

PHY3813H: Mécanique Quantique Avancée

David London

Université de Montréal

hiver 2006

PDF: <http://www.lps.umontreal.ca/~london/london.html>

Plan du Cours

- Bureau : V-210
- Téléphone : 343-5836
- courriel : london@lps.umontreal.ca
- heures de bureau : jeudi, 10h00 à 11h00, ou par rendez-vous

Horaire, local du cours:

- Cours: lundi, 11h30 à 13h30, Z-260
- Cours: mardi, 9h30 à 11h30. Z-260
- TP: mercredi, 8h30 à 10h30, Z-245

Modalités d'évaluation:

- Devoirs (8) : 20%
- Examen Intra (lundi, 20 février, 11h30 – 13h30, Z-245) : 30%
- Examen Final (lundi, 24 avril, 9h00 – 12h00, Z-240): 50%

Références:

- Mécanique Quantique, tome II, Cohen-Tannoudji, Diu et Laloë.
- Quantum Physics, S. Gasiorowicz,
- Introductory Quantum Mechanics, R.L. Liboff,
- autres textes en réserve à la bibliothèque.

Matière:

- addition de moments cinétiques (coefficients de Clebsch-Gordan),
- opérateurs tensoriels,
- théorème de Wigner-Eckart,
- particules identiques,
- perturbations indépendantes du temps,
- méthode des variations,
- atome d'hydrogène: structures fine et hyperfine,
- perturbations dépendantes du temps,
- diffusion.

Correcteur/Démonstrateur:

- Philippe Hamel:
 - Bureau : V-207
 - Téléphone : 343-6111 x0769
 - courriel : philippe.hamel@umontreal.ca
- Hélène Paquette:
 - Bureau : V-207
 - Téléphone : 343-6111 x0769
 - courriel : paquetteh@lps.umontreal.ca

IL FAUT POSER DES QUESTIONS! C'est la seule façon d'approfondir les nouveaux concepts de la mécanique quantique et développer son intuition.

C'est important d'assister aux cours. Mes notes ne donnent qu'un aperçu de la matière. Je les augmenterai en classe avec des explications détaillées. De plus, il est conseillé de consulter les références.

Table des Matières

- Postulats pg. 7
- Principe de Superposition pg. 10
- E.C.O.C. pg. 11
- Revue du Moment Angulaire pg. 12
- Conservation du Moment Angulaire pg. 14
- Addition de Moments Cinétiques pg. 22
- Coefficients de Clebsch-Gordan pg. 38
- Isospin pg. 44
- Opérateurs Tensoriels pg. 46
- Théorème Wigner-Eckart pg. 53
- Particules Identiques pg. 65
- Perturbations Indépendantes du Temps pg. 76
- Méthode des Variations pg. 108
- Le Vrai Atome d'Hydrogène pg. 136

- Effet Zeeman pg. 154
- Effet Stark pg. 161
- Muonium/Positronium pg. 164
- Perturbations Dépendantes du Temps pg. 169
- Perturbations Adiabatiques pg. 196
- Perturbations Brusques pg. 199
- Ondes Électromagnétiques pg. 206
- Coefficients d'Einstein pg. 221
- La Règle d'Or de Fermi pg. 224
- Temps de Vie pg. 236
- Diffusion pg. 250
- Diffusion: Particules Identiques pg. 272
- Théorème Optique pg. 282
- Approximation de Born pg. 286

Postulats

- À chaque quantité physique mesurable A on associe un opérateur hermitique \hat{A} . Les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles.

Lors d'une mesure de A , les résultats possibles sont les valeurs propres de \hat{A} , a_n :

$$\hat{A} \varphi_n = a_n \varphi_n .$$

φ_n est la fonction propre de \hat{A} correspondant à la valeur propre a_n .

- On suppose qu'on mesure l'observable A et qu'on trouve la valeur a_n . Cette mesure laisse le système dans l'état φ_n . (On appelle cela "l'effondrement de la fonction d'onde".)

- L'état d'un système à un temps t donné est représenté par une fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ continue. Toute information sur le système est contenue dans la fonction d'onde.

La probabilité qu'une particule décrite par la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ se trouve dans l'élément de volume d^3r est donnée par:

$$P(\vec{r}, t) d^3r = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r .$$

Pour un système dans l'état $\psi(\vec{r}, t)$, la valeur moyenne d'un observable A au temps t est

$$\langle A \rangle = \int d^3r \psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \psi(\vec{r}, t) .$$

L'incertitude sur la mesure de l'observable A est définie comme étant:

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} .$$

- La fonction d'onde d'un système se développe dans le temps selon l'équation de Schroedinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t) .$$

- Particules identiques: on considère une fonction d'onde décrivant un système contenant des particules identiques. Sous des permutations de ces particules, cette fonction d'onde doit être soit symétrique, soit antisymétrique.

Symétrique: particules de spin entier (bosons),

Antisymétrique: particules de spin $\frac{1}{2}$ -entier (fermions).

Principe de Superposition

On suppose qu'on connaît la fonction d'onde $\psi(x)$. Si on mesure l'observable A , quels résultats peut-on trouver, et avec quelles probabilités?

Pour répondre à cette question, on suit la démarche suivante. On développe $\psi(x)$ en fonction des états propres de \hat{A} . Si les valeurs propres a_n de \hat{A} sont discrètes, on a:

$$\psi(x) = \sum_n b_n \varphi_n(x) \quad , \quad b_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_n^*(x) \psi(x) .$$

Une mesure de A donne le résultat a_n avec probabilité $|b_n|^2$.

Pour le cas où les valeurs propres de \hat{A} sont continues, la démarche est similaire, sauf qu'il faut remplacer la sommation par une intégrale.

E.C.O.C.

Si deux opérateurs commutent, ils ont des états propres communs.

Remarque: ceci ne veut pas dire que *tous* les états propres sont communs, mais on peut trouver *des* états propres communs.

E.g.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$[A, B] = 0 \implies \text{vecteurs propres communs: } \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$[A, C] = 0 \implies \text{vecteurs propres communs: } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Mais $[B, C] \neq 0 \implies \nexists$ un ensemble de vecteurs propres communs.

On considère l'opérateur H d'un système dont les valeurs propres (les énergies) sont E . On suppose qu'il y a des dégénérescences. C'est-à-dire: il y a plus d'un état avec une énergie donnée E . Ça veut dire que si on mesure l'énergie et on trouve E , on ne connaît pas l'état avec certitude.

On améliore la situation en considérant un deuxième opérateur A qui commute avec H . Les deux opérateurs ont des états propres communs. Ces états sont caractérisés par les valeurs propres E et a . En mesurant ces deux observables, on peut distinguer les états.

Supposons qu'il y ait encore des dégénérescences (i.e. il y a plus d'un état avec les mêmes valeurs propres). Donc on considère un autre opérateur B qui commute avec H et A . On continue de cette façon jusqu'à ce que tout état soit bien défini par les valeurs propres E, a, b, \dots . Les opérateurs finaux H, A, B, \dots s'appelle un Ensemble d'Opérateurs qui Commutent (E.C.O.C.). La mesure de ces opérateurs donne l'information maximale sur le système.

Revue du Moment Angulaire

Mécanique classique: le moment angulaire orbital est une constante du mouvement, i.e. L_x, L_y, L_z tous conservés.

Mécanique quantique: composantes de \vec{L} ne commutent pas:

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k .$$

\implies on ne peut pas mesurer simultanément les 3 composantes du moment angulaire.

On peut mesurer simultanément \vec{L}^2 et une composante de \vec{L} (e.g. L_z):
 $[\vec{L}^2, L_z] = 0 \implies$ on cherche des états propres communs à \vec{L}^2 et L_z .

\exists un moment angulaire intrinsèque: le spin \vec{S} . À part le fait qu'il peut prendre des valeurs $\frac{1}{2}$ -entières (le moment angulaire orbital ne prend que des valeurs entières), \vec{S} agit comme $\vec{L} \implies$ désormais on utilise le symbole \vec{J} pour le moment angulaire général.

États propres communs à \vec{J}^2 et J_z : $|j, m\rangle$:

$$\vec{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle ,$$

$$J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle .$$

j est entier ou $\frac{1}{2}$ -entier, $-j, -j+1, \dots \leq m \leq \dots j-1, j$.

Opérateurs d'échelle:

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y ,$$

où

$$J_{\pm} |j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle .$$

Cas spécial important: spin- $\frac{1}{2}$. Il y a deux états, spin + et spin -:

$|+\rangle \equiv |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$ et $|-\rangle \equiv |\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle$. Dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, on a

$$\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma} , \quad \text{où} \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Conservation du Moment Angulaire

Moment angulaire conservé si $[H, L_z] = 0$ et $[H, \vec{L}^2] = 0$. On considère une particule dont le potentiel est $V(r)$. Nous avons

$$L_z = xp_y - yp_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) .$$

L_z est-il conservé?

L'Hamiltonien est

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(r) , \quad \vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} .$$

Il faut calculer $[H, L_z]$: 2 parties, $[\vec{\nabla}^2, L_z]$, $[V(r), L_z]$

(i) $[\vec{\nabla}^2, L_z]$:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2}, \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] = 0 .$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) - \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

termes proportionnels à y s'annulent.

$$\begin{aligned} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial y} + x \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right) - x \frac{\partial^3}{\partial x^2 \partial y} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + x \frac{\partial^3}{\partial x^2 \partial y} - x \frac{\partial^3}{\partial x^2 \partial y} \\ &= 2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} . \end{aligned}$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial y^2}, \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] = \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) - \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

termes proportionnels à x s'annulent.

$$\begin{aligned} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(-\frac{\partial}{\partial x} - y \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right) + y \frac{\partial^3}{\partial x \partial y^2} \\ &= -\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - y \frac{\partial^3}{\partial x \partial y^2} + y \frac{\partial^3}{\partial x \partial y^2} \\ &= -2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} . \end{aligned}$$

$$\therefore [\vec{\nabla}^2, L_z] = 0 .$$

(ii) $[V(r), L_z]$, où $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$:

$$\begin{aligned} \left[V(r), \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] &= V(r) \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) - \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) V(r) \\ &= -x \frac{\partial V(r)}{\partial y} + y \frac{\partial V(r)}{\partial x} \\ &= -x \frac{\partial V}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + y \frac{\partial V}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} \\ &= \frac{\partial V}{\partial r} \left(y \frac{\partial r}{\partial x} - x \frac{\partial r}{\partial y} \right) \\ &= \frac{\partial V}{\partial r} \left(y \frac{x}{r} - x \frac{y}{r} \right) = 0 . \end{aligned}$$

Donc: moment angulaire conservé. (Remarque: il faut démontrer que $[H, \vec{L}^2] = 0$, mais comme les L_i commutent avec H , \vec{L}^2 doit aussi.)

Comme la mécanique classique: moment angulaire conservé avec une force centrale.

Deux particules avec la même force centrale, non-interagissantes:

$H = H_1 + H_2$, avec

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \vec{\nabla}_1^2 + V(r_1) \quad , \quad H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m_2} \vec{\nabla}_2^2 + V(r_2) \quad .$$

Évidemment, $[L_{1z}, H_1] = 0$. De plus, $[L_{1z}, H_2] = 0$, car tous les observables reliés à une particule commutent avec tous les observables de l'autre particule.

Donc: \vec{L}_1 est conservé, ainsi que \vec{L}_2 .

Maintenant: on rajoute une interaction $V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$. (E.g. 2 satellites autour de la terre, on considère l'attraction gravitationnelle entre elles.)

Classique: comme la force n'est plus centrale, \vec{L}_1 et \vec{L}_2 ne sont pas conservés. Par contre $\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$ est conservé. Qu'est-ce qui se passe en mécanique quantique?

$$\Rightarrow H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \vec{\nabla}_2^2 + V(r_1) + V(r_2) + V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) .$$

Il faut calculer $[L_{1z}, V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)]$ et $[L_{2z}, V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)]$, où

$$|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2} .$$

$$\begin{aligned} [L_{1z}, V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)] &\sim \left[\left(x_1 \frac{\partial}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \right), V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \right] \\ &= x_1 \frac{\partial V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)}{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \frac{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{\partial y_1} \\ &\quad - y_1 \frac{\partial V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)}{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \frac{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{\partial x_1} \\ &= \frac{\partial V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)}{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \left[x_1 \frac{(y_1 - y_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - y_1 \frac{(x_1 - x_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right] \\ &= \frac{\partial V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)}{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} (y_1 x_2 - x_1 y_2) \neq 0! \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[L_{2z}, V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)] &\sim \left[\left(x_2 \frac{\partial}{\partial y_2} - y_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right), V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \right] \\
&= \frac{\partial V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)}{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \left[x_2 \frac{-(y_1 - y_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - y_2 \frac{-(x_1 - x_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right] \\
&= \frac{\partial V'(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)}{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} (-x_2 y_1 + y_2 x_1) .
\end{aligned}$$

La somme des deux termes = 0. Donc: même si L_{1z} et L_{2z} ne sont pas conservés séparément, la somme $L_{1z} + L_{2z}$ est conservée $\implies \vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$ est conservé (comme en mécanique classique).

Autre exemple: une particule avec moment angulaire orbital \vec{L} et spin \vec{S} . S'il n'y a qu'un potentiel $V(r)$, \vec{L} et \vec{S} sont conservés séparément.

On suppose que \exists un couplage $\vec{L} \cdot \vec{S}$ (couplage spin-orbite) \implies

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + \xi(r) \vec{L} \cdot \vec{S} .$$

Quelles quantités sont conservées?

$$[L_z, H] \sim [L_z, \vec{L} \cdot \vec{S}] = [L_z, (L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z)] = i\hbar(L_y S_x - L_x S_y) \neq 0 .$$

$$[S_z, H] \sim [S_z, \vec{L} \cdot \vec{S}] = i\hbar(L_x S_y - L_y S_x) \neq 0 .$$

Mais: la somme $J_z = L_z + S_z$ est conservé $\implies \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ est conservé!

Comme $[H, \vec{L}] \neq 0$ (aussi, $[H, \vec{S}] \neq 0$), on ne peut pas trouver d'états propres communs. Mais $[H, \vec{J}] = 0 \implies$ on peut trouver des états propres communs (i.e. les états permis de $\psi(\vec{r}, t)$).

Addition de Moments Cinétiques

Problème à résoudre: étant donné des bases pour deux moments cinétiques \vec{J}_1 et \vec{J}_2 , qui ne commutent pas avec H , quelle est la base pour $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$, où $[\vec{J}, H] = 0$?

Cas spécifique: deux particules de spin $\frac{1}{2}$. \exists quatre états:

$$|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle \equiv |\epsilon_1 \epsilon_2\rangle ,$$

où $\epsilon_i = \pm 1$.

On cherche les états propres de S_z et \vec{S}^2 , où $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$. C'est-à-dire: on cherche les états $|S, M\rangle$ tels que

$$\begin{aligned}\vec{S}^2 |S, M\rangle &= S(S+1)\hbar^2 |S, M\rangle , \\ S_z |S, M\rangle &= M\hbar |S, M\rangle .\end{aligned}$$

Remarque: $[S_{1z}, S_z] = [S_{2z}, S_z] = 0 \implies S_{1z}, S_{2z}$ et S_z ont des états propres communs. Mais $[S_{1z}, \vec{S}^2] \neq 0$ et $[S_{2z}, \vec{S}^2] \neq 0 \implies$ les états propres de S_{1z} et S_{2z} ne sont pas (tous) des états propres de \vec{S}^2 .

Or,

$$S_z |\epsilon_1 \epsilon_2\rangle = \frac{1}{2} \hbar (\epsilon_1 + \epsilon_2) |\epsilon_1 \epsilon_2\rangle .$$

Donc, les $|\epsilon_1 \epsilon_2\rangle$ sont des états propres de S_z , comme attendu ($[S_{1z}, S_z] = [S_{2z}, S_z] = 0$). Alors, on a la valeur propre

$$M = \frac{1}{2} (\epsilon_1 + \epsilon_2) = \begin{cases} 1 & |++\rangle, \\ 0 & |+-\rangle, | -+\rangle, \\ -1 & |--\rangle. \end{cases}$$

\implies dans cette base,

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} .$$

De ceci, on peut s'attendre à ce que les états $|S, M\rangle$ comprennent un triplet ($S = 1$): $M = (1, 0, -1)$ et un singulet ($S = 0$): $M = 0$.

Quelle est la forme de \vec{S}^2 dans cette base? Il faut calculer l'action de \vec{S}^2 sur les $|\epsilon_1 \epsilon_2\rangle$. On note

$$\vec{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2) \cdot (\vec{S}_1 + \vec{S}_2) = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 .$$

Rappel:

$$S_+ = S_x + iS_y , \quad S_- = S_x - iS_y$$

$$\implies S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) , \quad S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-) .$$

Donc:

$$\begin{aligned} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 &= S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z} \\ &= \frac{1}{4}(S_{1+} + S_{1-})(S_{2+} + S_{2-}) \\ &\quad - \frac{1}{4}(S_{1+} - S_{1-})(S_{2+} - S_{2-}) + S_{1z}S_{2z} \\ &= \frac{1}{2}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}) + S_{1z}S_{2z} . \\ \implies \vec{S}^2 &= \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + (S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}) . \end{aligned}$$

$$\vec{S}^2 |++\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |++\rangle + \frac{3}{4}\hbar^2 |++\rangle + \frac{1}{2}\hbar^2 |++\rangle + 0 = 2\hbar^2 |++\rangle$$

$$\begin{aligned}\vec{S}^2 |+-\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2 |+-\rangle + \frac{3}{4}\hbar^2 |+-\rangle - \frac{1}{2}\hbar^2 |+-\rangle + \hbar^2 |-\rangle \\ &= \hbar^2 [|+-\rangle + |-\rangle]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{S}^2 |-\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2 |-\rangle + \frac{3}{4}\hbar^2 |-\rangle - \frac{1}{2}\hbar^2 |-\rangle + \hbar^2 |+-\rangle \\ &= \hbar^2 [|+-\rangle + |-\rangle]\end{aligned}$$

$$\vec{S}^2 |--\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |--\rangle + \frac{3}{4}\hbar^2 |--\rangle + \frac{1}{2}\hbar^2 |--\rangle + 0 = 2\hbar^2 |--\rangle$$

Dans cette base, \vec{S}^2 n'est pas diagonal:

$$\vec{S}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & & \\ & 1 & 1 \\ & 1 & 1 \\ & & & 2 \end{pmatrix} .$$

Il faut diagonaliser le sous-espace central: $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$.

