Université de la Méditerranée
UFR-Sciences de Luminy

Master Physique et Sciences de la Matière
Année M1 – Semestre 1, 2009-10

MQ-II – Devoir n°6 à rendre pour le mercredi 18 novembre 2009

1. Particules identiques.

Les états à une particule (de masse m) dans un potentiel puits carré infini de base a sont donnés par

$$\psi_n(x) = \sqrt{\tfrac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{n\pi}{a}\,x\right), \qquad E_n = \kappa n^2, \qquad n \in \mathbb{N}^*, \quad \kappa = \tfrac{1}{2m}\left(\tfrac{\pi\hbar}{a}\right)^2.$$

Considérons deux telles particules de même masse m dans ce puits de potentiel et n'intéragissant pas entre elles. On s'intéresse aux fonctions d'onde à deux particules
$\Psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \langle x_1 \otimes x_2 | \Psi_{n_1 n_2}\rangle$ et aux niveaux d'énergie associés $E_{n_1 n_2}$.

1. Si les particules sont discernables, écrire la fonction d'onde à deux particules et l'énergie correspondante. Discuter la dégénérescence du niveau fondamental et du premier état excité.
2. Si les deux particules sont des bosons identiques, écrire la fonction d'onde à deux particules et l'énergie correspondante. Discuter la dégénérescence du niveau fondamental et du premier état excité.
3. Si les deux particules sont des fermions identiques, écrire la fonction d'onde à deux particules et l'énergie correspondante du niveau fondamental.
4. Les deux particules sont des électrons. En tenant compte de l'interaction entre les spins, écrire la fonction d'onde à deux électrons et l'énergie correspondante. Discuter la dégénérescence du niveau fondamental et du premier état excité.

2. Règles de sélection et émission spontanée.

Le calcul de taux d'émission spontanée (dans les atomes à symétrie sphérique) fait intervenir de façon essentiel les éléments de matrice de l'opérateur vectoriel de position

$$\langle n'\ell'm'|\,\vec{q}\,|n\ell m\rangle.$$

1. Calculer les commutateurs $[L_z, q_k]$ pour $k = x, y, z$.
2. À partir des éléments de matrice $\langle n'\ell'm'|\,[L_z, q_k]\,|n\ell m\rangle$, en déduire des relations sur les éléments de matrice $\langle n'\ell'm'|q_k|n\ell m\rangle$ $k = x, y, z$.
3. En conclure l'existence d'une règle de sélection sur les nombres magnétiques : les éléments de matrice $\langle n'\ell'm'|\vec{q}|n\ell m\rangle$ ne sont pas nuls si $|m - m'| \leq 1$, d'où la possibilité d'émission d'un photon.

3. Oscillateur harmonique à raideur variable.

Pour le potentiel harmonique unidimensionnel $V(x) = \frac{1}{2}\,k\,x^2$ les niveaux d'énergie sont donnés par

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right), \quad n \in \mathbb{N},$$

et pulsation $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$. Supposons que la raideur du ressort puisse être modifiée de façon adiabatique $k \longrightarrow (1 + \lambda)k$, soit en chauffant ou, soit en refroidissant lentement le système.

1. Déterminer de façon *exacte* les nouveaux niveaux d'énergie $E_n(\lambda)$. Donner le développement jusqu'à l'ordre deux en λ de $E_n(\lambda)$ en fonction de E_n.
2. À présent, à l'aide de la théorie perturbative stationnaire, déterminer la perturbation λW et donner l'expression de la correction du premier ordre à l'énergie E_n faisant intervenir W et l'état propre $f_n(x) = \langle x|n\rangle$.
3. Le calcul explicite de cette correction fait intervenir $\langle n|V|n\rangle$. Écrire x^2 en termes des opérateurs de création et d'annihilation et en déduire le calcul de cet élément de matrice. *(Vous pouvez également utiliser le théorème du viriel pour ceux qui connaissent).*
4. Comparer cette correction à l'ordre un au développement effectué dans la première question.
5. Répéter la démarche pour calculer la correction du second ordre à l'énergie E_n et vérifier que c'est en accord avec la question 1.
6. Quid des vecteurs propres $|n(\lambda)\rangle$?

