$$

c'est-à-dire :

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_I(t)\rangle = \hat W_I(t)|\psi_I(t)\rangle$$

qu'on peut encore écrire sous la forme d'une équation intégrale :

$$d|\psi_I(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\hat W_I(t)|\psi_I(t)\rangle dt$$

$$\int_{t_0}^{t} d|\psi_I(t')\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat W_I(t')|\psi_I(t')\rangle dt'$$

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_I(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat W_I(t')|\psi_I(t')\rangle dt'$$

équation intégrale qui peut être résolue par itérations.

Le ket $|\psi_I(t)\rangle$ peut alors être développé en série de puissances de la forme :

$$\boxed{|\psi_I(t)\rangle = \left\{ I + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\hat W_I(t') + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} dt'\hat W_I(t')\int_{t_0}^{t'} dt''\hat W_I(t'') + \cdots \right\}|\psi_I(t_0)\rangle}$$

La représentation d'interaction assigne une dépendance en temps aux vecteurs et aux opérateurs.

Quand doit-on utiliser la représentation d'interaction ?

La représentation d'interaction est souvent utilisée lorsque $\hat H_{0S}$ est indépendant du temps et $\hat W_S(t)$ une petite correction par rapport à $\hat H_{0S}$. Supposons que le problème gouverné par $\hat H_{0S}$ ait déjà été résolu, soit exactement, soit de façon approchée. Supposons que $\hat W_S(t) = 0$ pour $t \le 0$. Alors $|\psi_I(0)\rangle = |\psi_S(0)\rangle$. En négligeant les termes d'ordre supérieur, à 1, nous avons :

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat W_I(t')|\psi_I(0)\rangle dt'$$

avec $\hat W_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\hat W_S(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}$

Soit $\{|n\rangle\}$ une base propre orthonormée de $\hat H_0$ et soit $|m\rangle$ l'état du système à $t = 0$, i.e. $|\psi_I(0)\rangle = |m\rangle$. Nous avons : $\hat H_0|m\rangle = E_m|m\rangle$.

La probabilité $P(E_k,t)$ de trouver le système dans l'état propre $|k\rangle$ de $\hat{H}_0$ à l'instant t, i.e.la probabilité de trouver la valeur propre E_k, est $\left|\langle k|\psi_I(t)\rangle\right|^2$ (les prédictions en mécanique quantique sont indépendantes de la représentation).

$$\langle k|\psi_I(t)\rangle = \langle k|m\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle k|\hat{W}_I(t')|m\rangle dt' = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_m)t'}\langle k|\hat{W}_S(t')|m\rangle dt'$$

avec $\langle k|m\rangle = 0$. Nous avons donc :

$$\boxed{P(E_k,t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_m)t'}\langle k|\hat{W}_S(t')|m\rangle dt'\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{km}t'}\langle k|\hat{W}_S(t')|m\rangle dt'\right|^2}$$

où $\omega_{km} = \dfrac{E_k - E_m}{\hbar}$ est la pulsation de Bohr de la transition $|k\rangle \leftrightarrow |m\rangle$.

En notation condensée, cette probabilité s'écrit :

$$\boxed{P(E_k,t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{km}t'}W_{km}(t')dt'\right|^2}$$

Où $W_{km}(t') = \langle k|\hat{W}_S(t')|m\rangle$ est l'élément de matrice de la perturbation entre les états propres $|k\rangle$ et $|m\rangle$ de $\hat{H}_0$.

C'est le résultat au premier ordre, de la théorie des perturbations dépendant du temps. $P(E_k,t)$ est la probabilité de transition $|k\rangle \leftrightarrow |m\rangle$ pour une durée t de l'interaction.

Si t est la durée de la perturbation « branchée » à l'origine $t=0$ alors :

$$\int_0^t e^{i\omega_{km}t'}\langle k|\hat{W}_S(t')|m\rangle dt' = \int_0^\infty e^{i\omega_{km}t'}\langle k|\hat{W}_S(t')|m\rangle dt'$$

Et, au facteur $\dfrac{1}{\hbar^2}$ près, la probabilité au premier ordre est le module au carré de la transformée de Fourier de l'élément de matrice de la perturbation, transformée de Fourier prise pour la pulsation de Bohr $\omega_{km} = \dfrac{E_k - E_m}{\hbar}$ de la transition considérée.