Valeurs propres: $\lambda = 0, 2$. États propres:

$$\lambda = 0 : \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \lambda = 2 : \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Valeurs et états propres de \vec{S}^2 :

$$0 : \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle], \quad 2\hbar^2 : \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle].$$

\vec{S}^2 a deux valeurs propres: 0 (pas dégénéré) et $2\hbar^2$ (dégénérés 3 fois).

$$S(S+1) = 0 \implies S = 0 \text{ (singulet)},$$

$$S(S+1) = 2 \implies S = 1 \text{ (triplet)}.$$

États propres de \vec{S}^2 :

$$|1\ 1\rangle = |++\rangle$$

$$|1\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle] \qquad |0\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle]$$

$$|1\ -1\rangle = |--\rangle$$

Sommaire: on additionne deux spins $\frac{1}{2}$. On trouve le spin total $S = 0$ ou $S = 1$. On a commencé avec 4 états ($|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$), on trouve 4 états à la fin ($|1\ 1\rangle, |1\ 0\rangle, |1\ -1\rangle, |0\ 0\rangle$).

Remarque: $|++\rangle$ et $|--\rangle$ sont symétriques par rapport à $\epsilon_1 \leftrightarrow \epsilon_2$ $\implies |1\ 1\rangle$ et $|1\ -1\rangle$ sont symétriques. Cette symétrie implique que $|1\ 0\rangle$ est aussi symétrique ($\frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle]$); $|0\ 0\rangle$ est antisymétrique ($\frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle]$). Donc: triplet = symétrique, singulet = antisymétrique. On aurait pu utiliser cette symétrie afin de trouver les états sans diagonaliser.

Solution générale: étant donné $\vec{J}_1^2, J_{1z}, \vec{J}_2^2, J_{2z}$ et une base:

$$\begin{aligned} \vec{J}_1^2 |j_1, m_1\rangle &= j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |j_1, m_1\rangle, & J_{1z} |j_1, m_1\rangle &= m_1\hbar |j_1, m_1\rangle, \\ \vec{J}_2^2 |j_2, m_2\rangle &= j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |j_2, m_2\rangle, & J_{2z} |j_2, m_2\rangle &= m_2\hbar |j_2, m_2\rangle, \end{aligned}$$

on cherche les valeurs propres et les états propres de \vec{J}^2 et J_z , où $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$. (En général, il y a d'autres nombres quantiques (e.g. l'énergie) $\implies \vec{J}^2$ et J_z ne forment pas un E.C.O.C. Pour l'instant, on travaille seulement dans le sous-espace du moment angulaire.)

On va écrire les états propres de \vec{J}^2 et J_z en fonction de $|j_1, m_1\rangle$ et $|j_2, m_2\rangle$: changement de base.

L'espace de \vec{J}^2 et J_z : $\epsilon = \epsilon_1 \otimes \epsilon_2$, où ϵ_1 et ϵ_2 sont engendrés par $|j_1, m_1\rangle$ et $|j_2, m_2\rangle$. On écrit les états de ϵ : combinaison linéaire de $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$.

Les dimensions de ϵ_1 et ϵ_2 sont $2j_1 + 1$ et $2j_2 + 1 \implies$ la dimension de ϵ est $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. ϵ est composé de sous-espaces de dimension $2J + 1$.

On examine de nouveau le cas de deux spins $\frac{1}{2}$.

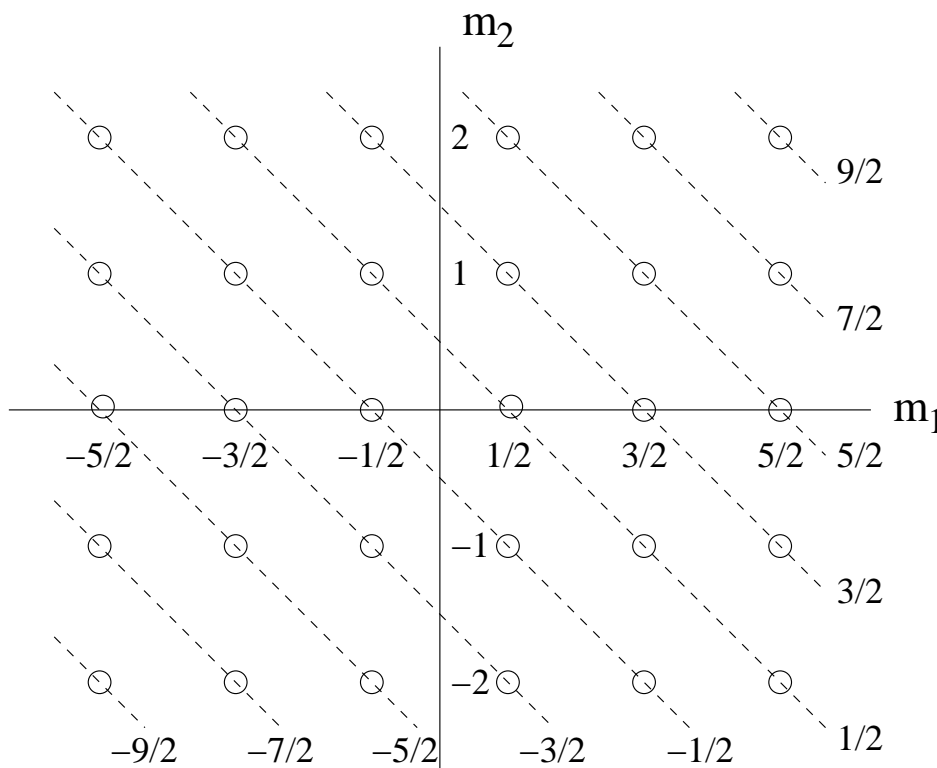
On a $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \implies S_z = S_{1z} + S_{2z} \implies$ les états $|j_1, m_1\rangle$ et $|j_2, m_2\rangle$ sont des états propres de S_z . On trouve 3 valeurs propres pour S_z : 1, 0, -1. Donc on sait que $S \leq 1$ (car $M \neq 2$). On trouve la valeur propre $M = 1$ une fois $\implies \exists S = 1$ une fois. Comme on a $S = 1 \implies \exists$ 3 états $|1\ 1\rangle, |1\ 0\rangle, |1\ -1\rangle$. Donc il reste un état: ça doit être $|0\ 0\rangle$.

Généraliser: $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \implies J_z = J_{1z} + J_{2z}$. Les états $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$ sont des états propres de J_z :

$$J_z |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle = (m_1 + m_2)\hbar |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$$

$\implies M = (m_1 + m_2)$. Donc M prend les valeurs $-(j_1 + j_2), \dots, j_1 + j_2$.

On suit l'exemple: il faut trouver le degré de dégénérescence de M .
 On peut le faire de façon géométrique. E.g. on considère spins $\frac{5}{2}$ (6 valeurs de m_1) et 2 (5 valeurs de m_2). On calcul $M = m_1 + m_2$:



$$M = \frac{9}{2}, -\frac{9}{2} \quad (1 \text{ fois})$$

$$M = \frac{7}{2}, -\frac{7}{2} \quad (2 \text{ fois})$$

$$M = \frac{5}{2}, -\frac{5}{2} \quad (3 \text{ fois})$$

$$M = \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \quad (4 \text{ fois})$$

$$M = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \quad (5 \text{ fois})$$

Généraliser: le degré de dégénérescence de M , $g_{j_1, j_2}(M)$ ($j_1 \geq j_2$):

$$\begin{aligned}g_{j_1, j_2}(j_1 + j_2) &= 1 \\g_{j_1, j_2}(j_1 + j_2 - 1) &= 2 \\&\dots \\g_{j_1, j_2}(j_1 - j_2) &= 2j_2 + 1 \text{ (valeur maximale)} \\&\dots\end{aligned}$$

Donc: $-(j_1 + j_2) \leq M \leq j_1 + j_2$ et $g_{j_1, j_2}(M) = g_{j_1, j_2}(-M)$.

- La valeur maximale de M est $j_1 + j_2 \implies \nexists J > j_1 + j_2$.
- Il y a une valeur $M = j_1 + j_2 \implies$ il y a une valeur $J = j_1 + j_2$.
- Il y a $2(j_1 + j_2) + 1$ valeurs de M associées avec $J = j_1 + j_2$:
 $M = -(j_1 + j_2), \dots, (j_1 + j_2)$.
- Ceci comprend $M = j_1 + j_2 - 1$. Il reste une valeur de
 $M = j_1 + j_2 - 1$. Ceci doit être associé avec $J = j_1 + j_2 - 1$.
- Etc. Répétition.

Donc: les valeurs propres de \vec{J}^2 sont telles que

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|.$$

À chaque valeur de J on associe un sous-espace.

Nous avons trouvé les valeurs possibles de J et M , comment trouve-t-on les états $|J, M\rangle$?

Retour au système de deux spins $\frac{1}{2}$. Nous avons trouvé une seule valeur de $M = 1$. Ça doit correspondre à l'état $|1\ 1\rangle$. Ça correspond aussi à l'état $|++\rangle$. Alors

$$|1\ 1\rangle = |++\rangle.$$

Maintenant on agit avec l'opérateur d'échelle qui diminue l'état:

$$S_- = S_{1-} + S_{2-}:$$

$$\begin{aligned} S_- |1\ 1\rangle &= \sqrt{2}\hbar |1\ 0\rangle, \\ (S_{1-} + S_{2-}) |++\rangle &= \hbar [|+-\rangle + |-+\rangle], \\ \implies |1\ 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle]. \end{aligned}$$

On peut appliquer $S_- = S_{1-} + S_{2-}$ encore une fois:

$$|1 -1\rangle = |--\rangle .$$

On obtient l'état $|0 0\rangle$ par orthogonalité avec $|1 0\rangle$:

$$|0 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle] .$$

Généraliser au cas où on a deux moments cinétiques j_1 et j_2 . Nous avons une seule valeur $M = j_1 + j_2$, qui correspond à $J = j_1 + j_2$. Comme c'est non-dégénéré,

$$|J, M\rangle = |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle .$$

On applique l'opérateur d'échelle, $J_- = J_{1-} + J_{2-}$:

$$J_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = \sqrt{2(j_1 + j_2)} \hbar |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle ,$$

$$J_{1-} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle = \sqrt{2j_1} \hbar |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle ,$$

$$J_{2-} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle = \sqrt{2j_2} \hbar |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle .$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle . \end{aligned}$$

On trouve les autres états avec $J = j_1 + j_2$ en agissant de nouveau avec J_- .

Il y a un autre état avec $M = j_1 + j_2 - 1$. Il doit appartenir au sous-espace avec $J = j_1 + j_2 - 1$ et donc est composé des états $|j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle$ et $|j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle$. On le trouve par orthogonalité avec $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$:

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = -\sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle .$$

Convention: le coefficient de l'état avec $|j_1, j_1\rangle$ est positif.

On trouve les autres états avec $J = j_1 + j_2 - 1$ en agissant avec J_- .

Etc. On continue pour $J = j_1 + j_2 - 2$, etc. jusqu'à ce qu'on trouve tous les états $|J, M\rangle$.

Sommaire: les opérateurs \vec{J}_1^2 , J_{1z} , \vec{J}_2^2 et J_{2z} , avec états propres $|j_1, m_1\rangle$ et $|j_2, m_2\rangle$, ne commutent pas tous avec H . C'est les opérateurs \vec{J}^2 et J_z qui commutent avec H , où $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$.

Les états propres de \vec{J}^2 et J_z sont $|J, M\rangle$:

$$\begin{aligned}\vec{J}^2 |J, M\rangle &= J(J+1)\hbar^2 |J, M\rangle, \\ J_z |J, M\rangle &= M\hbar |J, M\rangle.\end{aligned}$$

Les valeurs permises de J sont $J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$.
Pour chaque valeur de J , on a $-J \leq M \leq J$.

Si on écrit $\epsilon = \{|J, M\rangle\}$, $\epsilon_1 = \{|j_1, m_1\rangle\}$ et $\epsilon_2 = \{|j_2, m_2\rangle\}$ on a $\epsilon = \epsilon_1 \otimes \epsilon_2$. Le nombre d'états est conservé:

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1),$$

Donc, la dimension de ϵ est $(2j_1+1)(2j_2+1)$.

On exprime les états $|J, M\rangle$ en fonction des $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$. On les construit comme suit: il y a un état avec $M = j_1 + j_2$. Il correspond à l'état avec $J = j_1 + j_2$ (l'état le plus haut):

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle .$$

On agit les deux côtés avec $J_- = J_{1-} + J_{2-}$. Plusieurs fois: on trouve tous les états avec $J = j_1 + j_2$:

$$\begin{aligned} & |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle , \\ & |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle , \\ & \dots \\ & |j_1 + j_2, -|j_1 + j_2|\rangle . \end{aligned}$$

Maintenant on tourne notre attention au sous-espace avec $J = j_1 + j_2 - 1$. L'état le plus haut est $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle$. On le construit par orthogonalité avec $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$. On trouve les autres états de $J = j_1 + j_2 - 1$ en agissant avec $J_- = J_{1-} + J_{2-}$. Ceci donne tous les états avec $J = j_1 + j_2 - 1$.

On continue de cette façon.

Coefficients de Clebsch-Gordan

On écrit les $|J, M\rangle$ en fonction des $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$. Les coefficients sont les *coefficients de Clebsch-Gordan*:

$$|J, M\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M\rangle |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle .$$

Les coefficients de Clebsch-Gordan $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M\rangle$ sont réels. Ils ne sont non-nuls que si $M = m_1 + m_2$ et $|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$.

On choisit les signes tels que $\langle j_1, j_2; j_1, J - j_1 | J, J\rangle$ est positif. Donc le signe de $\langle j_1, j_2; m_1, J - m_1 | J, J\rangle$ est $(-1)^{j_1 - m_1}$.

Remarque: c'est juste une transformation de base. C'est-à-dire:

$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M\rangle$ est la *projection* de l'état $|J, M\rangle$ sur $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$: c'est le produit scalaire des états.

Comme c'est une transformation de base, on peut inverser:

$$|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle = \sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^J \langle J, M | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle |J, M\rangle .$$

Les coefficients de Clebsch-Gordan sont réels \implies

$$\langle J, M | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle = \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle .$$

Exemple: $J_1 = 1, J_2 = 1 (1 \otimes 1)$. Le moment angulaire total est $J = 0, 1, 2$. On commence par

$$|2 2\rangle = |1 1\rangle |1 1\rangle .$$

On applique $J_- = J_{1-} + J_{2-}$:

$$|2 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1 1\rangle |1 0\rangle + |1 0\rangle |1 1\rangle] .$$

L'état $|1\ 1\rangle$ doit être orthogonal:

$$|1\ 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\ 1\rangle |1\ 0\rangle - |1\ 0\rangle |1\ 1\rangle] .$$

(Le coefficient C.G. de $|1\ 1\rangle |1\ 0\rangle$ est positif.)

On continue avec $J_- = J_{1-} + J_{2-}$ et l'orthogonalité:

$$|2\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} [|1\ 1\rangle |1\ -1\rangle + 2 |1\ 0\rangle |1\ 0\rangle + |1\ -1\rangle |1\ 1\rangle] ,$$

$$|1\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\ 1\rangle |1\ -1\rangle - |1\ -1\rangle |1\ 1\rangle] ,$$

$$|0\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [|1\ 1\rangle |1\ -1\rangle - |1\ 0\rangle |1\ 0\rangle + |1\ -1\rangle |1\ 1\rangle] .$$

Remarque: la convention de phase donne des rôles asymétriques à j_1 et à j_2 . Si on inverse ces deux,

$$\langle j_2, j_1; m_2, m_1 | J, M \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - J} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle .$$

Relations de recurrence: rappel:

$$J_{1\pm} |j_1, m_1\rangle = \hbar \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \pm 1)} |j_1, m_1 \pm 1\rangle ,$$

$$J_{2\pm} |j_2, m_2\rangle = \hbar \sqrt{j_2(j_2 + 1) - m_2(m_2 \pm 1)} |j_2, m_2 \pm 1\rangle ,$$

$$J_{\pm} |J, M\rangle = \hbar \sqrt{J(J + 1) - M(M \pm 1)} |J, M \pm 1\rangle .$$

On commence avec

$$|J, M\rangle = \sum_{m'_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m'_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | J, M \rangle |j_1, m'_1\rangle |j_2, m'_2\rangle .$$

On applique $J_- = J_{1-} + J_{2-}$:

$$\begin{aligned} \sqrt{J(J + 1) - M(M - 1)} |J, M - 1\rangle = & \sum_{m'_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m'_2=-j_2}^{j_2} \\ & \left[\sqrt{j_1(j_1 + 1) - m'_1(m'_1 - 1)} \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | J, M \rangle |j_1, m'_1 - 1\rangle |j_2, m'_2\rangle \right. \\ & \left. + \sqrt{j_2(j_2 + 1) - m'_2(m'_2 - 1)} \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | J, M \rangle |j_1, m'_1\rangle |j_2, m'_2 - 1\rangle \right] \end{aligned}$$

On multiplie par $\langle j_1, m_1 | \langle j_2, m_2 |$. Dans le premier terme à droite: $m'_1 = m_1 + 1$, $m'_2 = m_2$, dans le deuxième terme: $m'_1 = m_1$, $m'_2 = m_2 + 1$. Alors,

$$\begin{aligned} \sqrt{J(J+1) - M(M-1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M-1 \rangle &= \\ \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)} \langle j_1, j_2; m_1+1, m_2 | J, M \rangle & \\ + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2+1 | J, M \rangle . & \end{aligned}$$

De façon similaire,

$$\begin{aligned} \sqrt{J(J+1) - M(M+1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M+1 \rangle &= \\ \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)} \langle j_1, j_2; m_1-1, m_2 | J, M \rangle & \\ + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2-1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2-1 | J, M \rangle . & \end{aligned}$$

On utilisera ces relations de recurrence pour le théorème Wigner-Eckart.