4. Oscillateur harmonique dans un champ électrique constant homogène.

Une particule chargée dans un potentiel harmonique unidimensionnel est soumise à un champ émectrique constant homogène. L'Hamiltonien de l'oscillateur haronique H_0 est modifié par la perturbation $W = -qEx$

1. Montrer que la perturbation en énergie n'apparait qu'à partir du 2nd ordre.
2. L'équation de Schrödinger peut être résolue exactement (cf exo 1 du DM-1) par translation du spectre. Donner l'expression de l'énergie exacte et en déduire que la perturbation en énergie n'est que (!) du 2nd ordre.

5. Dégénérée ou non dégénérée ? Telle est la question !.

Imaginons un système quantique avec seulement trois états linéairement indépendants formant une base $|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$ de l'espace des états. La matrice de l'Hamiltonien dans cette base est donné par

$$H(\lambda) = V_0 \begin{pmatrix} (1-\lambda) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \lambda \\ 0 & \lambda & 2 \end{pmatrix},$$

où V_0 est une constante et λ un paramètre ($|\lambda| \ll 1$).

1. Déterminer les valeurs propres de l'Hamiltonien non perturbé $H_0 = H(0)$ et analyser les dégénérescences.
2. Déterminer les valeurs propres et vecteurs propres de $H(\lambda)$ (diagonalisation exacte) et développer jusqu'à l'ordre 2 en perturbation valeurs propres et vecteurs propres respectifs $|x(\lambda)\rangle, |y(\lambda)\rangle, |z(\lambda)\rangle$.
3. Utiliser la perturbation non dégénérée pour déterminer les corrections jusqu'à l'ordre deux en énergie pour la valeur propre non dégénérée de H_0 et comparer avec le résultat exact.
4. Utiliser la perturbation cas dégénéré à l'ordre un pour la valeur propre doublement dégénérée de H_0 et comparer avec le résultat exact.

MQ-II – CORRECTION du Devoir n°6.

1. Particules identiques.

Remarque : $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$ au sens du produit scalaire sur $L^2[\mathbb{R}, dx)$.

1. Si les particules sont discernables :

$$\Psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2) = \tfrac{2}{a}\sin\left(\frac{\pi n_1}{a}\,x_1\right)\sin\left(\frac{\pi n_2}{a}\,x_2\right) \ ,$$

avec comme spectre d'énergie

$$E_{n_1 n_2} = E_{n_1} + E_{n_2} = \kappa(n_1^2 + n_2^2), \qquad n_1, n_2 = 1, 2, \dots$$

Le niveau fondamental $E_{11} = 2\kappa$ est non dégénéré avec pour état fondamental Ψ_{11} ; par contre, le premier niveau excité est doublement dégénéré $E_{12} = E_{21} = 5\kappa$ avec le doublet $\Psi_{12}(x_1, x_2)$ et $\Psi_{21}(x_1, x_2) = \Psi_{12}(x_2, x_1)$.

2. Si les deux particules sont des bosons identiques, alors il faut prendre la symétrisation

$$\Psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = (\psi_{n_1} \vee \psi_{n_2})\,(x_1, x_2)$$

ce qui amène une discussion sur la valeur $\langle \psi_{n_1} | \psi_{n_2} \rangle = \delta_{n_1 n_2}$. Si $\langle \psi_{n_1} | \psi_{n_2} \rangle = 0$ $(n_1 \neq n_2)$, alors

$$\Psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = (\psi_{n_1} \vee \psi_{n_2})\,(x_1, x_2) = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)\right),$$

ou, si $n_1 = n_2 = n$ avec $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$,

$$\Psi_{nn}(x_1, x_2) = (\psi_n \vee \psi_n)\,(x_1, x_2) = \psi_n(x_1)\,\psi_n(x_2).$$