Si $\hat{W}_S(t)$ est indépendant du temps, i.e., un terme petit **et constant** est ajouté au temps $t=0$ à l'Hamiltonien, alors :

$$P(E_k,t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle k|\hat{W}_S|m\rangle\right|^2 \left|\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_m)t}-1}{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_m)}\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle k|\hat{W}_S|m\rangle\right|^2\left|\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}-e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}}{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_m)}\right|^2$$

$$= \frac{\left|\langle k|\hat{W}_S|m\rangle\right|^2}{(E_k-E_m)^2}\left|2\sin\frac{E_k-E_m}{2\hbar}t\right|^2 = \frac{\left|\langle k|\hat{W}_S|m\rangle\right|^2}{(\hbar\omega_{km})^2}4\sin^2\left(\frac{\omega_{km}t}{2}\right)$$

où nous avons utilisé le fait que $\left|e^{i\theta}-e^{i\varphi}\right|=2\sin\left(\frac{\theta-\varphi}{2}\right)$

Au second ordre :

$$\left|\psi_I^{(2)}(t)\right\rangle=\left|\psi_I(t_0)\right\rangle+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\hat{W}_I(t')\left|\psi_I(t_0)\right\rangle+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t}dt'\hat{W}_I(t')\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{W}_I(t'')\left|\psi_I(t_0)\right\rangle$$

Supposons comme précédemment que $\hat{W}_S(t)=0$ pour $t\le 0$. Alors $\left|\psi_I(0)\right\rangle=\left|\psi_S(0)\right\rangle=\left|m\right\rangle$

$$\left\langle k\middle|\psi_I^{(2)}(t)\right\rangle=\underbrace{\left\langle k\middle|m\right\rangle}_{=0}+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\left\langle k\middle|\hat{W}_I(t')\middle|m\right\rangle+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t dt'\int_0^{t'}dt''\left\langle k\middle|\hat{W}_I(t')\hat{W}_I(t'')\middle|m\right\rangle$$

En injectant la relation de fermeture $\sum_j \left|j\right\rangle\left\langle j\right|$ de la base $\left\{\left|n\right\rangle\right\}$ de états propres de l'Hamiltonien non perturbé $\hat{H}_{0S}$ entre $\hat{W}_I(t')$ et $W_I(t'')$, on obtient :

$$\left\langle k\middle|\psi_I^{(2)}(t)\right\rangle=\underbrace{\left\langle k\middle|m\right\rangle}_{=0}+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\left\langle k\middle|\hat{W}_I(t')\middle|m\right\rangle+\cdots$$

$$\cdots\frac{1}{(i\hbar)^2}\sum_j\int_0^t dt'\int_0^{t'}dt''\left\langle k\middle|\hat{W}_I(t')\middle|j\right\rangle\left\langle j\middle|\hat{W}_I(t'')\middle|m\right\rangle$$

Soit en repassant en représentation de Schrödinger :

(En se rappelant que $\hat{W}_I(t)=\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{0S}t}}_{U^\dagger(t,0)}\hat{W}_S(t)\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{0S}t}}_{U(t,0)}$)

$$\boxed{\begin{aligned}\left\langle k\middle|\psi_I^{(2)}(t)\right\rangle&=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_m)t'}\left\langle k\middle|\hat{W}_S(t')\middle|m\right\rangle+\cdots\\&\cdots\frac{1}{(i\hbar)^2}\sum_j\int_0^t dt'\int_0^{t'}dt''e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_j)t'}\left\langle k\middle|\hat{W}_S(t')\middle|j\right\rangle\left\langle j\middle|\hat{W}_S(t'')\middle|m\right\rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_j-E_m)t''}\end{aligned}}$$

En notation condensée, cette probabilité s'écrit au second ordre inclus :

$$\boxed{P(E_k,t)=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{km}t'}W_{km}(t')dt'\right|^2+\frac{1}{\hbar^4}\left|\sum_j\int_0^t dt'e^{i\omega_{kj}t'}W_{kj}(t')\int_0^{t'}dt''W_{jm}(t'')e^{i\omega_{jm}t''}\right|^2}$$

Au second ordre interviennent des états propres $\left|j\right\rangle$ intermédiaires entre les états $\left|k\right\rangle$ et $\left|m\right\rangle$ susceptibles d'être couplés avec ces états.