Relations d'orthogonalité: nous avons $\langle J, M | J', M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}$. On insère

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1| \langle j_2, m_2| = 1 .$$

Ceci donne une relation de fermeture:

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle J, M | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J', M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} .$$

Comme les coefficients de Clebsch-Gordan sont réels,

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J', M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} .$$

De plus (en dernier lieu)

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^J \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | J, M \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} .$$

Isospin

Addition de moments cinétiques: très théorique? Non. On l'utilise constamment. E.g. physique des particules: isospin. Remarque: proton et neutron ont presque la même masse: $m_p \simeq m_n \implies$ suggestion: il y a une symétrie qui les relie. Ils sont deux composantes d'un doublet:

$$N = \begin{pmatrix} p \\ n \end{pmatrix}$$

La symétrie s'appelle l'isospin. Sous isospin, $p = |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$, $n = |\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle$.

Plus tard, on a produit d'autres particules dans des interactions nucléaires:

$$\pi : I = 1 : \begin{pmatrix} \pi^+ \\ \pi^0 \\ \pi^- \end{pmatrix} ; \Lambda : I = 0 ; \Sigma : I = 1 : \begin{pmatrix} \Sigma^+ \\ \Sigma^0 \\ \Sigma^- \end{pmatrix} .$$

On peut utiliser la conservation d'isospin dans des interactions fortes et électromagnétiques. E.g. on n'a pas observé $p\bar{p} \rightarrow nn$

$$\bar{N} = \begin{pmatrix} \bar{n} \\ \bar{p} \end{pmatrix}$$

Donc $p\bar{p} \rightarrow nn$ viole I_3 total.

On observe $\rho^0 \rightarrow \pi^+\pi^-$ (interactions fortes). État initial: $\rho^0 = |1\ 0\rangle$.

État final: $\langle\pi^+\pi^-| = \langle 1\ 1| \otimes \langle 1\ -1|$ qui contient $\langle 1\ 0|$. Donc l'isospin est conservé.

Mais les interactions faibles violent l'isospin. E.g. on observe $\Lambda \rightarrow p\pi^-$.

État initial: $\Lambda = |0\ 0\rangle$. État final: $\langle p\pi^-| = \langle \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}| \otimes \langle 1\ -1|$ qui est une combinaison de $\langle \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}|$ et $\langle \frac{3}{2}\ -\frac{1}{2}|$ qui ne contient pas $\langle 0\ 0|$.

On peut comprendre ceci: on a $\langle p\pi^-| H_w |\Lambda\rangle$. L'isospin est conservé si l'opérateur H_w se transforme comme un état $|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\rangle$ ou $|\frac{3}{2}\ -\frac{1}{2}\rangle$.

Opérateurs Tensoriels

Opérateurs avec isospin (ou moment angulaire)? En fait, ce n'est pas nouveau. Rappel: harmoniques sphériques: les états $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ sont des états propres de L_z , où les opérateurs L_z et L_{\pm} sont:

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad , \quad L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad :$$

$$L_z Y_{\ell m}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad ,$$

$$L_{\pm} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} Y_{\ell, m \pm 1}(\theta, \phi) \quad .$$

Cette forme est appropriée pour le cas où les $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ sont des états.

Mais on peut écrire ces relations de cette façon:

$$[L_z, Y_{\ell m}(\theta, \phi)] = m\hbar Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

$$[L_{\pm}, Y_{\ell m}(\theta, \phi)] = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} Y_{\ell, m \pm 1}(\theta, \phi) \quad .$$

Cette forme est appropriée pour le cas où on traite les $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ comme étant des opérateurs.

On considère $\vec{r} = (x, y, z)$. On peut définir les *composantes sphériques* à l'aide des coordonnées sphériques: $x = r \sin \theta \cos \phi$, $y = r \sin \theta \sin \phi$, $z = r \cos \theta$:

$$\begin{aligned} r_1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}r \sin \theta e^{i\phi} \\ r_0 &= z &\implies &= r \cos \theta \\ r_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy) &= \frac{1}{\sqrt{2}}r \sin \theta e^{-i\phi} \end{aligned}$$

Mais, rappel:

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} , \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta , \quad Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} .$$

Donc

$$r_i = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1i}(\theta, \phi) .$$

Alors, \vec{r} a $l = 1$. En fait, tous les vecteurs ont $l = 1$.

On considère les commutateurs $[L_z, x]$, $[L_z, y]$ et $[L_z, z]$. (Rappel:

$L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$.) On trouve

$$[L_z, x] = i\hbar y \quad , \quad [L_z, y] = -i\hbar x \quad , \quad [L_z, z] = 0 \quad .$$

\implies

$$[L_i, x_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} x_k \quad .$$

On s'inspire de ceci pour définir un *opérateur vectoriel* ($l = 1$):

$$[J_i, V_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} V_k \quad .$$

Quelques observations:

- \vec{J} est un vecteur.
- $\vec{S} = 0 \implies \vec{J} = \vec{L}$. Donc \vec{r} et \vec{p} sont des opérateurs vectoriels.
- $\vec{S} \neq 0 \implies \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Donc \vec{L} et \vec{S} sont des opérateurs vectoriels.
- Mais \vec{L}^2 , $\vec{L} \cdot \vec{S}$, etc. ne sont pas des opérateurs vectoriels. Ils sont des scalaires ($l = 0$).

On a des opérateurs avec $l = 0$ et 1 . Est-ce qu'on ne peut pas avoir des opérateurs avec d'autres valeurs de l (ou j)? Oui.

Relations de commutation: $[L_i, V_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} V_k$. On a $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ et on peut définir les composantes sphériques de \vec{V} [$V_i^{(1)}$]. Alors

$$[L_z, V_0^{(1)}] = 0 ,$$

$$[L_z, V_1^{(1)}] = -\frac{1}{\sqrt{2}}[L_z, V_x + iV_y] = (+1)\hbar V_1^{(1)} ,$$

$$[L_z, V_{-1}^{(1)}] = \frac{1}{\sqrt{2}}[L_z, V_x - iV_y] = (-1)\hbar V_{-1}^{(1)} .$$

Remarque: c'est similaire à $L_z Y_{1m}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{1m}(\theta, \phi)$.

Également,

$$[L_+, V_1^{(1)}] = 0 , \quad [L_+, V_0^{(1)}] = \sqrt{2}\hbar V_1^{(1)} , \quad [L_+, V_{-1}^{(1)}] = \sqrt{2}\hbar V_0^{(1)} .$$

Donc:

$$\left[L_+, V_m^{(1)} \right] = \hbar \sqrt{1(1+1) - m(m+1)} V_{m+1}^{(1)} .$$

C'est similaire pour $\left[L_-, V_m^{(1)} \right]$.

Rappel:

$$L_{\pm} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} Y_{\ell m \pm 1}(\theta, \phi) .$$

Jusqu'ici, ce n'est qu'une curiosité. On continue. Nous savons que les opérateurs vectoriels ont $l = 1$. Qu'est-ce qui se passe si on combine deux opérateurs vectoriels? Nous connaissons le produit scalaire et vectoriel. Y'a-t-il d'autres possibilités?

On construit $T_{ij} = V_i W_j = [V \otimes W]_{ij}$ (pas des composantes sphériques):

$$T_{ij} = \begin{pmatrix} V_1 W_1 & V_1 W_2 & V_1 W_3 \\ V_2 W_1 & V_2 W_2 & V_2 W_3 \\ V_3 W_1 & V_3 W_2 & V_3 W_3 \end{pmatrix}$$

Comme \vec{V} et \vec{W} ont tous les deux $l = 1$, on s'attend à trouver $1 \otimes 1 = 0 \oplus 1 \oplus 2$. Le '0' à droite est le scalaire:

$$\vec{V} \cdot \vec{W} = V_1 W_1 + V_2 W_2 + V_3 W_3 .$$

Le '1' à droite est le vecteur:

$$\left(\vec{V} \times \vec{W} \right)_k = \epsilon_{ijk} V_i W_j = V_i W_j - V_j W_i \quad (i, j, k \text{ cycliques}) .$$

On peut écrire les composantes de T_{ij} comme suit:

$$V_i W_j = \frac{1}{2} (V_i W_j + V_j W_i) + \frac{1}{2} (V_i W_j - V_j W_i) .$$

On enlève la trace (scalaire): $T_{ii} = 0$. On enlève la partie antisymétrique (vecteur): $T_{ij} = T_{ji}$. Il reste une matrice symétrique et sans trace (5 composantes).

Ceci est un tenseur de rang 2: $l = 2$.

De plus, en coordonnées sphériques:

$$P_2^{(2)} = V_1^{(1)} W_1^{(1)} , \quad P_{-2}^{(2)} = V_{-1}^{(1)} W_{-1}^{(1)} ,$$

$$P_1^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[V_1^{(1)} W_0^{(1)} + V_0^{(1)} W_1^{(1)} \right] , \quad P_{-1}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[V_0^{(1)} W_{-1}^{(1)} + V_{-1}^{(1)} W_0^{(1)} \right] ,$$

$$P_0^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[V_1^{(1)} W_{-1}^{(1)} + 2 V_0^{(1)} W_0^{(1)} + V_{-1}^{(1)} W_1^{(1)} \right] .$$

On voit que le tenseur de rang 2 est composé de façon attendue selon l'addition du moment angulaire.

On peut continuer de cette façon afin de former des tenseurs de l supérieur. Un opérateur tensoriel de rang K s'écrit

$$T_Q^{(K)} , \quad Q = -K, -K + 1, \dots, +K \quad (2K + 1 \text{ composantes}).$$

Le moment angulaire total est K . On a

$$\begin{aligned} [J_z, T_Q^{(K)}] &= Q\hbar T_Q^{(K)} , \\ [J_{\pm}, T_Q^{(K)}] &= \sqrt{K(K+1) - Q(Q \pm 1)}\hbar T_{Q \pm 1}^{(K)} . \end{aligned}$$

Théorème Wigner-Eckart

On considère l'action de $T_Q^{(K)}$ sur un état: $T_Q^{(K)} |j', m'\rangle$. Ceci est un état propre de J_z :

$$\begin{aligned} J_z \left[T_Q^{(K)} |j', m'\rangle \right] &= \left(T_Q^{(K)} J_z + Q\hbar T_Q^{(K)} \right) |j', m'\rangle \\ &= (Q + m')\hbar \left[T_Q^{(K)} |j', m'\rangle \right] . \end{aligned}$$

On considère \vec{J}^2 :

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 &= J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \\ &= J_z^2 + \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) \quad [J_+, J_-] = 2\hbar J_z \\ &= J_z^2 + \hbar J_z + J_- J_+ . \end{aligned}$$

Alors

$$\begin{aligned} J_+ \left[T_Q^{(K)} |j', m'\rangle \right] &= \left(T_Q^{(K)} J_+ + \sqrt{K(K+1) - Q(Q+1)} \hbar T_{Q+1}^{(K)} \right) |j', m'\rangle \\ &= \sqrt{j'(j'+1) - m'(m'+1)} \hbar T_Q^{(K)} |j', m'+1\rangle \\ &\quad + \sqrt{K(K+1) - Q(Q+1)} \hbar T_{Q+1}^{(K)} |j', m'\rangle . \end{aligned}$$

Ensuite

$$J_- \left[J_+ \left[T_Q^{(K)} |j', m'\rangle \right] \right]$$

est une combinaison linéaire de $T_{Q+1}^{(K)} |j', m' - 1\rangle$, $T_Q^{(K)} |j', m'\rangle$ et $T_{Q-1}^{(K)} |j', m' + 1\rangle$.

Point: $T_Q^{(K)} |j', m'\rangle$ n'est pas un état propre de \vec{J}^2 .

Quel est l'état propre de \vec{J}^2 ? En s'inspirant de l'addition du moment angulaire, on devine:

$$|J'', M''\rangle = \sum_{m', Q} \langle K j'; Q m' | J'' M'' \rangle T_Q^{(K)} |j', m'\rangle .$$

Remarque: cet état n'est pas normé.

Cet état agit-t-il correctement sous l'action des composantes de \vec{J} ?

On sait que $|J'', M''\rangle$ est un état propre de J_z . Maintenant, sous J_+ :

$$J_+ |J'', M''\rangle = \sum_{m', Q} \langle K j'; Q m' | J'' M'' \rangle \left\{ \sqrt{j'(j'+1) - m'(m'+1)} \hbar T_Q^{(K)} |j', m'+1\rangle + \sqrt{K(K+1) - Q(Q+1)} \hbar T_{Q+1}^{(K)} |j', m'\rangle \right\} .$$

Dans le premier terme, on change $m' \rightarrow m' - 1$. Dans le deuxième, on met $Q \rightarrow Q - 1$. Donc

$$J_+ |J'', M''\rangle = \sum_{m', Q} T_Q^{(K)} |j', m'\rangle \hbar \left\{ \sqrt{j'(j'+1) - m'(m'-1)} \langle K j'; Q m' - 1 | J'' M'' \rangle + \sqrt{K(K+1) - Q(Q-1)} \langle K j'; Q - 1 m' | J'' M'' \rangle \right\} .$$

Mais: avec la relation de récurrence pour les coefficients Clebsch-Gordan, le terme en parenthèses devient

$$\sqrt{J''(J'' + 1) - M''(M'' + 1)} \langle K, j'; Q, m | J'', M'' + 1 \rangle$$

C'est-à-dire, on a

$$J_+ |J'', M''\rangle = \sqrt{J''(J'' + 1) - M''(M'' + 1)} \hbar |J'', M'' + 1\rangle ,$$

ce qui est la bonne transformation.

Également,

$$J_- |J'', M''\rangle = \sqrt{J''(J'' + 1) - M''(M'' - 1)} \hbar |J'', M'' - 1\rangle .$$

Donc l'état $|J'', M''\rangle$ se transforme correctement sous J_z , J_+ et $J_- \implies$ c'est un état propre de \vec{J}^2 (pas normé!).

Point: dans $T_Q^{(K)} |j', m'\rangle$, il faut additionner les moments cinétiques de $T_Q^{(K)}$ et $|j', m'\rangle$.

On a trouvé que $|J'', M''\rangle$ est un état propre de J_z et \vec{J}^2 . On peut inverser:

$$T_Q^{(K)} |j', m'\rangle = \sum_{J''=|K-j'|}^{K+j'} \sum_{M''=-J''}^{J''} \langle K j'; Q m' | J'' M'' \rangle |J'', M''\rangle .$$

Alors

$$\langle j, m | T_Q^{(K)} |j', m'\rangle = \sum_{J''=|K-j'|}^{K+j'} \sum_{M''=-J''}^{J''} \langle K j'; Q m' | J'' M'' \rangle \langle j, m | J'', M'' \rangle .$$

Et

$$\langle j, m | T_{Q+1}^{(K)} |j', m'\rangle = \sum_{J''=|K-j'|}^{K+j'} \sum_{M''=-J''}^{J''} \langle K j'; Q+1 m' | J'' M'' \rangle \langle j, m | J'', M'' \rangle .$$

Mais remarque: quand on change $Q \rightarrow Q + 1$, les sommes ne changent pas; tout ce qui change est le coefficient de Clebsch-Gordan.

Donc: si on écrit $\langle j, m | J'', M'' \rangle = [X] \delta_{jJ''} \delta_{mM''}$, le $[X]$ est indépendant de Q (et m et m'). (Remarque: si on change $K \rightarrow K + 1$, les sommes changent $\implies [X]$ dépend du moment angulaire total.)

\implies on peut écrire

$$\langle j, m | T_Q^{(K)} | j', m' \rangle = [X] \langle K j'; Q m' | j m \rangle ,$$

où $[X]$ contient $2j + 1$ termes.

Convention: on écrit

$$[X] = \sum_{J''} \langle j, m | J'', M'' \rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle j || T^{(K)} || j' \rangle .$$

On appelle $\langle j || T^{(K)} || j' \rangle$ l'élément de matrice réduit. Il ne dépend pas de Q .

Ceci est le théorème de Wigner-Eckart.

Théorème de Wigner-Eckart: l'élément de matrice $\langle j, m | T_Q^{(K)} | j', m' \rangle$ est le produit de deux facteurs: (i) un coefficient de Clebsch-Gordan qui contient toute l'information du moment angulaire et (ii) un élément de matrice réduit qui contient toute l'information dynamique.

Problème: l'isospin I de la particule $N = (N^+, N^0) \equiv (p, n)$ est $1/2$, celui de la particule $\pi = (\pi^+, \pi^0, \pi^-)$ est 1 et celui de la particule $\Sigma = (\Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-)$ est 1 . Les composantes I_3 sont:

$$\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \text{ pour } (p, n)$$

$$(1, 0, -1) \text{ pour } (\pi^+, \pi^0, \pi^-) \quad , \quad (1, 0, -1) \text{ pour } (\Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-) \quad .$$

L'hamiltonien faible H_W , qui est responsable de la désintégration des Σ , est un opérateur tensoriel d'isospin $1/2$ et $I_3 = -1/2$.

Démontrer la "relation du triangle"

$$-\sqrt{2} \langle \pi^0 p | H_W | \Sigma^+ \rangle = \langle \pi^+ n | H_W | \Sigma^+ \rangle - \langle \pi^- n | H_W | \Sigma^- \rangle \quad .$$

D'abord, il faut exprimer les états finaux en fonction d'isospin total. On a $|\pi^0 p\rangle = |1\ 0\rangle \left| \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle$, $|\pi^+ n\rangle = |1\ 1\rangle \left| \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} \right\rangle$ et $|\pi^- n\rangle = |1\ -1\rangle \left| \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} \right\rangle$.
 Donc il faut trouver les coefficients Clebsch-Gordan pour $1 \otimes \frac{1}{2}$ (ou utiliser des tables).