Ainsi, pour l'état fondamental $n_1 = n_2 = 1$, d'énergie $E_{11} = 2\kappa$ c'est comme précédemment. Le premier état excité d'énergie $E_{12} = 5\kappa$ est non dégénéré

$$(\psi_1 \vee \psi_2)\,(x_1, x_2) = \tfrac{\sqrt{2}}{a}\left[\sin\left(\frac{\pi}{a}\,x_1\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}\,x_2\right) + \sin\left(\frac{2\pi}{a}\,x_1\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}\,x_2\right)\right].$$

3. Si les deux particules sont des fermions identiques, alors il faut prendre l'antisymétrisation avec $\langle \psi_{n_1} | \psi_{n_2} \rangle = 0$

$$\Psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = (\psi_{n_1} \wedge \psi_{n_2})\,(x_1, x_2) = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) - \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)\right)$$

donc nécessairement $n_1 \neq n_2$. L'état fondamental est non dégénéré

$$\Psi_{12}(x_1, x_2) = (\psi_1 \wedge \psi_2)\,(x_1, x_2) = \tfrac{\sqrt{2}}{a}\left[\sin\left(\frac{\pi}{a}\,x_1\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}\,x_2\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{a}\,x_1\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}\,x_2\right)\right],$$

et est du coup d'énergie $E_{12} = 5\kappa$.

4. Les deux particules sont des fermions identiques (électrons de spin 1/2). La prise en compte de l'interaction spin-spin conduit à l'addition des deux spins 1/2, état singlet antisymétrique ou état triplet symétrique et à modifier l'énergie par l'addition d'un terme $E_J = \alpha\hbar^2 \left(J(J+1) - 3/2\right)/2$, $J = 0, 1$ et disons $\alpha > 0$, d'où $E_{J=0} < E_{J=1}$.
   L'état fondamental est non dégénéré d'énergie $E_{12} + E_{J=0}$ et est donné par une fonction spatiale symétrique et un état de spin antisymétrique
$$\Psi_0(x_1, x_2) = (\psi_1 \vee \psi_2)(x_1, x_2)|0\,0\rangle, \qquad E_0 = 5\kappa - 3\alpha\hbar^2/4,$$
   alors que le premier état excité d'énergie $E_{12} + E_{J=1}$ est trois fois dégénéré et se construit avec une fonction spatiale antisymétrique et un état de spin symétrique
$$\Psi_1(x_1, x_2) = (\psi_1 \wedge \psi_2)(x_1, x_2)|1\,M\rangle, \qquad E_1 = 5\kappa + \alpha\hbar^2/4.$$
   (Si $\alpha < 0$, c'est l'état fondamental qui sera trois fois dégénéré et le premier état excité ne le sera point).

