Complément au cours#3 : Théorie des perturbations pour des niveaux dégénérés

S. Bernon

A. Rappel des équations

Les équations obtenues en théorie des perturbations sont :

$$\hat{H}_0|\Psi^{(0)}\rangle = W^{(0)}|\Psi^{(0)}\rangle \quad (1)$$

$$\hat{H}_0|\Psi^{(1)}\rangle + \hat{H}_1|\Psi^{(0)}\rangle = W^{(0)}|\Psi^{(1)}\rangle + W^{(1)}|\Psi^{(0)}\rangle \quad (2)$$

$$\hat{H}_0|\Psi^{(2)}\rangle + \hat{H}_1|\Psi^{(1)}\rangle = W^{(0)}|\Psi^{(2)}\rangle + W^{(1)}|\Psi^{(1)}\rangle + W^{(2)}|\Psi^{(0)}\rangle \quad (3)$$

B. Positionnement du problème

On suppose connues les solutions d'un problème de mécanique quantique donné. En d'autres termes on connaît l'ensemble des états propres $|n, r\rangle$ et des valeurs propres E_n d'un hamiltonien $\hat{H}_0$. Le degré de dégénérescence d'une énergie E_n est notée p_n .

On perturbe $\hat{H}_0$ d'une quantité "faible" $\lambda\hat{H}_1$ et on souhaite connaître les nouveaux états propres

$$|\Psi\rangle = |\Psi^{(0)}\rangle + \lambda|\Psi^{(1)}\rangle + \lambda^2|\Psi^{(2)}\rangle$$

et valeurs propres

$$W = W^{(0)} + \lambda W^{(1)} + \lambda^2 W^{(2)}$$

de $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1$.

C. Résolution

Dans la suite on cherche le vecteur propre de $\hat{H} : |\Psi\rangle$ correspondant à l'état perturbé de valeur propre non perturbée E_n . L'équation 1, nous montre que $|\Psi^{(0)}\rangle$ est vecteur propre de $\hat{H}^{(0)}$ et $W^{(0)} = E_n$. Comme l'énergie E_n est dégénérée, il y aura p_n états perturbés possibles que l'on note $|\Psi_{n,q}^{(0)}\rangle$ (où $q \in [1 : p_n]$) et qui sont des compositions linéaires des états $|n, r\rangle$:

$$|\Psi_{n,q}^{(0)}\rangle = \sum_{r=1}^{p_n} C_{q,r}^n |n, r\rangle \quad (4)$$

Nous allons maintenant chercher à déterminer les coefficients $C_{q,r}^n$ de la décomposition à l'ordre (0) ainsi que l'écart d'énergie à l'ordre (1) ($W_q^{(1)}$) de l'état $|\Psi_{n,q}^{(0)}\rangle$. Pour cela on multiplie l'équation (2) à gauche par $\langle n, r|$ et on obtient :

$$E_n \langle n, r | \Psi_{n,q}^{(1)} \rangle + \langle n, r | \hat{H}_1 | \Psi_{n,q}^{(0)} \rangle = E_n \langle n, r | \Psi_{n,q}^{(1)} \rangle + W_q^{(1)} \langle n, r | \Psi_{n,q}^{(0)} \rangle$$

. Après simplification, cette expression se réécrit sous la forme :

$$\sum_{r'=1}^{p_n} C_{q,r'}^n \langle n, r | \hat{H}_1 | n, r' \rangle = W_q^{(1)} C_{q,r}^n \quad \forall r \in [1 : p_n] \quad (5)$$

ce qui s'écrit de façon matricielle :

$$\begin{pmatrix} \langle n, 1 | \hat{H}_1 | n, 1 \rangle & \dots & \langle n, 1 | \hat{H}_1 | n, p_n \rangle \\ \dots & \dots & \dots \\ \langle n, p_n | \hat{H}_1 | n, 1 \rangle & \dots & \langle n, p_n | \hat{H}_1 | n, p_n \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{q,1}^n \\ \dots \\ C_{q,p_n}^n \end{pmatrix} = W_q^{(1)} \begin{pmatrix} C_{q,1}^n \\ \dots \\ C_{q,p_n}^n \end{pmatrix}$$

Les coefficients C_{q,p_n}^n et $W_q^{(1)}$ sont donc les coefficients des vecteurs propres et valeurs propres de la matrice

$$\begin{pmatrix} \langle n, 1 | \hat{H}_1 | n, 1 \rangle & \dots & \langle n, 1 | \hat{H}_1 | n, p_n \rangle \\ \dots & \dots & \dots \\ \langle n, p_n | \hat{H}_1 | n, 1 \rangle & \dots & \langle n, p_n | \hat{H}_1 | n, p_n \rangle \end{pmatrix}$$