On a

$$\left| \begin{matrix} 3 & 3 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right\rangle = |1\ 1\rangle \left| \begin{matrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right\rangle .$$

$$\begin{aligned} \implies J_- \left| \begin{matrix} 3 & 3 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right\rangle &= \sqrt{3} \left| \begin{matrix} 3 & 1 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right\rangle \\ &= (J_{1-} + J_{2-}) |1\ 1\rangle \left| \begin{matrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right\rangle \\ &= \sqrt{2} |1\ 0\rangle \left| \begin{matrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right\rangle + |1\ 1\rangle \left| \begin{matrix} 1 & 1 \\ 2 & -1 \end{matrix} \right\rangle . \end{aligned}$$

Alors

$$\begin{aligned} \left| \begin{array}{cc} 3 & 1 \\ 2 & 2 \end{array} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1\ 0\rangle \left| \begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{array} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |1\ 1\rangle \left| \begin{array}{cc} 1 & -1 \\ 2 & -2 \end{array} \right\rangle \\ \left| \begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{array} \right\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{3}} |1\ 0\rangle \left| \begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{array} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1\ 1\rangle \left| \begin{array}{cc} 1 & -1 \\ 2 & -2 \end{array} \right\rangle . \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} |\pi^0 p\rangle &= |1\ 0\rangle \left| \begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{array} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left| \begin{array}{cc} 3 & 1 \\ 2 & 2 \end{array} \right\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} \left| \begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{array} \right\rangle \\ |\pi^+ n\rangle &= |1\ 1\rangle \left| \begin{array}{cc} 1 & -1 \\ 2 & -2 \end{array} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \left| \begin{array}{cc} 3 & 1 \\ 2 & 2 \end{array} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left| \begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{array} \right\rangle . \end{aligned}$$

Et

$$|\pi^- n\rangle = |1\ -1\rangle \left| \begin{array}{cc} 1 & -1 \\ 2 & -2 \end{array} \right\rangle = \left| \begin{array}{cc} 3 & -3 \\ 2 & -2 \end{array} \right\rangle .$$

On écrit $H_w = T_{-1/2}^{(1/2)}$. Donc

$$\begin{aligned} \langle \pi^0 p | T_{-1/2}^{(1/2)} | \Sigma^+ \rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left\langle \frac{3}{2} \frac{1}{2} \middle| T_{-1/2}^{(1/2)} \middle| 1 \ 1 \right\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} \left\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} \middle| T_{-1/2}^{(1/2)} \middle| 1 \ 1 \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{2} \left\langle \frac{3}{2} \parallel T^{(1/2)} \parallel 1 \right\rangle \left\langle \frac{1}{2} \ 1; -\frac{1}{2} \ 1 \middle| \frac{3}{2} \ \frac{1}{2} \right\rangle \\ &\quad - \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle \frac{1}{2} \parallel T^{(1/2)} \parallel 1 \right\rangle \left\langle \frac{1}{2} \ 1; -\frac{1}{2} \ 1 \middle| \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \right\rangle . \end{aligned}$$

De la page précédente, on a

$$\left\langle 1 \ \frac{1}{2}; 1 - \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2} \ \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} , \quad \left\langle 1 \ \frac{1}{2}; 1 - \frac{1}{2} \middle| \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} .$$

Mais $\langle j_2, j_1; m_2, m_1 | J, M \rangle = (-1)^{j_1+j_2-J} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle$. Donc

$$\left\langle \frac{1}{2} \ 1; -\frac{1}{2} \ 1 \middle| \frac{3}{2} \ \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} , \quad \left\langle \frac{1}{2} \ 1; -\frac{1}{2} \ 1 \middle| \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \right\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} .$$

On définit

$$A_{3/2} \equiv \frac{1}{2} \left\langle \frac{3}{2} \parallel T^{(1/2)} \parallel 1 \right\rangle, \quad A_{1/2} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle \frac{1}{2} \parallel T^{(1/2)} \parallel 1 \right\rangle.$$

Donc

$$\langle \pi^0 p | T_{-1/2}^{(1/2)} | \Sigma^+ \rangle = \frac{\sqrt{2}}{3} A_{3/2} + \frac{\sqrt{2}}{3} A_{1/2}.$$

Maintenant

$$\begin{aligned} \langle \pi^+ n | T_{-1/2}^{(1/2)} | \Sigma^+ \rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} \left\langle \frac{3}{2} \frac{1}{2} \middle| T_{-1/2}^{(1/2)} \middle| 1 \ 1 \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} \middle| T_{-1/2}^{(1/2)} \middle| 1 \ 1 \right\rangle \\ &= \frac{1}{3} A_{3/2} - \frac{2}{3} A_{1/2}. \end{aligned}$$

Finalement,

$$\langle \pi^- n | T_{-1/2}^{(1/2)} | \Sigma^- \rangle = \left\langle \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \middle| T_{-1/2}^{(1/2)} \middle| 1 \ -1 \right\rangle = A_{3/2}.$$

Mettant tout ensemble, on trouve

$$-\sqrt{2} \langle \pi^0 p | H_W | \Sigma^+ \rangle = \langle \pi^+ n | H_W | \Sigma^+ \rangle - \langle \pi^- n | H_W | \Sigma^- \rangle ,$$

ce qui vérifie la relation du triangle.

Particules Identiques

Nous savons qu'une fonction d'onde décrivant un système contenant des particules identiques doit être symétrique (bosons) ou antisymétrique (fermions) sous des permutations de ces particules.

Voilà comment on construit ces états. On définit les opérateurs de permutation P_α . E.g. pour 3 particules, \exists 6 permutations $\implies \exists$ 6 opérateurs P_{ijk} :

$$P_{ijk} : \begin{cases} \text{met la particule \#1 dans la case } i, \\ \text{met la particule \#2 dans la case } j, \\ \text{met la particule \#3 dans la case } k. \end{cases}$$

$$P_{123} |\phi_a \phi_b \phi_c\rangle = |\phi_a \phi_b \phi_c\rangle \quad (\text{identité})$$

$$\text{E.g. } P_{213} |\phi_a \phi_b \phi_c\rangle = |\phi_b \phi_a \phi_c\rangle$$

$$P_{231} |\phi_a \phi_b \phi_c\rangle = |\phi_c \phi_a \phi_b\rangle$$

On peut exprimer chacun des 6 opérateurs comme un produit d'opérateurs d'échange: P_{123} (aucun); $P_{132}, P_{321}, P_{213}$ (1: ce sont les opérateurs d'échange); P_{231}, P_{312} (2: e.g. $P_{231} = P_{132} P_{321}$).

La *parité* des opérateurs de permutation est reliée au nombre d'échanges: parité = +1 si le nombre d'échanges est pair, = -1 si impair. Pour l'opérateur P_α , on écrit parité(P_α) $\equiv \epsilon_\alpha$.

État symétrique: sous une permutation des particules identiques,

$$P_\alpha |\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle \quad \forall P_\alpha .$$

État antisymétrique: sous une permutation,

$$P_\alpha |\psi_A\rangle = \epsilon_\alpha |\psi_A\rangle .$$

E.g.

$$|\psi_S\rangle = |\phi_a \phi_a \phi_a\rangle ,$$

$$|\psi_A\rangle = |\phi_a \phi_b \phi_c\rangle + |\phi_b \phi_c \phi_a\rangle + |\phi_c \phi_a \phi_b\rangle$$

$$- |\phi_b \phi_a \phi_c\rangle - |\phi_c \phi_b \phi_a\rangle - |\phi_a \phi_c \phi_b\rangle$$

Opérateurs de projection pour N particules:

$$S = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} P_\alpha , \quad A = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \epsilon_\alpha P_\alpha .$$

Remarque: $S + A \neq 1$ pour $N > 2 \implies$ on ne peut pas diviser l'espace en purement symétrique et antisymétrique.

E.g. on suppose que l'Hamiltonien a des états $|\phi_n\rangle$, $n = 1, 2, \dots$
Deux particules: on écrit un état général comme $|\phi_n \phi_m\rangle$.

Si on a deux bosons identiques:

$$|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_n \phi_m\rangle + |\phi_m \phi_n\rangle] .$$

Si les deux particules sont dans le même état, l'état est $|\phi_m \phi_m\rangle$.

Si on a deux fermions identiques:

$$|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_n \phi_m\rangle - |\phi_m \phi_n\rangle] .$$

Si les deux particules sont dans le même état, on obtient 0! C'est le principe d'exclusion de Pauli. On ne peut pas avoir deux fermions dans le même état.

Jusqu'ici, il n'y a qu'un degré de liberté impliqué: l'état d'énergie $|\phi_n\rangle$.
 Qu'est-ce que se passe si on a plus d'un degré de liberté?

On considère deux e^- non-interagissants dans un potentiel $V(x)$.
 L'Hamiltonien a des états propres $|\phi_a\rangle$, $a = 0, 1, \dots$. Les états décrivant un seul e^- sont $|\phi_a, m\rangle$, $a = 0, 1, \dots$, $m = \pm\frac{1}{2}$. On suppose (simplicité) qu'il n'existe que deux états $|\phi_a\rangle$ et $|\phi_b\rangle$. Quels sont les états décrivant le système de deux e^- ?

Avant d'antisymétriser, \exists 16 états:

$$\begin{array}{cccc}
 |\phi_a, +; \phi_a, +\rangle & |\phi_a, +; \phi_b, +\rangle & |\phi_b, +; \phi_a, +\rangle & |\phi_b, +; \phi_b, +\rangle \\
 |\phi_a, +; \phi_a, -\rangle & |\phi_a, +; \phi_b, -\rangle & |\phi_b, +; \phi_a, -\rangle & |\phi_b, +; \phi_b, -\rangle \\
 |\phi_a, -; \phi_a, +\rangle & |\phi_a, -; \phi_b, +\rangle & |\phi_b, -; \phi_a, +\rangle & |\phi_b, -; \phi_b, +\rangle \\
 |\phi_a, -; \phi_a, -\rangle & |\phi_a, -; \phi_b, -\rangle & |\phi_b, -; \phi_a, -\rangle & |\phi_b, -; \phi_b, -\rangle
 \end{array}$$

Afin d'obtenir les états physiques, on applique l'opérateur d'antisymétrisation $A \sim 1 - P_{21}$.

Quand on applique A , quatre états donnent zéro par ce qu'ils sont symétriques: $|\phi_a, +; \phi_a, +\rangle$, $|\phi_b, +; \phi_b, +\rangle$, $|\phi_a, -; \phi_a, -\rangle$, $|\phi_b, -; \phi_b, -\rangle$.

Il y a 6 états non-nuls. Ils sont:

$$A |\phi_a, +; \phi_a, -\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_a, +; \phi_a, -\rangle - |\phi_a, -; \phi_a, +\rangle] \quad (a)$$

$$A |\phi_a, +; \phi_b, +\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_a, +; \phi_b, +\rangle - |\phi_b, +; \phi_a, +\rangle] \quad (b)$$

$$A |\phi_a, +; \phi_b, -\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_a, +; \phi_b, -\rangle - |\phi_b, -; \phi_a, +\rangle] \quad (c)$$

$$A |\phi_a, -; \phi_b, +\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_a, -; \phi_b, +\rangle - |\phi_b, +; \phi_a, -\rangle] \quad (c)$$

$$A |\phi_a, -; \phi_b, -\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_a, -; \phi_b, -\rangle - |\phi_b, -; \phi_a, -\rangle] \quad (b)$$

$$A |\phi_b, +; \phi_b, -\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_b, +; \phi_b, -\rangle - |\phi_b, -; \phi_b, +\rangle] \quad (a)$$

On a 3 types d'états:

- (a): même état spatial, différent état de spin,
- (b): différent état spatial, même état de spin,
- (c): différent état spatial, différent état de spin,

Examinons de plus près ces états:

$$\begin{aligned}(a) : \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_a, +; \phi_a, -\rangle - |\phi_a, -; \phi_a, +\rangle] &= |\phi_a \phi_a\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle] \\ &= |\phi_a \phi_a\rangle |00\rangle .\end{aligned}$$

L'autre état de type (a) est $|\phi_b \phi_b\rangle |00\rangle$.

On a un état spatial symétrique \otimes un état de spin antisymétrique.

$$\begin{aligned}(b) : \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_a, +; \phi_b, +\rangle - |\phi_b, +; \phi_a, +\rangle] &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_a \phi_b\rangle - |\phi_b \phi_a\rangle] |++\rangle \\ &= |\phi_a \phi_b\rangle_A |1 1\rangle .\end{aligned}$$

L'autre état de type (b) est $|\phi_a \phi_b\rangle_A |1 -1\rangle$.

On a un état spatial antisymétrique \otimes un état de spin symétrique.

$$(c) : \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_a, +; \phi_b, -\rangle - |\phi_b, -; \phi_a, +\rangle] \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_a, -; \phi_b, +\rangle - |\phi_b, +; \phi_a, -\rangle]$$

Les états d'espace et de spin ne se séparent pas de façon évidente.

Mais: on additionne ces deux états (on norme le nouvel état):

$$\frac{1}{2} [|\phi_a, +; \phi_b, -\rangle - |\phi_b, -; \phi_a, +\rangle + |\phi_a, -; \phi_b, +\rangle - |\phi_b, +; \phi_a, -\rangle] \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\phi_a \phi_b\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle] - |\phi_b \phi_a\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle] \right] \\ = |\phi_a \phi_b\rangle_A |1 0\rangle .$$

On trouve l'autre état de type (c) en soustrayant les états ci-dessus.

On obtient $|\phi_a \phi_b\rangle_S |0 0\rangle$.

Donc, les états du système sont

$$\begin{array}{ll} |\phi_a \phi_a\rangle |00\rangle & |\phi_a \phi_b\rangle_A |1 1\rangle \\ |\phi_b \phi_b\rangle |00\rangle & |\phi_a \phi_b\rangle_A |1 0\rangle \\ |\phi_a \phi_b\rangle_S |0 0\rangle & |\phi_a \phi_b\rangle_A |1 -1\rangle \end{array}$$

Tous sont le produit d'un état symétrique et un état antisymétrique.

On aurait pu deviner ceci: comme on additionne deux spins, les états de spin doivent être des états propres de \vec{S}^2 et S_z , où $\vec{S} = S_1 + S_2$. Ces états sont $|1 m\rangle$ ($m = 1, 0, -1$), qui est symétrique, et $|0 0\rangle$, qui est antisymétrique. (Remarque: comme \vec{S}^2 et S_z sont symétriques, ils commutent avec A et $S \implies$ les états propres de \vec{S}^2 et S_z sont aussi des états propres de A et S .)

Ensuite, on multiplie par l'état spatial. Comme on cherche un état total antisymétrique, l'état spatial doit être antisymétrique ($|1 m\rangle$) ou symétrique ($|0 0\rangle$). Ça fonctionne par ce que $A + S = 1$ pour 2 particules.

Problème: on considère une particule fictive P^0 se désintégrant via l'interaction forte (qui conserve l'isospin), en 2 pions. Si P^0 est de spin 2 et $I = 2, I_3 = 0$, utiliser le théorème de Wigner-Eckart pour calculer le rapport des taux de désintégration du P^0 en $\pi^+\pi^-$ et $\pi^0\pi^0$ induits par H_{forte} . (Remarque: le fait que H_{forte} conserve l'isospin implique que H_{forte} est un opérateur tensoriel avec $I = 0, I_3 = 0$.)

Quel est le lien avec particules identiques? Dans le formalisme d'isospin,

$$\pi : I = 1 : \begin{pmatrix} \pi^+ \\ \pi^0 \\ \pi^- \end{pmatrix} .$$

C'est-à-dire: les particules π^+, π^0 et π^- sont identiques, sauf pour leur troisième composante d'isospin. (C'est comme des e^- de spin + et de spin -.) Donc les états finaux $\pi^+\pi^-$ et $\pi^0\pi^0$ consistent de particules identiques bosoniques et doivent être symétrisés.

L'état final $\pi\pi$ consiste de trois parties:

$$|\pi\pi\rangle = |\text{espace}\rangle |\text{spin}\rangle |\text{isospin}\rangle .$$

Les π ont spin 0 \implies le spin total de $|\pi\pi\rangle$ est 0, qui est symétrique.

Comme P^0 a spin 2, le moment angulaire orbital de l'état $|\pi\pi\rangle$ est 2, qui est symétrique $[(-1)^l]$. Donc, l'état d'isospin doit être symétrique:

$$\begin{aligned} |\pi^+\pi^-\rangle_s &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\ 1\rangle |1\ -1\rangle + |1\ -1\rangle |1\ 1\rangle] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{6}} |2\ 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |0\ 0\rangle \right] \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{6}} |2\ 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |0\ 0\rangle \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} |2\ 0\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |0\ 0\rangle , \\ |\pi^0\pi^0\rangle_s &= \sqrt{\frac{2}{3}} |2\ 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |0\ 0\rangle . \end{aligned}$$

Alors,

$$\langle \pi^+ \pi^- |_S H_0^{(0)} |2 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 2 + 1}} \langle 2 || H^{(0)} || 2 \rangle \frac{1}{\sqrt{3}},$$
$$\langle \pi^0 \pi^0 |_S H_0^{(0)} |2 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 2 + 1}} \langle 2 || H^{(0)} || 2 \rangle \sqrt{\frac{2}{3}}.$$

Donc

$$\frac{\Gamma(P^0 \rightarrow \pi^+ \pi^-)}{\Gamma(P^0 \rightarrow \pi^0 \pi^0)} = \frac{1}{2}.$$

Perturbations Indépendantes du Temps

On considère le cas où on décompose l'Hamiltonien complet en deux:

$$H = H_0 + W .$$

On connaît les états propres et les valeurs propres de H_0 . Si W est une petite correction, les états propres de H ne seront que légèrement différents de ceux de H_0 .

On écrit

$$H = H_0 + \lambda W .$$

Lorsqu'on varie λ de 0 à 1, les états propres de H_0 deviennent les états propres de H de façon lisse. Les énergies varient de façon similaire.

On a

$$H_0 |\varphi_p^i\rangle = E_p^0 |\varphi_p^i\rangle .$$

Ici, l'indice p correspond aux énergies différentes; l'indice i correspond aux dégénérescences possibles. Les $|\varphi_p^i\rangle$ forment une base:

$$\langle \varphi_p^i | \varphi_{p'}^{i'} \rangle = \delta_{pp'} \delta_{ii'} , \quad \sum_{p,i} |\varphi_p^i\rangle \langle \varphi_p^i| = 1 .$$

On peut écrire

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda W .$$

($\lambda = 0 : H(\lambda) = H_0$; $\lambda = 1 : H(\lambda) = H$.) On cherche des solutions de

$$H(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle .$$

On écrit

$$\begin{aligned} E(\lambda) &= \epsilon_0 + \lambda \epsilon_1 + \lambda^2 \epsilon_2 + \dots , \\ |\psi(\lambda)\rangle &= |0\rangle + \lambda |1\rangle + \lambda^2 |2\rangle + \dots \end{aligned}$$

Alors

$$H(\lambda) \left[\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |n\rangle \right] = \left[\sum_{n'=0}^{\infty} \lambda^{n'} \epsilon_{n'} \right] \left[\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |n\rangle \right] .$$

Les coefficients des différentes puissances de λ doivent être égaux les deux côtés.