2. Règles de sélection et émission spontanée.

1. Le commutateur avec L_z se calcule comme
$$[L_z, q_k] = \varepsilon_{zab}\, q_a\, [p_b, q_k] = -i\hbar\varepsilon_{zab}\delta_{bk} q_a = i\hbar\varepsilon_{zka} q_a,$$
   d'où les commutateurs $[L_z, q_x] = i\hbar q_y$, $[L_z, q_y] = -i\hbar q_x$, et $[L_z, q_z] = 0$.
2. Calculons les éléments de matrice de deux manières, la première en utilisant le calcul de la question précédente, la seconde en explicitant le commutateur et en utilisant le fait que $L_z^\dagger = L_z$ et $L_z|n\ell m\rangle = \hbar m|n\ell m\rangle$. Ainsi, d'une part,
$$\langle n'\ell' m'|\,[L_z, q_k]\,|n\ell m\rangle = i\hbar\varepsilon_{zka}\langle n'\ell' m'|q_a|n\ell m\rangle,$$
   et d'autre part,
$$\langle n'\ell' m'|\,[L_z, q_k]\,|n\ell m\rangle = \langle n'\ell' m'|\,(L_z q_k - q_k L_z)\,|n\ell m\rangle = \hbar(m' - m)\langle n'\ell' m'|q_k|n\ell m\rangle$$
   d'où la relation entre les éléments $\langle n'\ell' m'|q_k|n\ell m\rangle$
$$(m' - m)\langle n'\ell' m'|q_k|n\ell m\rangle = i\,\varepsilon_{zka}\,\langle n'\ell' m'|q_a|n\ell m\rangle.$$
   Discussion :
   • $k = z$: $(m' - m)\langle n'\ell' m'|q_z|n\ell m\rangle = 0$, donc soit $m = m'$, soit $\langle n'\ell' m'|q_z|n\ell m\rangle = 0$. Donc $\langle n'\ell' m'|q_z|n\ell m\rangle \sim \delta_{mm'}$ a priori.
   • $k = x, y$: Éliminant entre les deux équations un des éléments de matrice
$$\begin{aligned}(m' - m)\langle n'\ell' m'|q_x|n\ell m\rangle &= i\,\langle n'\ell' m'|q_y|n\ell m\rangle,\\ (m' - m)\langle n'\ell' m'|q_y|n\ell m\rangle &= -i\,\langle n'\ell' m'|q_x|n\ell m\rangle.\end{aligned}$$
   conduit par exemple à
$$(m' - m)^2\langle n'\ell' m'|q_x|n\ell m\rangle = \langle n'\ell' m'|q_x|n\ell m\rangle,$$
   donc $|m - m'| = 1$, sinon $\langle n'\ell' m'|q_x|n\ell m\rangle = \langle n'\ell' m'|q_y|n\ell m\rangle = 0$.
   Rassemblant les résultats de la discussion, les éléments de matrices $\langle n'\ell' m'|q_k|n\ell m\rangle$ peuvent être donc non nuls seulement si la règle de sélection $|m - m'| \leq 1$ pour m est satisfaite.

3. Oscillateur harmonique à raideur variable.

1. Si on pose $\omega(\lambda) = \omega\sqrt{1+\lambda}$, définition valable si $|\lambda| \leq 1$, alors $\omega(\lambda)$ est une nouvelle pulsation et il suffit d'effectuer la substitution $\omega \to \omega(\lambda)$ dans la formule de l'énergie ; ainsi on a la formule exacte

$$E_n(\lambda) = \hbar(n+\tfrac{1}{2})\omega(\lambda) = E_n\sqrt{1+\lambda} \simeq E_n\left(1+\tfrac{1}{2}\lambda-\tfrac{1}{8}\lambda^2\right)+\mathcal{O}(\lambda^3) \qquad |\lambda|\leq 1. \qquad (E)$$

Cette expression devra être comparée avec le développement en série formelle

$$E_n(\lambda) = \sum_{k\geq 0} E_n^{(k)}, \qquad E_n^{(0)} = E_n.$$

Remarque : $\lambda = -1$ donne le cas libre, et pour $\lambda < -1$ le potentiel harmonique devient répulsif et il ne peut y avoir d'états liés. En revanche, pour $\lambda > 1$ fixé, il faut considérer le potentiel $\frac{\lambda}{2}(1+\frac{1}{\lambda})m\omega^2x^2$ et c'est le terme en $1/\lambda$ qui peut être traité du point de vue perturbatif.

2. La perturbation est ici $W = \lambda V$ où $V = m\omega^2x^2/2$ est le potentiel harmonique non perturbé. Puisque l'on a à disposition une base d'états propres normalisés $|n\rangle$ diagonalisant H_0, la correction à l'énergie E_n au premier ordre est donnée par

$$E_n^{(1)} = \langle n|W|n\rangle = \lambda\langle n|V|n\rangle,$$

éléments de matrice diagonaux qu'il faut à présent calculer, ce qui peut se faire de manière algébrique.

3. De la définition même des opérateurs de création et d'annihilation pour l'oscillateur harmonique

$$a^\dagger = \tfrac{1}{\sqrt{2m}}(p+im\omega q), \quad a = \tfrac{1}{\sqrt{2m}}(p-im\omega q), \quad [a,a^\dagger] = \hbar\omega\mathbb{1} \implies q = x = \tfrac{i}{\omega\sqrt{2m}}(a-a^\dagger)$$

on obtient, d'une part,

$$x^2 = \tfrac{-1}{2m\omega^2}\left(a^2 - a^\dagger a - aa^\dagger + (a^\dagger)^2\right)$$