Corrigé

1./ Perturbation stationnaire

1-/ Le Hamiltonien de l'oscillateur est $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}$ avec $\hat{H}^{(1)} = \frac{1}{2}(\delta k)\hat{x}^2$. La base standard est constituée des états propres $|n\rangle$ de $\hat{H}^{(0)}$, Hamiltonien de l'oscillateur non perturbé. Ces états sont orthonormés, i.e. : $\langle n'|n\rangle = \delta_{nn'}$.

La correction au premier ordre de l'énergie du fondamental est :

$$E^{(1)} = \langle n=0|\hat{H}^{(1)}|n=0\rangle = \frac{1}{2}\delta k\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle$$

$$\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle 0|\left(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\right)^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left[\underbrace{\langle 0|\hat{a}^2+\hat{a}^{\dagger 2}|0\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle 0|\hat{a}\hat{a}^\dagger|0\rangle}_{=1} + \underbrace{\langle 0|\hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle}_{=0}\right] = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

Par conséquent :

$$\boxed{E^{(1)} = \frac{1}{2}\delta k\frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{1}{4}\left(\frac{\delta k}{k}\right)\hbar\omega} \qquad (1)$$

La correction au second ordre est : $E^{(2)} = \sum_{j\neq 0}\frac{\left|\langle j|\hat{H}^{(1)}|0\rangle\right|^2}{E_0 - E_j}$ (2)

$$\langle j|\hat{H}^{(1)}|0\rangle = \frac{1}{2}\delta k\langle j|\hat{x}^2|0\rangle = \frac{1}{2}\delta k\frac{\hbar}{2m\omega}\langle j|\left(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\right)^2|0\rangle$$

j devant être différent de zéro, le seul terme donnant une contribution non nulle est le terme en $j=2$.

$\left(\hat{a}^\dagger\right)^2|0\rangle = \sqrt{2}|2\rangle$. D'où : $\langle j|\hat{H}^{(1)}|0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\delta k\frac{\hbar}{2m\omega}$

et puisque : $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ et $E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$

$(2)\Rightarrow$

$$\boxed{E^{(2)} = -\frac{1}{16}(\delta k)^2\frac{\hbar}{m^2\omega^3} = -\frac{1}{16}\left(\frac{\delta k}{k}\right)^2\hbar\omega} \qquad (3)$$

2-/ L'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur non perturbé est $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\left(\frac{k}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$

et par conséquent, l'énergie de l'oscillateur perturbé est :

$$E = \frac{1}{2}\hbar\left(\frac{k+\delta k}{m}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(1+\frac{\delta k}{k}\right)^{\frac{1}{2}}$$

soit, puisque $\delta k << k$ (i.e. $H^{(1)} << H^{(0)}$) :

$$\boxed{E = \frac{1}{2}\hbar\omega\left\{1 + \frac{1}{2}\frac{\delta k}{k} - \frac{1}{8}\left(\frac{\delta k}{k}\right)^2 + 0\left(\frac{\delta k}{k}\right)^3\right\}} \qquad (4)$$

On voit dans (4) que les termes en $\frac{\delta k}{k}$ et $\left(\frac{\delta k}{k}\right)^2$ correspondent respectivement aux corrections du premier et second ordre de la théorie des perturbations. Celle-ci fournit donc ici une très bonne approximation de l'énergie exacte de l'oscillateur.

2./ Perturbation dépendant du temps

Oscillateur harmonique perturbé par un champ électrique créneau

(a) Au premier ordre des perturbations dépendant du temps :

$$\mathrm{P}_{0\to1}^{(1)} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\tau dt\, e^{i\omega_0 t} V_{01}(t)\right|^2 = \frac{|V_{01}|^2}{\hbar^2}\left(\frac{\sin\frac{\omega_0\tau}{2}}{\frac{\omega_0}{2}}\right)^2$$

$$V_{01} = -q\mathrm{E}\,\langle 0|\hat{x}|1\rangle = -q\mathrm{E}\,\langle 0|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\left(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\right)|1\rangle = -q\mathrm{E}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\langle 0|\left[\sqrt{1+1}|2\rangle + \sqrt{1}|0\rangle\right]$$

$$= -q\mathrm{E}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}$$

Puisque la base des états propres de l'oscillateur est orthonormée $\left(\langle n|m\rangle = \delta_{nm}\right)$