On a

$$(H_0 + \lambda W) [|0\rangle + \lambda |1\rangle + \lambda^2 |2\rangle + \dots] \\ = (\epsilon_0 + \lambda \epsilon_1 + \lambda^2 \epsilon_2 + \dots) [|0\rangle + \lambda |1\rangle + \lambda^2 |2\rangle + \dots] .$$

$$\lambda^0 : \quad H_0 |0\rangle = \epsilon_0 |0\rangle .$$

$$\lambda^1 : \quad H_0 |1\rangle + W |0\rangle = \epsilon_0 |1\rangle + \epsilon_1 |0\rangle \\ \implies (H_0 - \epsilon_0) |1\rangle + (W - \epsilon_1) |0\rangle = 0 .$$

$$\lambda^2 : \quad H_0 |2\rangle + W |1\rangle = \epsilon_0 |2\rangle + \epsilon_1 |1\rangle + \epsilon_2 |0\rangle \\ \implies (H_0 - \epsilon_0) |2\rangle + (W - \epsilon_1) |1\rangle - \epsilon_2 |0\rangle = 0 .$$

etc.

On avait $H(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle$.

- on demande que $|\psi(\lambda)\rangle$ soit normé.
- on choisit sa phase de sorte que $\langle 0 | \psi(\lambda) \rangle$ soit réel.

Ceci implique que:

- $O(\lambda^0)$: $\langle 0|0\rangle = 1$.
- $O(\lambda^1)$: $\langle \psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = \langle 0|0\rangle + \lambda [\langle 1|0\rangle + \langle 0|1\rangle]$
 $\implies \langle 1|0\rangle = \langle 0|1\rangle = 0$.
- $O(\lambda^2)$: le prochain terme est $\lambda^2 [\langle 2|0\rangle + \langle 0|2\rangle + \langle 1|1\rangle]$
 $\implies \langle 2|0\rangle = \langle 0|2\rangle = -\frac{1}{2}\langle 1|1\rangle$.
- etc.

On avait $H_0 |\varphi_p^i\rangle = E_p^0 |\varphi_p^i\rangle$, où i correspond aux dégénérescences possibles. On va traiter les deux cas séparément:

- \nexists dégénérescence,
- \exists dégénérescence.

Cas non-dégénéré: lorsque $\lambda \rightarrow 0$, les états propres et valeurs propres de $H(\lambda)$ deviennent ceux de H_0 . Donc, $|0\rangle = |\varphi_n\rangle$ et $\epsilon_0 = E_n^0$.

ϵ_1 ? Nous avons $(H_0 - \epsilon_0) |1\rangle + (W - \epsilon_1) |0\rangle = 0$. Alors

$$\langle \varphi_n | (H_0 - \epsilon_0) |1\rangle + \langle \varphi_n | (W - \epsilon_1) |0\rangle = 0 ,$$

Mais $|\varphi_n\rangle = |0\rangle$ est un état propre de H_0 avec valeurs propres $E_n^0 = \epsilon_0$
 $\implies \langle \varphi_n | (H_0 - \epsilon_0) |1\rangle = 0$. Donc,

$$\epsilon_1 = \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle .$$

Alors,

$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle$$

à l'ordre λ^1 . C'est-à-dire: la première correction à l'énergie est simplement la valeur moyenne de W dans l'état non-perturbé $|\varphi_n\rangle$.

$|1\rangle$? Nous avons $(H_0 - \epsilon_0) |1\rangle + (W - \epsilon_1) |0\rangle = 0$. Alors

$$\langle \varphi_p^i | (H_0 - \epsilon_0) |1\rangle + \langle \varphi_p^i | (W - \epsilon_1) |0\rangle = 0 ,$$

où $\langle \varphi_p^i | \neq \langle \varphi_n |$.

Comme $\langle \varphi_p^i | \epsilon_1 |0\rangle \sim \langle \varphi_p^i | \varphi_n \rangle = 0$, on a

$$(E_p^0 - E_n^0) \langle \varphi_p^i | 1 \rangle + \langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle = 0 .$$

Alors,

$$\langle \varphi_p^i | 1 \rangle = \frac{1}{(E_n^0 - E_p^0)} \langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle .$$

Si on écrit $|1\rangle$ comme une combinaison linéaire de tous les états $|\varphi_p^i\rangle$, cette relation donne les coefficients des $|\varphi_p^i\rangle$ pour $|\varphi_p^i\rangle \neq |\varphi_n\rangle$. Mais comme $\langle \varphi_n | 1 \rangle = \langle 0 | 1 \rangle = 0$, l'état $|1\rangle$ n'a pas de composante $|\varphi_n\rangle$. Donc cette relation donne tous les coefficients:

$$|1\rangle = \sum_{i,p \neq n} \frac{\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle}{(E_n^0 - E_p^0)} |\varphi_p^i\rangle .$$

À l'ordre λ^1 , nous avons

$$|\psi\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{i,p \neq n} \frac{\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle}{(E_n^0 - E_p^0)} |\varphi_p^i\rangle .$$

Les états propres de $H = H_0 + W$ sont une combinaison linéaire de tous les états propres de $H_0 \implies W$ produit un mélange entre $|\varphi_n\rangle$ et tous les autres états. Le mélange est maximisé lorsque $\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle$ est grand et $(E_n^0 - E_p^0)$ petit (en général les niveaux voisins).

Maintenant on peut calculer ϵ_2 . Nous avons
 $(H_0 - \epsilon_0) |2\rangle + (W - \epsilon_1) |1\rangle - \epsilon_2 |0\rangle = 0$. Alors,

$$\langle \varphi_n | (H_0 - \epsilon_0) |2\rangle + \langle \varphi_n | (W - \epsilon_1) |1\rangle = \langle \varphi_n | \epsilon_2 |0\rangle .$$

Le premier terme est nul, donc

$$\epsilon_2 = \langle \varphi_n | W |1\rangle = \sum_{i,p \neq n} \frac{|\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle|^2}{(E_n^0 - E_p^0)} .$$

Alors, à l'ordre λ^2 ,

$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{i,p \neq n} \frac{|\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle|^2}{(E_n^0 - E_p^0)} .$$

Remarque: plus la différence $(E_n^0 - E_p^0)$ est petite, plus la correction à E_n^0 est grande.

Lorsque $(E_n^0 - E_p^0) \rightarrow 0$, les corrections divergent \implies il faut traiter séparément (ii) le cas dégénéré.

On suppose que l'énergie E_n^0 est dégénérée g_n fois. On a

$$H_0 |0\rangle = \epsilon_0 |0\rangle = E_n^0 |0\rangle .$$

Mais: s'il y a dégénérescence, ceci ne spécifie pas $|0\rangle$: $|0\rangle$ pourrait être n'importe quelle combinaison linéaire des g_n états avec valeur propre E_n^0 . Alors, dans ce cas on ne connaît pas $|0\rangle$.

Passons à l'ordre λ^1 . Nous avons

$\langle \varphi_n^i | (H_0 - \epsilon_0) |1\rangle + \langle \varphi_n^i | (W - \epsilon_1) |0\rangle = 0, i = 1, 2, \dots, g_n$. Le premier terme est nul, donc

$$\langle \varphi_n^i | W |0\rangle = \epsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0\rangle .$$

Comme on ne connaît pas $|0\rangle$, ceci représente g_n équations, une pour chacun des $\langle \varphi_n^i |$.

On insère un ensemble complet d'états:

$$\sum_{p,i'} \langle \varphi_n^i | W | \varphi_p^{i'} \rangle \langle \varphi_p^{i'} | 0 \rangle = \epsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle .$$

Mais $|0\rangle$ est au plus une combinaison linéaire des états $\varphi_n^i \implies p = n$:

$$\sum_{i'=1}^{g_n} \langle \varphi_n^i | W | \varphi_n^{i'} \rangle \langle \varphi_n^{i'} | 0 \rangle = \epsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle \quad : \quad g_n \text{ équations .}$$

$\implies \langle \varphi_n^i | W | \varphi_n^{i'} \rangle$ est une matrice $g_n \times g_n$. Le vecteur colonne $\langle \varphi_n^i | 0 \rangle$

est un vecteur propre de $\langle \varphi_n^i | W | \varphi_n^{i'} \rangle$ avec valeur propre ϵ_1 .

Également: on appelle $W^{(n)}$ la projection de l'opérateur W sur le sous-espace des $|\varphi_n^i\rangle$. L'équation ci-dessus est

$$W^{(n)} |0\rangle = \epsilon_1 |0\rangle .$$

C'est-à-dire: le vecteur $|0\rangle$ est un vecteur propre de la matrice

$\langle \varphi_n^i | W | \varphi_n^{i'} \rangle$ et ϵ_1 est la première correction à l'énergie (g_n valeurs). Si

toutes ces valeurs sont différentes, la dégénérescence est complètement levée.

Exemples. (1) On rajoute une constante, C : $H = H_0 + C$. Solution exacte: la constante est ajoutée aux énergies, les états propres de changent pas.

Qu'est-ce qu'on trouve?

$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{i,p \neq n} \frac{|\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle|^2}{(E_n^0 - E_p^0)},$$

$$|\psi\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{i,p \neq n} \frac{\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle}{(E_n^0 - E_p^0)} |\varphi_p^i\rangle.$$

Mais comme $W = C$, $\langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle = C$ et $\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle = 0 \implies$

$$E_n = E_n^0 + C,$$

$$|\psi\rangle = |\varphi_n\rangle.$$

Donc on trouve la bonne réponse.

Perturbations de l'oscillateur harmonique. Rappel:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad , \quad [X, P] = i\hbar \quad .$$

On définit

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \quad , \quad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P \quad , \quad H = \hbar\omega \hat{H} \quad .$$

Avec ces définitions, on a

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i \quad , \quad \hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad .$$

Ensuite

$$a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}) \quad , \quad a^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P}) \quad \implies \quad [a, a^\dagger] = 1 \quad .$$

On définit $N \equiv a^\dagger a \implies H = N + \frac{1}{2}$. Les états propres de H sont les états propres de N :

$$N |\varphi_n\rangle = n |\varphi_n\rangle \quad , \quad a^\dagger |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle \quad , \quad a |\varphi_n\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle \quad .$$

Les φ_n sont les états propres de H , avec valeurs propres $(n + \frac{1}{2}) \hbar\omega$.

(2) On rajoute le potentiel linéaire $W = \lambda \hbar \omega \hat{X}$. Solution exacte:

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 + \lambda \hbar \omega \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \\
 &= \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} \left[m \omega^2 X^2 + 2 \lambda \hbar \omega \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \right] \\
 &= \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} \left[\sqrt{m\omega^2} X + \frac{\lambda \hbar \omega}{\sqrt{m\omega^2}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right]^2 - \frac{1}{2} \lambda^2 \hbar \omega .
 \end{aligned}$$

Nous avons déjà traité la constante à la fin. Donc on s'attend à ce que $E'_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega - \frac{1}{2} \lambda^2 \hbar \omega$.

Les états propres sont les mêmes, avec un déplacement en x :

$$x' = x + \lambda \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \implies |\varphi'_n\rangle = e^{-\frac{\lambda}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)} |\varphi_n\rangle ,$$

où on a appliqué l'opérateur de translation. Donc

$$|\varphi'_n\rangle = |\varphi_n\rangle - \lambda \sqrt{\frac{n+1}{2}} |\varphi_{n+1}\rangle + \lambda \sqrt{\frac{n}{2}} |\varphi_{n-1}\rangle + \dots$$

Théorie des perturbations: $W = \lambda \hbar \omega \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger) \implies \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle = 0.$

Mais

$$\langle \varphi_{n+1} | W | \varphi_n \rangle = \lambda \sqrt{\frac{n+1}{2}} \hbar \omega, \quad \langle \varphi_{n-1} | W | \varphi_n \rangle = \lambda \sqrt{\frac{n}{2}} \hbar \omega.$$

Alors

$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{i,p \neq n} \frac{|\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle|^2}{(E_n^0 - E_p^0)} = E_n^0 - \frac{1}{2} \lambda^2 \hbar \omega,$$

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\varphi_n\rangle + \sum_{i,p \neq n} \frac{\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle}{(E_n^0 - E_p^0)} |\varphi_p^i\rangle \\ &= |\varphi_n\rangle - \lambda \sqrt{\frac{n+1}{2}} |\varphi_{n+1}\rangle + \lambda \sqrt{\frac{n}{2}} |\varphi_{n-1}\rangle + \dots \end{aligned}$$

Donc on retrouve la solution exacte. (Pour l'énergie, on peut montrer que $\epsilon_n = 0$ pour $n > 2$.)

(3) On rajoute le potentiel quadratique $W = \frac{1}{2}\rho m\omega^2 X^2 = \frac{1}{2}\rho\hbar\omega\hat{X}^2$.

Alors

$$\begin{aligned} H &= \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \frac{1}{2}\rho m\omega^2 X^2 \\ &= \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(1 + \rho)X^2 . \end{aligned}$$

Solution exacte: on se concentre sur les énergies. On a les mêmes énergies, avec $\omega \rightarrow \omega' = \omega\sqrt{1 + \rho}$. Donc

$$E'_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega' = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \left(1 + \frac{1}{2}\rho - \frac{1}{8}\rho^2 + \dots\right) .$$

Théorie des perturbations:

$$W = \frac{1}{4}\rho\hbar\omega (a + a^\dagger)^2 = \frac{1}{4}\rho\hbar\omega (a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a) .$$

ϵ_1 : il nous faut $\langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle \implies$ seulement les termes aa^\dagger , $a^\dagger a$ contribuent:

$$\langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle = \frac{1}{4} \rho \hbar \omega (2n + 1) = \frac{1}{2} \rho \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) .$$

ϵ_2 : il nous faut $\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle \implies$ seulement les termes a^2 , $a^{\dagger 2}$ contribuent, il relie $|\varphi_n\rangle$ à $|\varphi_{n\pm 2}\rangle$:

$$\langle \varphi_{n+2} | W | \varphi_n \rangle = \frac{1}{4} \rho \hbar \omega \sqrt{n+1} \sqrt{n+2} ,$$

$$\langle \varphi_{n-2} | W | \varphi_n \rangle = \frac{1}{4} \rho \hbar \omega \sqrt{n} \sqrt{n-1} .$$

Alors

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \left(\frac{\rho}{2} \right) + \frac{\frac{1}{16} \rho^2 \hbar^2 \omega^2 (n+1)(n+2)}{-2\hbar \omega} + \frac{\frac{1}{16} \rho^2 \hbar^2 \omega^2 (n)(n-1)}{2\hbar \omega} .$$

Ceci équivaut

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \left(\frac{\rho}{2}\right) - \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \left(\frac{\rho^2}{8}\right) + \dots,$$

en accord avec le calcul exact.

(4) On rajoute le potentiel en X^3 : $W = \sigma \hbar\omega \hat{X}^3$ (oscillateur anharmonique). Alors

$$\begin{aligned} W &= \sigma \hbar\omega \frac{1}{(\sqrt{2})^3} (a + a^\dagger)^3 \\ &= \sigma \hbar\omega \frac{1}{2^{3/2}} \left(a^3 + a^2 a^\dagger + a a^\dagger a + a^\dagger a^2 + a^{\dagger 2} a + a^\dagger a a^\dagger + a a^{\dagger 2} + a^{\dagger 3} \right) \\ &= \sigma \hbar\omega \frac{1}{2^{3/2}} \left[a^3 + a^{\dagger 3} + 3N a^\dagger + 3(N+1)a \right]. \end{aligned}$$

Les parties de $W \sim a^3, a^{\dagger 3}$ relient $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_{n\pm 3}\rangle$; les parties de $W \sim N a^\dagger, (N+1)a$ relient $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_{n\pm 1}\rangle$.

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_{n+3} | W | \varphi_n \rangle &= \frac{\sigma \hbar \omega}{2^{3/2}} \langle \varphi_{n+3} | a^{\dagger 3} | \varphi_n \rangle = \frac{\sigma \hbar \omega}{2^{3/2}} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} , \\
\langle \varphi_{n-3} | W | \varphi_n \rangle &= \frac{\sigma \hbar \omega}{2^{3/2}} \langle \varphi_{n-3} | a^3 | \varphi_n \rangle = \frac{\sigma \hbar \omega}{2^{3/2}} \sqrt{n(n-1)(n-2)} , \\
\langle \varphi_{n+1} | W | \varphi_n \rangle &= \frac{\sigma \hbar \omega}{2^{3/2}} 3 \langle \varphi_{n+1} | N a^{\dagger} | \varphi_n \rangle = \frac{\sigma \hbar \omega}{2^{3/2}} 3(n+1) \sqrt{n+1} , \\
\langle \varphi_{n-1} | W | \varphi_n \rangle &= \frac{\sigma \hbar \omega}{2^{3/2}} 3 \langle \varphi_{n-1} | (N+1)a | \varphi_n \rangle = \frac{\sigma \hbar \omega}{2^{3/2}} 3 [(n-1)\sqrt{n} + \sqrt{n}] .
\end{aligned}$$

On peut calculer les corrections aux énergies. La première correction $\epsilon_1 = 0$. Deuxième correction:

$$\epsilon_2 = \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle \varphi_{n'} | W | \varphi_n \rangle|^2}{(E_n - E_{n'})} .$$

On trouve

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega - \frac{15}{4} \sigma^2 \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{7}{16} \sigma^2 \hbar \omega .$$

L'effet de la correction est de baisser l'énergie; plus n est grand, plus l'effet est grand:

$$E_n - E_{n-1} = \hbar\omega \left[1 - \frac{15}{2}\sigma^2 n \right] .$$

Ce calcul est utile: on peut faire un développement de Taylor de n'importe quel potentiel $V(x)$ autour de $x = 0$:

$$V(x) = V(0) + x \left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x=0} + x^2 \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \dots$$

Si le minimum est à $x = 0$, on a $V(0) = 0$ et $\left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$. Donc

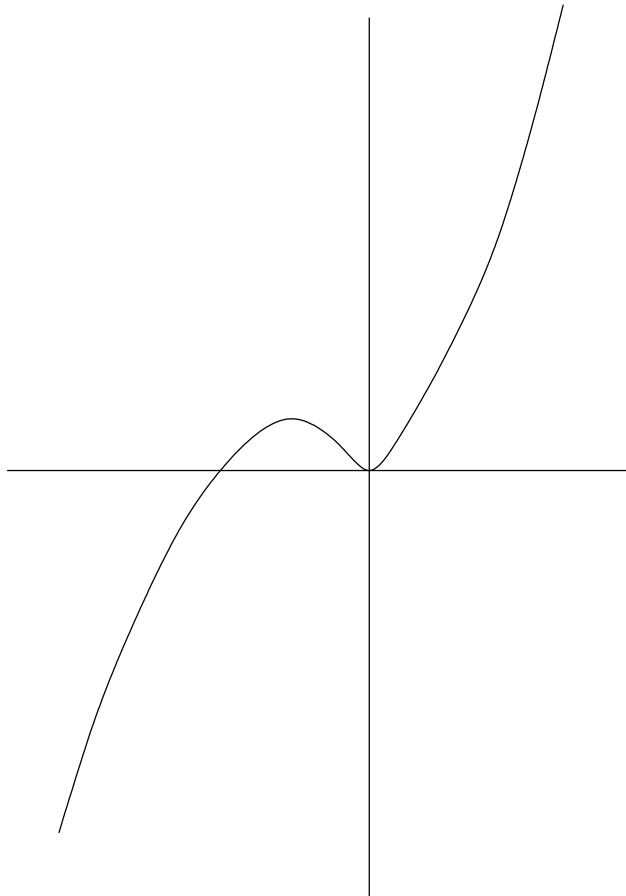
$$V(x) \sim ax^2 + bx^3 + \dots$$

La théorie des perturbations nous donne les énergies pour x petit.