et d'autre part, avec les actions

$$a|n\rangle = \sqrt{n\hbar\omega}\,|n-1\rangle, \qquad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{(n+1)\hbar\omega}\,|n+1\rangle$$

on trouve

$$a^2|n\rangle = \hbar\omega\sqrt{n(n-1)}\,|n-2\rangle, \qquad a^\dagger a|n\rangle = \hbar\omega n\,|n\rangle,$$
$$aa^\dagger|n\rangle = \hbar\omega(n+1)\,|n\rangle, \qquad (a^\dagger)^2|n\rangle = \hbar\omega\sqrt{(n+1)(n+2)}\,|n+2\rangle.$$

Ainsi du fait de l'orthogonalité entre les vecteurs propres

$$\langle n|V|n\rangle = \tfrac{m\omega^2}{2}\langle n|x^2|n\rangle = \tfrac{m\omega^2}{2}\,\tfrac{-1}{2m\omega^2}(0-\hbar\omega n-\hbar\omega(n+1)+0) = \tfrac{1}{2}(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega = \tfrac{1}{2}E_n.$$

Autre voie : par application du théorème du viriel, $2\langle T\rangle = \langle x\frac{\partial V}{\partial x}\rangle$ (où T est l'énergie cinétique), à l'oscillateur harmonique on obtient $\langle T\rangle = \langle V\rangle$. Comme dans un état $|n\rangle$ donné $E_n = \langle T\rangle + \langle V\rangle = 2\langle V\rangle$, dans le cas de l'oscillateur harmonique, on retrouve bien le résultat.

4. On a donc
$$E_n^{(1)} = \langle n|W|n\rangle = \lambda\langle n|V|n\rangle = \tfrac{\lambda}{2}\, E_n,$$
qui est bien le terme d'ordre un en λ dans le développement (E).
5. À l'ordre 2, on obtient dans la base des états propres $|n\rangle$
$$E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{|\langle k|W|n\rangle|^2}{E_n - E_k} = \left(\tfrac{1}{2}m\omega^2\lambda\right)^2 \sum_{k\neq n} \frac{|\langle k|x^2|n\rangle|^2}{E_n - E_k},$$
qui nécessite le calcul via la question 3 des éléments de matrice non diagonaux $\langle k|x^2|n\rangle$, $k \neq n$. On trouve
$$\begin{aligned}\langle k|x^2|n\rangle &= \tfrac{-1}{2m\omega^2}\langle k|a^2 - a^\dagger a - aa^\dagger + (a^\dagger)^2|n\rangle \\ &= \tfrac{-\hbar}{2m\omega}\left(\sqrt{n(n-1)}\,\delta_{k,n-2} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{k,n+2}\right).\end{aligned}$$
D'où, après substitution,
$$\begin{aligned}E_n^{(2)} &= \left(\frac{\lambda\hbar\omega}{4}\right)^2 \sum_{k\neq n} \frac{\left(\sqrt{n(n-1)}\,\delta_{k,n-2}+\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{k,n+2}\right)^2}{E_n-E_k} \\ &= \lambda^2\tfrac{\hbar\omega}{16}\sum_{k\neq n}\tfrac{n(n-1)\,\delta_{k,n-2}+(n+1)(n+2)\,\delta_{k,n+2}}{n-k} = \lambda^2\tfrac{\hbar\omega}{16}\left(\tfrac{n(n-1)}{n-(n-2)} + \tfrac{(n+1)(n+2)}{n-(n+2)}\right) \\ &= -\lambda^2\tfrac{\hbar\omega}{32}(4n+2) = \tfrac{-1}{8}\lambda^2(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega = \tfrac{-1}{8}\lambda^2 E_n\end{aligned}$$
résultat en total accord avec le développement (E).
6. Pour ce qui est des vecteurs propres $|n(\lambda)\rangle$ de $H(\lambda)$, Hamiltonien d'un oscillateur harmonique de pulsation $\omega(\lambda)$, on part des vecteurs propres de H_0
$$f_n(x) = \langle x|n\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \tfrac{1}{\sqrt{2^n n!}}\, H_n(\xi)\, e^{-\xi^2/2}, \qquad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x$$
où ξ est une variable sans dimension, et on y substitue partout $\omega \to \omega(\lambda) = \omega\sqrt{1+\lambda}$ pour obtenir l'expression exacte de $f_n(\lambda)(x) = \langle x|n(\lambda)\rangle$.