D'où :

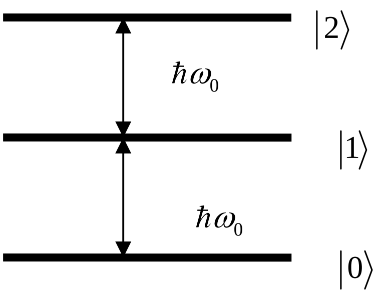
$$\boxed{\mathrm{P}_{0\to1}^{(1)} = \frac{2q^2\mathrm{E}^2}{\hbar m\omega_0^3}\sin^2\frac{\omega_0\tau}{2}}$$

(b)

$$V_{02} = -q\mathrm{E}\,\langle 0|\hat{x}|2\rangle = -q\mathrm{E}\,\langle 0|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\left(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\right)|2\rangle = -q\mathrm{E}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\langle 0|\left[\sqrt{2+1}|3\rangle + \sqrt{2}|1\rangle\right] = 0$$

Puisque la base des états propres de l'oscillateur est orthonormée $\left(\langle n|m\rangle = \delta_{nm}\right)$

Donc : $\mathrm{P}_{0\to2}^{(1)} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\tau dt\, e^{i2\omega_0 t} V_{02}(t)\right|^2 = 0$. On doit pousser le calcul de perturbation au second ordre.



Si l'on s'intéresse à une transition $|0\rangle \leftrightarrow |2\rangle$, le seul état intermédiaire susceptible d'être couplé par l'opérateur $\hat{x}$ est l'état $|1\rangle$. La correction au premier ordre est nulle, comme nous l'avons vu précédemment puisque $W_{02} = 0$.

Au second ordre on a :

$$\left\langle 2 \middle| \psi_I^{(2)}(\tau) \right\rangle = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 W_{21}W_{10} \int_0^\tau dt\, e^{i\omega_0 t} \int_0^t dt'\, e^{i\omega_0 t'} = -\frac{W_{21}W_{10}}{\hbar^2} \int_0^\tau dt\, e^{i\omega_0 t} \left(\frac{e^{i\omega_0 t} - 1}{i\omega_0}\right)$$

$$= -\frac{W_{21}W_{10}}{i\omega_0\hbar^2} \left(\frac{e^{2i\omega_0\tau} - 1}{2i\omega_0} - \frac{e^{i\omega_0\tau} - 1}{i\omega_0}\right) = -\frac{W_{21}W_{10}}{2\omega_0^2\hbar^2} \left(e^{2i\omega_0\tau} - 2e^{i\omega_0\tau} + 1\right)$$

$$= -\frac{2W_{21}W_{10}}{\omega_0\hbar^2} e^{i\omega_0\tau} \sin^2\frac{\omega_0\tau}{2}$$

Et par conséquent :

$$\mathrm{P}_{0\to 2}^{(2)}(\tau) = \left|\left\langle 2 \middle| \psi_I^{(2)}(\tau) \right\rangle\right|^2 = \left|\frac{2W_{21}W_{10}}{\omega_0^2}\right|^2 \sin^4\frac{\omega_0\tau}{2}$$

Avec :

$$W_{01} = V_{01} = -q\mathrm{E}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \text{ et } W_{12} = V_{12} = \sqrt{2}V_{01}$$

D'où

$$\boxed{\mathrm{P}_{0\to 2}^{(2)}(\tau) = \frac{2q^4\mathrm{E}^4}{\hbar^2 m^2\omega_0^6} \sin^4\frac{\omega_0\tau}{2} \simeq \frac{2q^4\mathrm{E}^4}{\hbar^2 m^2\omega_0^6}\left(\frac{\omega_0\tau}{2}\right)^4 = \frac{q^4\mathrm{E}^4}{8\hbar^2 m^2\omega_0^2}\tau^4 \text{ pour } \omega_0\tau << 1}$$