Mais: on considère le potentiel ($\omega > 0$)

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \sigma\hbar\omega \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/2} X^3 .$$

Lorsque $x \rightarrow \infty$, $V(x) \rightarrow \infty$. Cependant, lorsque $x \rightarrow -\infty$, $V(x) \rightarrow -\infty$:



Donc, le vrai problème n'a pas d'états liés. Nous avons calculé les corrections aux énergies de l'état métastable. Cependant, éventuellement les particules vont sortir par l'effet tunnel. Alors, la version naive du problème n'est pas complet et la théorie des perturbations ne donne pas la bonne réponse.

(5) Cohen-Tannoudji, H_{XI} , parties (a)-(d). On considère un système du moment angulaire, se limitant au sous-espace avec $J = 1$. Il y a trois états: $|1\rangle$, $|0\rangle$, $|-1\rangle$. L'Hamiltonien s'écrit

$$H_0 = aJ_z + \frac{b}{\hbar} J_z^2 ,$$

avec $a, b > 0$.

(a) Quels sont les niveaux d'énergie? Pour quelles valeurs de a et b y a-t-il dégénérescence?

$$H_0 |M\rangle = (aM + bM^2) |M\rangle .$$

Donc les énergies sont: $E_1 = (a + b)$, $E_0 = 0$, $E_{-1} = -(a - b)$. Si $a = b$, il y a dégénérescence car $E_0 = E_{-1} = 0$.

(b) On applique un champ magnétique \vec{B} dans la direction \vec{u} (angles polaires θ et ϕ). Le moment magnétique $\vec{M} = \gamma\vec{J}$ interagit avec \vec{B} :

$$W = \gamma\vec{J} \cdot \vec{B} = \omega_0 J_u .$$

$J_u = \vec{J} \cdot \hat{u} = J_z \cos \theta + J_x \sin \theta \cos \phi + J_y \sin \theta \sin \phi$ (la composante de \vec{J} dans la direction \vec{u}).

Écrire la matrice W dans la base $\{|1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle\}$.

Nous avons $J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$, $J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$. Donc

$$J_u = \cos \theta J_z + \frac{1}{2} \sin \theta e^{-i\phi} J_+ + \frac{1}{2} \sin \theta e^{i\phi} J_- .$$

$$\begin{aligned} \implies \langle M' | J_u | M \rangle &= M \cos \theta \delta_{M,M'} + \frac{1}{2} \sin \theta e^{-i\phi} \sqrt{2 - M(M+1)} \delta_{M+1,M'} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sin \theta e^{i\phi} \sqrt{2 - M(M-1)} \delta_{M-1,M'} . \end{aligned}$$

Donc, dans la base $\{|1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle\}$,

$$W = \begin{pmatrix} \omega_0 \cos \theta & \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_0 \sin \theta e^{-i\phi} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_0 \sin \theta e^{i\phi} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_0 \sin \theta e^{-i\phi} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_0 \sin \theta e^{i\phi} & -\omega_0 \cos \theta \end{pmatrix}$$

(c) On suppose que $b = a$ et que $\hat{u} = \hat{x}$. Calculer les énergies à l'ordre 1 et les états à l'ordre 0.

$\hat{x} \implies \theta = \frac{\pi}{2}, \phi = 0$. Alors

$$W = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_0 & 0 \end{pmatrix}$$

L'état $|1\rangle$ est non-dégénéré \implies c'est l'état à l'ordre 0. La correction à l'énergie à l'ordre 1 est $\langle 1|W|1\rangle = 0$.

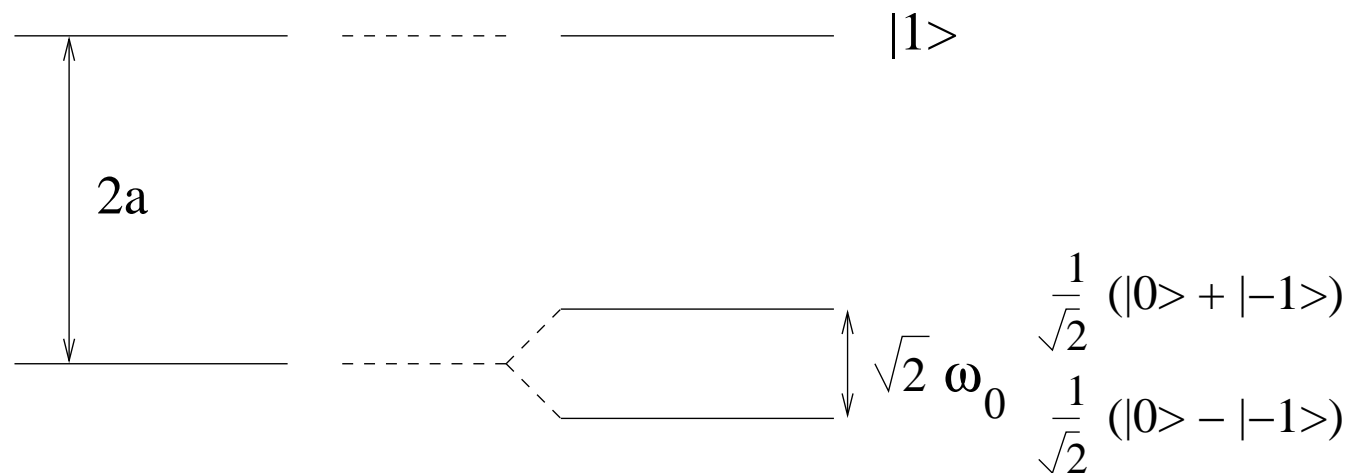
Les états $|0\rangle$ et $|-1\rangle$ sont dégénérés. Pour ces états il faut diagonaliser

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_0 & 0 \end{pmatrix} .$$

Les valeurs propres sont $\pm \frac{1}{\sqrt{2}}\omega_0$. Les états propres associés à ces valeurs sont:

$$+\frac{1}{\sqrt{2}}\omega_0 : \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |-1\rangle) , \quad -\frac{1}{\sqrt{2}}\omega_0 : \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |-1\rangle) .$$

Les valeurs propres sont les corrections aux énergies à l'ordre 1. Les états propres sont les états à l'ordre 0.



La dégénérescence est levée.

(d) On suppose que $b = 2a$ mais \hat{u} est quelconque. Quel est l'état fondamental de $H = H_0 + W$ à l'ordre 1?

Si $b = 2a$, les énergies sont $E_1 = 3a$, $E_{-1} = a$, $E_0 = 0$. Donc l'état fondamental est $|0\rangle$:

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle &= |0\rangle + \frac{\langle 1|W|0\rangle}{E_0 - E_1} |1\rangle + \frac{\langle -1|W|0\rangle}{E_0 - E_{-1}} |-1\rangle \\ &= |0\rangle + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}} \omega_0 \sin \theta e^{-i\phi}}{(-3a)} |1\rangle + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}} \omega_0 \sin \theta e^{i\phi}}{(-a)} |-1\rangle . \end{aligned}$$

(6) Cohen-Tannoudji, complément B_{XI} . On considère deux particules à des endroits fixes dans l'espace (e.g. dans un cristal). On ne considère que les degrés de liberté reliés aux spins. On place le cristal dans un champ \vec{B}_0 dans la direction \hat{z} . Les moments magnétiques des particules interagissent avec le champ:

$$H_0 = \omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z} ,$$

où $\omega_i = -\gamma_i B_0$ (les γ_i sont les rapports gyromagnétiques).

Les états propres du système sont $|\epsilon_1 \epsilon_2\rangle \sim |m_1 m_2\rangle$:

$$H_0 |\epsilon_1 \epsilon_2\rangle = \frac{1}{2} \hbar (\epsilon_1 \omega_1 + \epsilon_2 \omega_2) |\epsilon_1 \epsilon_2\rangle .$$

On suppose que $\omega_1 > \omega_2 > 0 \implies \nexists$ dégénérescence. Les énergies sont

$$\text{-----} |+\ +\rangle \quad \frac{\hbar}{2} (\omega_1 + \omega_2)$$

$$\text{-----} |+\ -\rangle \quad \frac{\hbar}{2} (\omega_1 - \omega_2)$$

$$\text{-----} |-\ +\rangle \quad -\frac{\hbar}{2} (\omega_1 - \omega_2)$$

$$\text{-----} |-\ -\rangle \quad -\frac{\hbar}{2} (\omega_1 + \omega_2)$$

On considère maintenant l'effet de l'interaction spin-spin entre les deux particules:

$$W = \frac{\mu_0}{4\pi} \gamma_1 \gamma_2 \frac{1}{r^3} \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - 3(\vec{S}_1 \cdot \hat{n})(\vec{S}_2 \cdot \hat{n}) \right] .$$

Rappel: dans le TP#3, vous avez appris que l'interaction entre deux moments dipolaires magnétiques $\vec{\mu}_1$ et $\vec{\mu}_2$ a la forme suivante:

$$H = -\frac{1}{r^3} \left[\frac{3\vec{\mu}_1 \cdot \vec{r} \vec{\mu}_2 \cdot \vec{r}}{r^2} - \vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2 \right] = \sum_{\mu} M_{\mu}^{(2)} Y_{2,-\mu} (-1)^{\mu} ,$$

où $Y_{2,-\mu}$ sont des harmoniques sphériques et $M_{\mu}^{(2)}$ sont les composantes d'un opérateur tensoriel de rang 2 formé de $\vec{\mu}_1$ et $\vec{\mu}_2$.

Alors, l'interaction spin-spin est aussi le produit d'un opérateur tensoriel de rang 2, formé de \vec{S}_1 et \vec{S}_2 , avec les harmoniques sphériques. (On peut démontrer ceci en écrivant $\hat{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ et en remplaçant $S_x \cos \phi + S_y \sin \phi \rightarrow \frac{1}{2} [S_+ e^{-i\phi} + S_- e^{i\phi}]$.)

La composante avec $\mu = 0$ ($M_0^{(2)} Y_{2,0}$) a deux parties, T_0 et T'_0 :

$$W = \xi(r) [T_0 + T'_0 + T_1 + T_{-1} + T_2 + T_{-2}] ,$$

où

$$T_0 = (3 \cos^2 \theta - 1) S_{1z} S_{2z}$$

$$T'_0 = -\frac{1}{4} (3 \cos^2 \theta - 1) (S_{1+} S_{2-} + S_{1-} S_{2+})$$

$$T_1 \sim (S_{1z} S_{2+} + S_{1+} S_{2z})$$

$$T_{-1} \sim (S_{1z} S_{2-} + S_{1-} S_{2z})$$

$$T_2 \sim S_{1+} S_{2+}$$

$$T_{-2} \sim S_{1-} S_{2-}$$

Effets : $T_0 : |\epsilon_1 \epsilon_2\rangle \rightarrow |\epsilon_1 \epsilon_2\rangle$, $T'_0 : |+-\rangle \leftrightarrow |-+\rangle$

$T_1 : |\epsilon_1 -\rangle \rightarrow |\epsilon_1 +\rangle$, $|- \epsilon_2\rangle \rightarrow |+ \epsilon_2\rangle$

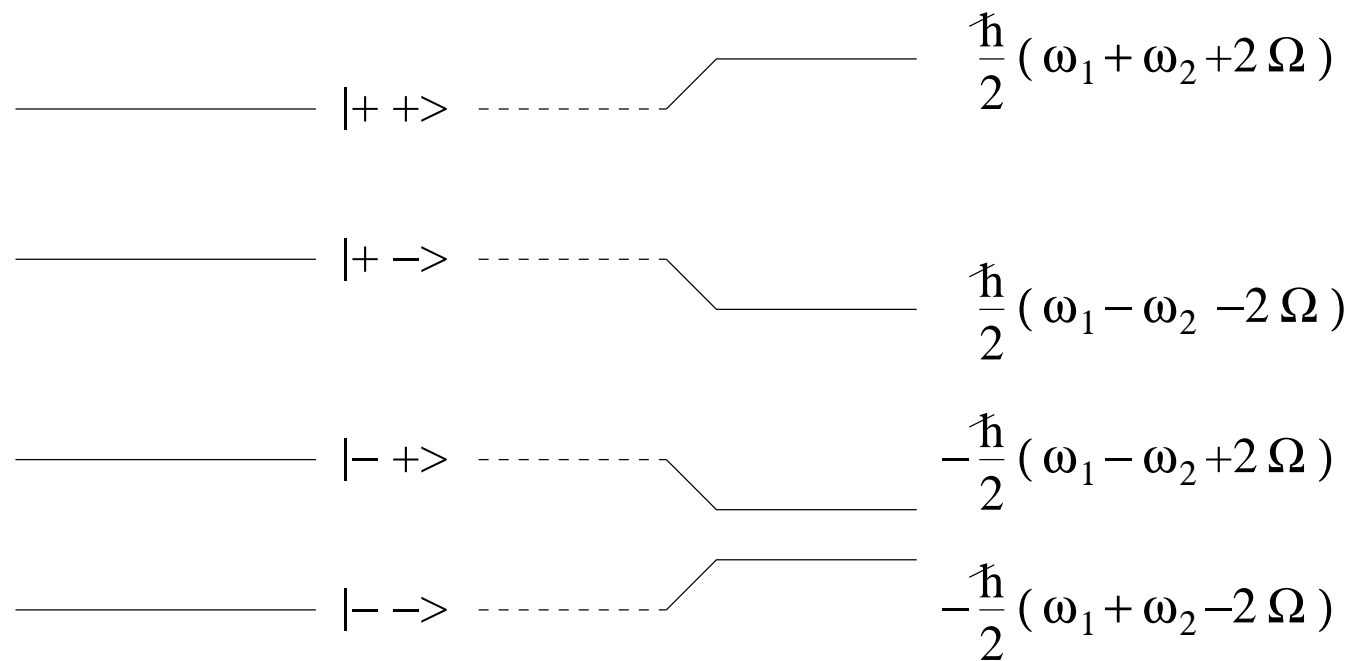
$T_{-1} : |\epsilon_1 +\rangle \rightarrow |\epsilon_1 -\rangle$, $|+ \epsilon_2\rangle \rightarrow |- \epsilon_2\rangle$

$T_2 : |--\rangle \rightarrow |++\rangle$, $T_{-2} : |++\rangle \rightarrow |--\rangle$

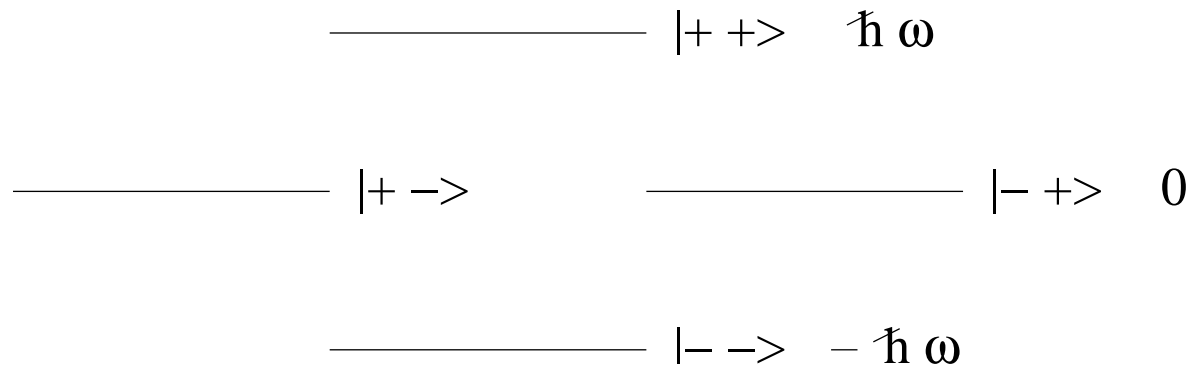
On calcule maintenant les corrections aux énergies à l'ordre 1. Nous avons $\epsilon^{(1)} \sim \langle \epsilon_1 \epsilon_2 | W | \epsilon_1 \epsilon_2 \rangle$, alors seulement T_0 contribue:

$$\epsilon^{(1)} \sim \langle \epsilon_1 \epsilon_2 | W | \epsilon_1 \epsilon_2 \rangle = \xi(r)(3 \cos^2 \theta - 1) \frac{\epsilon_1 \epsilon_2 \hbar^2}{4} \equiv \epsilon_1 \epsilon_2 \hbar \Omega .$$

En présence de la correction ϵ_1 , les énergies sont



Au lieu, supposons que $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$. Dans ce cas, il y a une dégénérescence:



Maintenant on considère les corrections aux énergies à l'ordre 1. Les états $|++\rangle$ et $|--\rangle$ sont non-dégénérés \implies leurs corrections sont comme avant, $\epsilon_1 = +\hbar\Omega$.