4. Oscillateur harmonique dans un champ électrique constant homogène.

Puisque l'on traite d'une perturbation de l'oscillateur harmonique, on utilisera des résultats de l'exercice précédent .

1. La correction à l'ordre un de l'énergie $\varepsilon_0 = E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ est
$$\varepsilon_1 = \langle n|W|n\rangle = -qE\langle n|x|n\rangle = 0,$$
compte tenu des expressions obtenues dans la question 3 de l'exercice précédent.
À l'ordre deux,
$$\varepsilon_2 = \sum_{k\neq n} \frac{|\langle k|W|n\rangle|^2}{E_n - E_k} = \tfrac{(qE)^2}{\hbar\omega} \sum_{k\neq n} \frac{|\langle k|x|n\rangle|^2}{n-k},$$
qui nécessite le calcul, via la question 3 de l'exercice précédent, des éléments de matrice non diagonaux $\langle k|x|n\rangle$, $k \neq n$. On trouve comme résultat intermédiaire
$$\langle k|x|n\rangle = \tfrac{i}{\omega\sqrt{2m}}\,\langle k|a - a^\dagger|n\rangle = i\sqrt{\tfrac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\delta_{k,n-1} - \sqrt{n+1}\delta_{k,n+1}\right),$$

d'où

$$\varepsilon_2 = \left(\tfrac{qE}{\omega\sqrt{2m}}\right)^2 \sum_{k\neq n} \tfrac{n\delta_{k,n-1}+(n+1)\delta_{k,n+1}}{n-k} = \tfrac{(qE)^2}{2m\omega^2}\left(\tfrac{n}{n-(n-1)} + \tfrac{n+1}{n-(n+1)}\right) = -\tfrac{(qE)^2}{2m\omega^2},$$

2. L'Hamiltonien $H = H_0 + W = H_0 - qEx$ se ramène à celui d'un autre oscillateur harmonique de même pulsation pas complétion du carré et changement de variable d'espace :

$$\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2 - qEx = \tfrac{1}{2}m\omega^2\Big(\underbrace{x - \tfrac{qE}{m\omega^2}}_{=:x'}\Big)^2 - \tfrac{(qE)^2}{2m\omega^2}, \qquad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x'}.$$

Si on regarge l'intensité E du champ électrique comme paramètre ($E \to \lambda E$), l'équation stationnaire $H(\lambda)\psi = \varepsilon(\lambda)\psi$ (et prendre $\lambda = 1$ en fin de compte) se réécrit comme celle d'un autre oscillateur harmonique de pulsation ω, $\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x')^2\right)\psi = \left(\varepsilon(1) + \frac{(qE)^2}{2m\omega^2}\right)\psi$ de spectre d'énergie $E'_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$. Ainsi, pour chaque niveau n on a le résultat exact

$$\varepsilon(\lambda) = \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right) - \lambda^2\tfrac{(qE)^2}{2m\omega^2} = \varepsilon_0 + \lambda^2\varepsilon_2, \qquad (\lambda \to 1),$$

toute autre correction à l'énergie ε_0 étant nulle : $\varepsilon_k \sim \delta_{k2}$.

5. Dégénérée ou non dégénérée ? Telle est la question !.

1. La matrice de H_0 dans la base donnée

$$H(0) = V_0\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{pmatrix},$$

montre que la valeur propre V_0 est de multiplicité deux, vecteurs propres $|x\rangle$ et $|y\rangle$, tandis que la valeur propre $2V_0$ est non dégénérée de vecteur propre $|z\rangle$.