Par contre, les états $|+-\rangle$ et $|-+\rangle$ sont dégénérés, donc il faut diagonaliser

$$\begin{pmatrix} \langle+-|W|+-\rangle & \langle+-|W|-+\rangle \\ \langle-+|W|+-\rangle & \langle-+|W|-+\rangle \end{pmatrix} .$$

Les éléments sur la diagonale ont la forme $\epsilon_1 \sim \langle \epsilon_1 \epsilon_2 | W | \epsilon_1 \epsilon_2 \rangle$. Donc seulement T_0 contribue et on trouve $-\hbar\Omega$. Pour les éléments en dehors de la diagonale, c'est T'_0 qui contribue:

$$\begin{aligned} \langle +- | W | -+ \rangle &= -\frac{1}{4}(3 \cos^2 \theta - 1)\xi(r) \langle +- | (S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}) | -+ \rangle \\ &= -\frac{1}{4}(3 \cos^2 \theta - 1)\xi(r) = -\hbar\Omega . \end{aligned}$$

Alors, il faut diagonaliser

$$-\hbar\Omega \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} .$$

Valeurs propres: 2,0. Vecteurs propres:

$$\lambda = 2 \quad : \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [|+- \rangle + |-+ \rangle] ,$$

$$\lambda = 0 \quad : \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [|+- \rangle - |-+ \rangle] .$$

Les énergies sont maintenant:

$$\text{—————} \quad |+\ +\rangle \quad \hbar(\omega+\Omega)$$

$$\text{—————} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [|+\ -\rangle - |-\ +\rangle] \quad 0$$

$$\text{—————} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [|+\ -\rangle + |-\ +\rangle] \quad -2\hbar\Omega$$

$$\text{—————} \quad |-\ -\rangle \quad -\hbar(\omega-\Omega)$$

On reconnaît les états triplet et singulet: états propres de \vec{S}^2 et S_z , où $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$. La dégénérescence est levée.

Méthode des Variations

Autre méthode d'approximation: la méthode des variations: s'applique au cas où on ne connaît pas la solution exacte:

$$H |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle .$$

On connaît H , mais pas $|\varphi_n\rangle$ ou E_n . La méthode des variations nous permet d'apprendre des aspects de l'état fondamental.

On considère un état arbitraire dans l'espace des états (pas nécessairement normé):

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle .$$

Alors

$$\langle\psi| H |\psi\rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |c_n|^2 .$$

Donc

$$E_0 \leq \frac{\langle\psi| H |\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} .$$

Ceci nous donne une limite sur E_0 .

Amélioration: on choisit une famille d'états $|\psi(\alpha)\rangle$ qui dépend du paramètre α . On calcule la valeur moyenne $\langle H \rangle(\alpha)$. On minimise $\langle H \rangle(\alpha)$ par rapport à $\alpha \implies$ une valeur approximative pour E_0 .

Occasionnellement, cette méthode peut fonctionner pour des états excités. E.g. si H a une symétrie sphérique et on limite la fonction d'essai à des états p , le minimum de $\langle \psi | H | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ donne une limite supérieure sur l'énergie de l'état p le plus bas, etc.

C'est-à-dire: étant donné que les niveaux d'énergie E_0, E_1, \dots, E_n sont associées avec les états $|\varphi_i\rangle, i = 1, \dots, n$, si on choisit $|\psi\rangle$ orthogonal aux $|\varphi_i\rangle, i = 1, \dots, n$, la méthode des variations donnera une approximation à E_{n+1} . L'orthogonalité se fait à l'aide d'une symétrie (e.g. moment angulaire, parité, etc.).

On peut trouver une approximation aux états propres. On considère la variation de $\langle H \rangle$ lorsqu'on change $|\psi\rangle$ par une petite quantité. C'est-à-dire: lorsque $|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle + |\delta\psi\rangle$, quel est $\delta\langle H \rangle$?

On écrit

$$\langle H \rangle \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle$$

et on calcule la dérivée des deux côtés. Côté gauche:

$$\delta\langle H \rangle \langle \psi | \psi \rangle + \langle H \rangle [\langle \psi | \delta\psi \rangle + \langle \delta\psi | \psi \rangle] .$$

Côté droit:

$$\langle \psi | H | \delta\psi \rangle + \langle \delta\psi | H | \psi \rangle .$$

(Comme on connaît H , $\delta H = 0$.)

Comme $\langle H \rangle$ est un chiffre,

$$\delta\langle H \rangle \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | (H - \langle H \rangle) | \delta\psi \rangle + \langle \delta\psi | (H - \langle H \rangle) | \psi \rangle .$$

Ceci définit comment $\langle H \rangle$ change en présence de $|\delta\psi\rangle$.

Or, $\delta\langle H \rangle = 0 \implies \langle H \rangle$ est stationnaire. Donc,

$$\langle \psi | (H - \langle H \rangle) | \delta\psi \rangle + \langle \delta\psi | (H - \langle H \rangle) | \psi \rangle = 0 .$$

On définit

$$|\phi\rangle \equiv (H - \langle H \rangle) |\psi\rangle .$$

Alors

$$\langle \phi | \delta\psi \rangle + \langle \delta\psi | \phi \rangle = 0 .$$

Ceci est vrai $\forall |\delta\psi\rangle \implies |\phi\rangle \perp |\delta\psi\rangle \forall |\delta\psi\rangle \implies |\phi\rangle = 0$. Alors

$$H |\psi\rangle = \langle H \rangle |\psi\rangle .$$

Donc, $|\psi\rangle$ est un état propre de H avec valeur propre $\langle H \rangle \implies H$ est stationnaire ssi le $|\psi\rangle$ auquel il correspond est un état propre de H et $\langle H \rangle$ est une valeur propre de H .

Si $\langle H \rangle(\alpha)$ a plusieurs minima, chacun donne une valeur approximative d'une énergie E_i de H et le $|\psi(\alpha)\rangle$ donne un état propre approximatif.

Exemple (1): l'oscillateur harmonique. Nous connaissons l'état fondamental:

$$|\varphi_0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right), \quad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega.$$

Pour la méthode des variations, on utilise une fonction d'essai paire:

$$\psi_\alpha(x) = e^{-\alpha x^2}, \quad \alpha > 0.$$

On a

$$\langle\psi_\alpha|\psi_\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2\alpha x^2},$$

$$\langle\psi_\alpha|H|\psi_\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) e^{-\alpha x^2}.$$

On peut évaluer ces expressions, on obtient

$$\langle H\rangle(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha + \frac{1}{8}m\omega^2 \frac{1}{\alpha}.$$

On minimise par rapport à α :

$$\alpha_{min} = \frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} \implies E_0 \simeq \langle H \rangle (\alpha_{min}) = \frac{1}{2} \hbar\omega ,$$

ce qui est la réponse exacte. Ceci est attendu car on a utilisé une fonction d'essai de la même forme que la solution exacte.

Remarque: si on utilise une fonction d'essai qui est \perp la première, on trouvera une approximation au premier état excité.

Qu'est-ce qui se passe si on utilise une fonction d'essai différente? Il nous faut une fonction paire et normalisable. E.g.

$$\psi_a(x) = \frac{1}{x^2 + a} , \quad a > 0 .$$

$$\langle \psi_a(x) | \psi_a(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{(x^2 + a)^2} = \frac{\pi}{2a\sqrt{a}} .$$

On peut calculer $\langle \psi_a | H | \psi_a \rangle$. Ensuite on obtient

$$\langle H \rangle(a) = \frac{\hbar^2}{4m} \frac{1}{a} + \frac{1}{2} m \omega^2 a .$$

On minimise par rapport à a , on trouve

$$a = a_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{m\omega} \implies \langle H \rangle(a_0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar\omega .$$

Donc on voit que, effectivement, la valeur réelle de E_0 ($\frac{1}{2} \hbar\omega$) est plus petite que la valeur approximative.

Problème: comme on ne connaît pas la réponse exacte, il est très difficile d'estimer l'erreur dans la méthode.

Exemple (2): l'atome d'hélium (noyau de charge $+2e$ plus 2 électrons).
L'Hamiltonien est

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - 2e^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{r_{12}} .$$

Le dernier terme représente l'interaction de Coulomb entre les deux électrons.

Si on néglige l'interaction de Coulomb entre les deux électrons on peut écrire la solution exacte:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = u_{nlm}^{(1)}(r_1, \theta_1, \phi_1) u_{nlm}^{(2)}(r_2, \theta_2, \phi_2) ,$$

où $u_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ est une fonction d'onde hydrogènoïde.

L'état fondamental pour une particule est

$$u_{100} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Y_{00} , \quad R_{10} = \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0} ,$$

où $a_0 = \hbar^2 / me^2$ est le rayon de Bohr.

L'énergie pour une particule est

$$- \left(\frac{mc^2}{2} \right) (Z\alpha)^2, \quad \alpha = \frac{e^2}{c\hbar}.$$

Donc, pour l'atome d'hélium, si on néglige l'interaction de Coulomb entre les deux électrons, l'énergie de l'état fondamental est

$$E_0 = 2 \times \left(\frac{-mc^2}{2} \right) (2\alpha)^2 = -mc^2 (2\alpha)^2 = -108.8 \text{ eV}.$$

Mais expérimentalement on trouve $E_0 = -78.975 \text{ eV}$. Donc négliger l'interaction de Coulomb est une très mauvaise approximation \implies il faut l'inclure.

On utilise la méthode des variations. On écrit la fonction d'essai (normée)

$$\psi_{100}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{100}(\vec{r}_1) \psi_{100}(\vec{r}_2) = \frac{Z^{*3}}{\pi a_0^3} e^{-(Z^*/a_0)(r_1+r_2)}.$$

Z^* est un paramètre à varier.

Il faut calculer

$$\int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \psi_{100}^*(\vec{r}_1) \psi_{100}^*(\vec{r}_2) \left(\frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \times \psi_{100}(\vec{r}_1) \psi_{100}(\vec{r}_2) .$$

Remarque:

$$\left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} - \frac{Z^* e^2}{r_i} \right) \psi_{100}(\vec{r}_i) = \epsilon \psi_{100}(\vec{r}_i) , \quad \epsilon = -\frac{1}{2} (mc^2) (Z^* \alpha)^2 .$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow & \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \psi_{100}^*(\vec{r}_1) \psi_{100}^*(\vec{r}_2) \left(\frac{\vec{p}_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} \right) \psi_{100}(\vec{r}_1) \psi_{100}(\vec{r}_2) \\ &= \int d^3 r_1 \psi_{100}^*(\vec{r}_1) \left(\frac{\vec{p}_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} \right) \psi_{100}(\vec{r}_1) \\ &= \int d^3 r_1 \psi_{100}^*(\vec{r}_1) \left(\frac{\vec{p}_1^2}{2m} - \frac{Z^* e^2}{r_1} + \frac{(Z^* - Z)e^2}{r_1} \right) \psi_{100}(\vec{r}_1) \\ &= \epsilon + (Z^* - Z)e^2 \int d^3 r_1 |\psi_{100}^*(\vec{r}_1)|^2 \frac{1}{r_1} . \end{aligned}$$

Dernière intégrale: facile à évaluer. On obtient

$$\epsilon + (Z^* - Z)e^2 \frac{Z^*}{a_0} = \epsilon + Z^*(Z^* - Z)mc^2\alpha^2 .$$

On obtient le même résultat pour l'électron 2.

Pour le dernier terme, il faut calculer

$$\begin{aligned} & \int d^3r_1 \int d^3r_2 \psi_{100}^*(\vec{r}_1) \psi_{100}^*(\vec{r}_2) \left(\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \psi_{100}(\vec{r}_1) \psi_{100}(\vec{r}_2) \\ & = \int d^3r_1 \int d^3r_2 |\psi_{100}^*(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{100}^*(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} . \end{aligned}$$

On calcule ceci de façon rusée: $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = (r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{1/2}$.

On peut développer ceci en polynômes de Legendre $P_L(\cos \theta)$:

$$(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{1/2} = \begin{cases} \frac{1}{r_1} \sum_{L=0}^{\infty} \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^L P_L(\cos \theta) & r_1 > r_2 \\ \frac{1}{r_2} \sum_{L=0}^{\infty} \left(\frac{r_1}{r_2} \right)^L P_L(\cos \theta) & r_1 < r_2 \end{cases}$$

Or,

$$\int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \sum_{L=0}^{\infty} \left(\frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} \right) P_L(\cos \theta) .$$

Comme

$$\int_{-1}^1 d(\cos \theta) P_L(\cos \theta) P_{L'}(\cos \theta) = \frac{2\delta_{LL'}}{2L+1} ,$$

nous avons $\int_{-1}^1 d(\cos \theta) P_L(\cos \theta) = 2\delta_{L0}$.

Donc, le dernier terme devient

$$(4\pi)^2 \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{Z^*}{a_0} \right)^6 e^2 \int_0^{\infty} \left[\int_0^{r_1} \frac{1}{r_1} e^{-2Z^*(r_1+r_2)/a_0} r_2^2 dr_2 \right. \\ \left. + \int_{r_1}^{\infty} \frac{1}{r_2} e^{-2Z^*(r_1+r_2)/a_0} r_2^2 dr_2 \right] r_1^2 dr_1 .$$

On peut évaluer ces intégrales. On obtient

$$(4\pi)^2 \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{Z^*}{a_0} \right)^6 e^2 \left[\frac{1}{(4\pi)^2} \frac{5\pi^2 a_0^5}{8Z^{*5}} \right] = \frac{5}{8} \frac{Z^* e^2}{a_0} = \frac{5}{4} Z^* \left(\frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 \right) .$$

Donc

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= -\frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 \left[2Z^{*2} + 4Z^*(Z - Z^*) - \frac{5}{4} Z^* \right] \\ &= -\frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 \left[4ZZ^* - 2Z^{*2} - \frac{5}{4} Z^* \right] , \end{aligned}$$

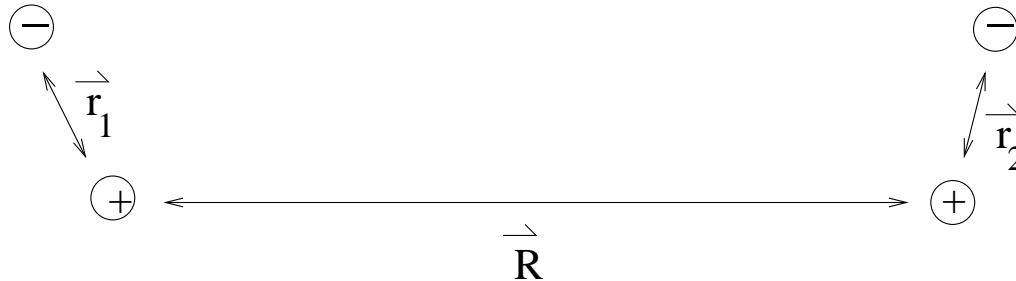
avec $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ (normé).

On minimise par rapport à Z^* : $Z^* = Z - \frac{5}{16} \implies$

$$E_0 \leq -\frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 \left[2 \left(Z - \frac{5}{16} \right) \right] = -77.38 \text{ eV} \quad \text{pour } Z = 2 .$$

- Bon accord avec le résultat expérimental, -78.975 eV.
- On peut estimer la correction à l'énergie de l'état fondamental à l'aide de la théorie des perturbations: on traite $e^2 / |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ comme une perturbation. Il faut antisymétriser la fonction d'onde par rapport aux deux électrons. Résultat: -74.8 eV, moins bon qu'avec la méthode des variations.
- Interprétation physique: on trouve $Z^* = Z - \frac{5}{16}$, $\implies Z^* = \frac{27}{16}$ au lieu de 2. C'est *l'effet d'écran*. À cause des charges électroniques, la charge nucléaire effective est réduite.

Exemple (3): forces de Van der Waal (Cohen-Tannoudji, C_{XI}). On considère deux atomes d'hydrogène dont les protons sont fixes, à une distance $R \gg a_0$ l'un de l'autre:



Les interactions électrostatiques sont

$$V = e^2 \left[\frac{1}{R} + \frac{1}{|\vec{R} + \vec{r}_1 + \vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{R} + \vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{R} + \vec{r}_1|} \right].$$

On développe les dénominateurs. Le premier terme non-nul est au deuxième ordre:

$$V \simeq -e^2 (\vec{r}_1 \cdot \vec{\nabla})(\vec{r}_2 \cdot \vec{\nabla}) \frac{1}{R} = e^2 \left[\frac{\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2}{R^3} - \frac{3(\vec{r}_1 \cdot \vec{R})(\vec{r}_2 \cdot \vec{R})}{R^5} \right].$$

Ceci est l'interaction entre deux moments dipolaires $e\vec{r}_1$ et $e\vec{r}_2$, séparés par \vec{R} .

Autre façon de voir ceci: on définit les deux moments dipolaires:

$\vec{\mathcal{D}}_1 \equiv e\vec{r}_1$ et $\vec{\mathcal{D}}_2 \equiv e\vec{r}_2$. L'atome 1 donne lieu à un potentiel électrostatique avec lequel l'atome 2 interagit.

Les atomes sont neutres \implies l'interaction la plus importante est celle entre $\vec{\mathcal{D}}_2$ et le champ électrique créé par $\vec{\mathcal{D}}_1$. Le potentiel électrostatique de $\vec{\mathcal{D}}_1$ est

$$U(R) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{\mathcal{D}}_1 \cdot \vec{R}}{R^3} .$$

\implies le champ électrique est

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}_R U = -e \frac{1}{R^3} \left[\vec{r}_1 - \frac{3(\vec{r}_1 \cdot \vec{R})\vec{R}}{R^3} \right] .$$

Le potentiel d'interaction est

$$\begin{aligned} V &= -\vec{E} \cdot \vec{\mathcal{D}}_2 = \frac{e^2}{R^3} \left[\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 - \frac{3(\vec{r}_1 \cdot \vec{R})(\vec{r}_2 \cdot \vec{R})}{R^2} \right] \quad \vec{R} = R\hat{z} \\ &= \frac{e^2}{R^3} (x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2) . \end{aligned}$$

Quel est l'effet sur l'état fondamental? D'abord: la théorie des perturbations. $H = H_0 + W$, avec $H_0 = H_0^1 + H_0^2$ et $W = V_{VanderWaal}$. L'état fondamental non-perturbé consiste de deux fonctions d'onde hydrogènoïdes:

$$(H_0^1 + H_0^2) |\varphi_{nlm}^1; \varphi_{n'l'm'}^2\rangle = (E_n + E_{n'}) |\varphi_{nlm}^1; \varphi_{n'l'm'}^2\rangle .$$

L'état fondamental est $|\varphi_{100}^1; \varphi_{100}^2\rangle$ (non-dégénéré).