2. On diagonalise la matrice $H(\lambda)$ en résolvant son équation caractéristique

$$\det(H(\lambda) - \eta\mathbb{1}) = (V_0(1-\lambda) - \eta)\left((V_0-\eta)(2V_0-\eta) - (\lambda V_0)^2\right) = 0,$$

d'où une première racine évidente $\eta_1 = V_0(1-\lambda)$, et reste à résoudre l'équation quadratique, $\eta^2 - 3V_0\eta + 2V_0^2 - \lambda^2V_0^2 = 0$ qui admet deux racines en η

$$\eta_2 = \tfrac{V_0}{2}\left(3 - \sqrt{1+4\lambda^2}\right) \simeq V_0(1-\lambda^2), \qquad \eta_3 = \tfrac{V_0}{2}\left(3 + \sqrt{1+4\lambda^2}\right) \simeq V_0(2+\lambda^2),$$

pour lesquelles le développement à l'ordre deux en λ a été explicité.

Les valeurs propres étant déterminées, passons aux vecteurs propres associés $|\eta\rangle$, ce qui revient à résoudre les trois systèmes linéaires

$$\begin{pmatrix}(1-\lambda) & 0 & 0\\ 0 & 1 & \lambda\\ 0 & \lambda & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix} = \eta_k\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix}, \qquad k = 1,2,3$$

On trouve les trois vecteurs

$$|\eta_1\rangle = |x\rangle, \quad |\eta_2\rangle = |y\rangle + \frac{\eta_2 - 1}{\lambda}|z\rangle, \quad |\eta_3\rangle = |z\rangle + \frac{\eta_3 - 2}{\lambda}|y\rangle.$$

Par inspection, on est amené à poser

$$\begin{aligned}
|x(\lambda)\rangle &= |x\rangle, \\
|y(\lambda)\rangle &= |y\rangle + \frac{1-\sqrt{1+4\lambda^2}}{2\lambda}|z\rangle \simeq |y\rangle + \lambda(\lambda^2-1)|z\rangle + \cdots \\
|z(\lambda)\rangle &= |z\rangle + \frac{\sqrt{1+4\lambda^2}-1}{2\lambda}|y\rangle \simeq |z\rangle + \lambda(1-\lambda^2)|y\rangle + \cdots
\end{aligned}$$

3. Appliquons la théorie des perturbations avec la notation générique du cours :

   Identifions la perturbation

$$\lambda W = \lambda V_0 \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \; W = V_0 \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

   dont il faudra utiliser les éléments de matrice.

   Le cas non dégénéré : $\varepsilon_0 = 2V_0$ et $\varphi_0 = |z\rangle$. Calcul de la correction à l'ordre un

$$\varepsilon_1 = \langle z|W|z\rangle = W_{33} = 0.$$

   Calcul de la correction à l'ordre deux

$$\varepsilon_2 = \sum_{k=x,y} \frac{|\langle k|W|z\rangle|^2}{2V_0 - V_0} = \tfrac{1}{V_0}(W_{13}^2 + W_{23}^2) = V_0.$$

   Ainsi le développement jusqu'à l'ordre deux donne

$$\varepsilon(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \cdots = V_0(2+\lambda^2) + \cdots$$

   ce qui coïncide bien avec le développement de η_3 obtenu dans la question 2.

4. Cas dégénéré : $\varepsilon_0 = V_0$ est doublement dégénérée. La démarche générale nous indique qu'il faut diagonaliser P_0WP_0 où P_0 est le projecteur que le sous-espace propre à ε_0, sous-espace que l'on sait engendré par $|x\rangle$ et $|y\rangle$. La matrice du projecteur P_0

$$P_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \; P_0WP_0 = V_0 \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

   matrice diagonale (!) qui sur le sous-espace propre en question à deux valeurs propres distinctes et non dégénérées $\varepsilon_1 = -V_0, 0.$ ayant respectivement comme vecteur propre $|x\rangle$ et $|y\rangle$. Ainsi à l'ordre un, on a la levée de dégénérescence

$$\varepsilon_0 = V_0 \;\longrightarrow\; \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 = \begin{cases} V_0(1-\lambda) & = \eta_1 \\ V_0 & \sim \eta_2 \end{cases}$$

   approximation tout à fait cohérente avec le calcul exact de la question 2.