La correction à l'énergie à l'ordre 1:

$$\epsilon_1 = \langle \varphi_{100}^1; \varphi_{100}^2 | W | \varphi_{100}^1; \varphi_{100}^2 \rangle ,$$

ce qui implique

$$\langle \varphi_{100}^1 | x_1 | \varphi_{100}^1 \rangle \langle \varphi_{100}^2 | x_2 | \varphi_{100}^2 \rangle + \dots$$

Mais: rappel: $|\varphi_{100}\rangle \sim e^{-r}$, où $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Donc, $|\varphi_{100}\rangle$ est une fonction paire de $x \implies \langle \varphi_{100}^1 | x_1 | \varphi_{100}^1 \rangle$ est l'intégrale d'une fonction impaire sur un intervalle pair \implies la correction $\epsilon_1 = 0$.

⇒ il faut pousser à l'ordre 2:

$$\epsilon_2 = \sum_{nlm, n'l'm'l'} \frac{|\langle \varphi_{nlm}^1; \varphi_{n'l'm'}^2 | W | \varphi_{100}^1; \varphi_{100}^2 \rangle|^2}{E_0 - E_{n,n'}} ,$$

où E_0 et $E_{n,n'}$ sont les énergies de l'état fondamental et $\varphi_{nlm}^1; \varphi_{n'l'm'}^2$, respectivement: $E_{n,n'} = E_n + E_{n'}$.

$E_0 < E_{n,n'} \implies \epsilon_2$ est négatif. On écrit $\epsilon_2 = -C/R^6$. On conclut que les forces de Van der Waal sont attractives et varient comment $1/R^6$.

Quel est C ? Limite supérieure: $E_{n,n'} > E_{n^*}$; E_{n^*} est l'énergie de l'état excité le plus bas pour lequel $\langle \varphi_{nlm}^1; \varphi_{n'l'm'}^2 | W | \varphi_{nlm}^1; \varphi_{n'l'm'}^2 \rangle \neq 0$:

$$\frac{1}{E_0 - E_{n,n'}} \geq \frac{1}{E_0 - E_{n^*}} ,$$

$$\implies -\epsilon_2 \leq \frac{1}{E_{n^*} - E_0} \sum_{nlm, n'l'm'l'} |\langle \varphi_{nlm}^1; \varphi_{n'l'm'}^2 | W | \varphi_{100}^1; \varphi_{100}^2 \rangle|^2 .$$

On a

$$\sum_{n,n' \neq 0} |\langle n, n' | W | 0 \rangle|^2 = \sum_{\text{tout } n, n'} \langle 0 | W | n, n' \rangle \langle n, n' | W | 0 \rangle - |\langle 0 | W | 0 \rangle|^2 .$$

Mais $\sum_{\text{tout } n, n'} |n, n'\rangle \langle n, n'| = 1$ et $\langle 0 | W | 0 \rangle = 0$. Donc

$$-\epsilon_2 \leq \frac{\langle 0 | W^2 | 0 \rangle}{E_{n^*} - E_0} .$$

L'état n^* est celui pour lequel les deux atomes sont dans $n = 2$:

$$E_0 = -2(e^2/2a_0^2), E_{n^*} = -2(e^2/8a_0^2) \implies$$

$$E_{n^*} - E_0 = \frac{3 e^2}{4 a_0} .$$

$$W^2 = \frac{e^4}{R^6} [x_1^2 x_2^2 + y_1^2 y_2^2 + 2x_1 x_2 y_1 y_2 + z_1^2 z_2^2 + \dots] .$$

$\langle 0 | W^2 | 0 \rangle = 0$ pour tous les termes croisés \implies il faut calculer

$$\langle 0 | (x_1^2 x_2^2 + y_1^2 y_2^2 + z_1^2 z_2^2) | 0 \rangle .$$

Nous avons les fonction d'ondes \implies on peut calculer. On trouve

$$\langle 0 | W^2 | 0 \rangle = \frac{6e^4 a_0^4}{R^6} .$$

Alors

$$-\epsilon_2 \leq \frac{8e^2 a_0^5}{R^6} \implies C \leq 8e^2 a_0^5 .$$

Est-ce qu'on peut améliorer la limite sur C ? Oui. Méthode des variations. Mais on cherche une limite sur le coefficient de $1/R^6$. Cependant, $H = H_0 + W$, où $H_0 \sim 1$, $W \sim 1/R^3$. Donc, on demande que notre fonction d'essai comprenne un terme $W \implies \langle \psi | H | \psi \rangle$ contiendra un terme en $W^2 \sim 1/R^6$:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{100}(\vec{r}_1) \psi_{100}(\vec{r}_2) [1 + AW] ,$$

où A est le paramètre (réel) à varier.

On a

$$\begin{aligned}
 E_0 + \epsilon_2 &\leq \frac{\int \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_0^* (1 + AW)(H_0 + W)(1 + AW)\psi_0}{\int \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_0^* (1 + AW)^2 \psi_0} \\
 &= \frac{\int \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_0 [H_0 + AH_0W + AW H_0 + W + \dots] \psi_0}{\int \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_0 (1 + 2AW + A^2W^2)\psi_0} \\
 &= \frac{E_0 + 2A \langle 0 | W^2 | 0 \rangle + A^2 \langle 0 | W H_0 W | 0 \rangle}{1 + A^2 \langle 0 | W^2 | 0 \rangle},
 \end{aligned}$$

où $\psi_0 \equiv \psi_{100}^*(\vec{r}_1)\psi_{100}^*(\vec{r}_2)$ et nous avons utilisé $\langle 0 | W | 0 \rangle = 0$ dans la dernière ligne.

On peut montrer que $\langle 0 | W H_0 W | 0 \rangle = 0$. Ensuite

$$\frac{E_0 + 2A \langle 0 | W^2 | 0 \rangle}{1 + A^2 \langle 0 | W^2 | 0 \rangle} \simeq E_0 + (2A - A^2 E_0) \langle 0 | W^2 | 0 \rangle.$$

Cette expression a un minimum à $A = 1/E_0$ ($E_0 = -e^2/a_0$).

Alors on trouve

$$E_0 + \epsilon_2 \leq E_0 + \frac{1}{E_0} \langle 0 | W^2 | 0 \rangle \implies \epsilon_2 \leq \left(\frac{-a_0}{e^2} \right) \frac{6e^4 a_0^4}{R^6} .$$

Donc,

$$8e^2 a_0^5 \geq C \geq 6e^2 a_0^5 .$$

Des calculs détaillés montrent que $C \simeq 6.50 e^2 a_0^5$.

Exemple (4): atome d'hydrogène (Messiah, pg. 767). On cherche une approximation à l'énergie de l'état fondamental. On a

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - \frac{e^2}{r} .$$

On choisit comme fonction d'essai

$$\Phi = \frac{1}{a_0^{3/2}} \frac{u(\rho)}{\rho} Y_{lm}(\theta, \phi) ,$$

où $\rho \equiv r/a_0$ et $a_0 \equiv \hbar^2/m e^2$. Pour l'état fondamental on a $l = m = 0 \implies Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$.

On connaît la solution exacte: $u(\rho) = \rho e^{-\rho}$ donne une énergie

$$E_0 = -E_H, \quad E_H = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 mc^2.$$

Quand même, on essayera différentes fonctions d'essai.

Nous avons $E_0 < \langle H \rangle$, où $\langle H \rangle = \langle \Phi | H | \Phi \rangle / \langle \Phi | \Phi \rangle$. Il faut calculer ces deux quantités.

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = \int d^3r \frac{1}{a_0^3} \frac{u^2(\rho)}{\rho^2} \frac{1}{4\pi} = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{a_0^3} \int d\Omega r^2 dr \frac{u^2(\rho)}{\rho^2} = \int_0^\infty d\rho u^2(\rho).$$

Pour $\langle \Phi | H | \Phi \rangle$:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2}{a_0 r} \right).$$

$$\begin{aligned}
\langle \Phi | H | \Phi \rangle &= \frac{1}{a_0^3} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \int_0^\infty r^2 dr \frac{u(\rho)}{\rho} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2}{a_0 r} \right) \frac{u(\rho)}{\rho} \\
&= \frac{1}{a_0^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \int_0^\infty \rho^2 d\rho \frac{u(\rho)}{\rho} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{2}{\rho} \right) \frac{u(\rho)}{\rho} \\
&= \frac{1}{a_0^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \int_0^\infty d\rho u(\rho) \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \right) u(\rho) .
\end{aligned}$$

Alors

$$E_0 \leq \frac{-E_H \int_0^\infty d\rho u(\rho) \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \right) u(\rho)}{\int_0^\infty d\rho u^2(\rho)} .$$

On utilise 3 fonctions d'essai:

$$(i) \ u_1 = \rho e^{-b\rho} \ , \quad (ii) \ u_3 = \rho^2 e^{-b\rho} \ , \quad (iii) \ u_2 = \frac{\rho}{b^2 + \rho^2} .$$

Dans tous les cas, b est un paramètre à varier.

Remarque: une intégrale utile est

$$\int_0^\infty dx x^n e^{-\alpha x} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} .$$

Cas (i): dénominateur:

$$\int_0^{\infty} d\rho \rho^2 e^{-2b\rho} = \frac{1}{4b^3} .$$

numérateur:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} d\rho \rho e^{-b\rho} (-2be^{-b\rho} + b^2 \rho e^{-b\rho} + 2e^{-b\rho}) \\ = \int_0^{\infty} d\rho [(2 - 2b)\rho e^{-2b\rho} + b^2 \rho^2 e^{-2b\rho}] \\ = (2 - 2b) \frac{1}{(2b)^2} + b^2 \frac{2}{(2b)^3} = \frac{1}{2b^2} - \frac{1}{4b} . \end{aligned}$$

Donc

$$\langle H \rangle = -E_H(2b - b^2) .$$

Le minimum est à $b = 1 \implies$

$$E_0 \leq -E_H .$$

En fait, $E_0 = -E_H$. Ce n'est pas surprenant car $\Phi = \rho e^{-\rho}$ est la solution exacte.

Cas (ii): dénominateur:

$$\int_0^{\infty} d\rho \rho^4 e^{-2b\rho} = \frac{3}{4} \frac{1}{b^5} .$$

numérateur:

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} d\rho \rho^2 e^{-b\rho} (2e^{-b\rho} - 4b\rho e^{-b\rho} + b^2 \rho^2 e^{-b\rho} + 2\rho e^{-b\rho}) \\ &= \int_0^{\infty} d\rho [b^2 \rho^4 e^{-2b\rho} + (2 - 4b)\rho^3 e^{-2b\rho} + 2\rho^2 e^{-2b\rho}] \\ &= b^2 \frac{4!}{(2b)^5} + (2 - 4b) \frac{3!}{(2b)^4} + 2 \frac{2!}{(2b)^3} = \frac{3}{4} \frac{1}{b^4} - \frac{1}{4} \frac{1}{b^3} . \end{aligned}$$

Donc

$$\langle H \rangle = -E_H \left(b - \frac{1}{3} b^2 \right) .$$

Le minimum est à $b = \frac{3}{2} \implies$

$$E_0 \leq -\frac{3}{4} E_H = -0.75 E_H .$$

Cas (iii): on peut effectuer toutes les intégrales. E.g.

$$\int_0^{\infty} d\rho \frac{\rho^2}{(b^2 + \rho^2)^2} = \frac{\pi}{4b} .$$

On trouve

$$\langle H \rangle = -E_H \left[\frac{8b - \pi}{2\pi b^2} \right] .$$

Le minimum est à $b = \frac{1}{4}\pi \implies$

$$E_0 \leq -\frac{8}{\pi^2} E_H = -0.81 E_H .$$

Resumé: (i) $u_1 = \rho e^{-b\rho} : E_0 \leq -E_H$;

(ii) $u_3 = \rho^2 e^{-b\rho} : E_0 \leq -0.75 E_H$;

(iii) $u_2 = \frac{\rho}{b^2 + \rho^2} : E_0 \leq -0.81 E_H$.

Donc: la fonction d'essai (ii) est similaire à la vrai solution (i). Mais la fonction d'essai (iii) donne une meilleure approximation à l'énergie de l'état fondamental. Pourquoi?

Réponse: la fonction d'essai (*ii*) a le même comportement que la vraie solution (*i*) lorsque $\rho \rightarrow \infty$. Cependant, la fonction d'essai (*iii*) a le même comportement que la vraie solution lorsque $\rho \rightarrow 0$ (les deux $\sim \rho$).

Le potentiel est attractif \implies le comportement près de $x = 0$ est plus important que le comportement près de $x = \infty$. Alors, la fonction d'essai (*iii*) donne une meilleure approximation à l'énergie de l'état fondamental.

Le Vrai Atome d'Hydrogène

Nous avons résolu $H\psi = E\psi$ en coordonnées sphériques, avec

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2\mu r^2} \vec{L}^2 - \frac{e^2}{r} .$$

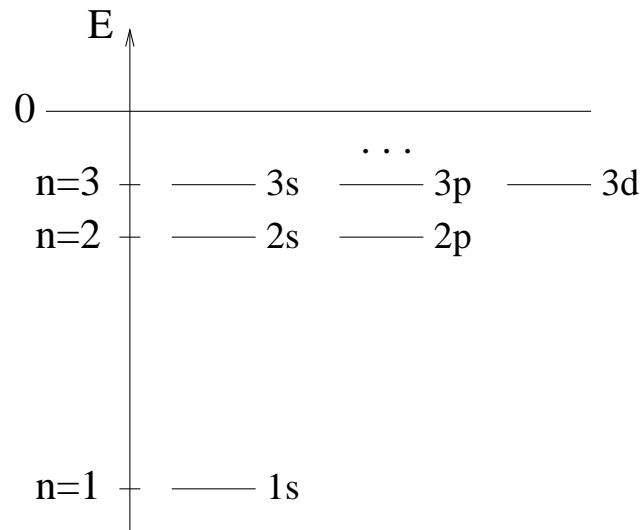
La solution est $\psi(\vec{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$, où $R(r)$ est une solution de l'équation

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] R(r) = E R(r) .$$

On trouve que $R(r)$ dépend de n et l .

Les énergies dépendent de n :

$$E_n = -\frac{1}{n^2} E_I \quad , \quad E_I = \frac{1}{2} \alpha^2 \mu c^2 \quad , \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} .$$



Pour chaque n , on a $l \leq n - 1$; pour chaque l il y a $2l + 1$ valeurs de m .

Rappel: μ : la masse réduite, représente le système centre de masse:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{M_p} \implies \mu = \frac{m_e M_p}{m_e + M_p} \simeq m_e \left[1 - \frac{m_e}{M_p} \right].$$

Donc $\mu \simeq m_e$; la correction est $m_e/M_p \simeq 1/1800$.

Il y a plusieurs corrections à cette solution. On tient compte avec la théorie des perturbations.

Structure fine:

(i) Correction relativiste: dans le centre de masse,

$$\begin{aligned}\frac{\vec{p}^2}{2\mu} &= \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + \frac{\vec{p}^2}{2M_p} \rightarrow \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m_e^2 c^4} + \frac{\vec{p}^2}{2M_p} \\ &\simeq m_e c^2 (\text{pas important}) + \frac{\vec{p}^2}{2m_e} - \frac{1}{8} \frac{\vec{p}^4}{m_e^3 c^2} + \frac{\vec{p}^2}{2M_p} \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{1}{8} \frac{\vec{p}^4}{m_e^3 c^2} .\end{aligned}$$

Donc la première correction est $-\frac{1}{8} \frac{\vec{p}^4}{m_e^3 c^2}$. Ordre de grandeur:

$$\frac{\frac{1}{8} \frac{\vec{p}^4}{m_e^3 c^2}}{\frac{\vec{p}^2}{2m_e}} = \frac{\vec{p}^2}{m_e^2 c^2} = \frac{1}{4} \left(\frac{v}{c}\right)^2 \sim \alpha^2 = \left(\frac{1}{137}\right)^2 \sim 10^{-4} - 10^{-5} .$$

(ii) Couplage spin-orbite. Dans le référentiel de l' e^- , le proton est en mouvement $\implies \exists$ courant $\implies \exists$ champ magnétique. Le spin de l' e^- interagit avec ce champ.

Énergie d'interaction: $W = -\vec{M}_S \cdot \vec{B}'$, où \vec{M}_S est le moment magnétique de l' e^- et \vec{B}' est le champ magnétique.

$$\vec{M}_S = -\frac{e}{mc} \vec{S} \implies W = \frac{e}{mc} \vec{S} \cdot \vec{B}' = \frac{e}{m_e c^2} \vec{S} \cdot (\vec{v} \times \vec{E}).$$

\vec{E} est le champ électrique du proton et est égal à $-\text{gradient du potentiel Coulombien}$:

$$\begin{aligned} W &= -\frac{e}{m_e c^2} \vec{S} \cdot (\vec{p} \times \vec{\nabla} \phi) \\ &= -\frac{e}{m_e c^2} \vec{S} \cdot (\vec{p} \times \vec{r}) \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \\ &= \frac{1}{m_e^2 c^2} \vec{S} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) \frac{1}{r} \frac{d(e\phi)}{dr} \\ &= \frac{e^2}{m_e^2 c^2} \frac{1}{R^3} \vec{S} \cdot \vec{L}. \end{aligned}$$

En fait, à cause des effets relativistes, il y a un autre facteur de 2 (la précession de Thomas):

$$W_{so} = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{R^3} \vec{S} \cdot \vec{L} .$$

Ceci est le couplage spin-orbite.

Ordre de grandeur:

$$\begin{aligned} L, S \sim \hbar &\implies W_{so} \sim \frac{e^2}{m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{R^3} . \\ \implies \frac{W_{so}}{H_0} &\sim \frac{\frac{e^2}{m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{R^3}}{\frac{e^2}{R}} = \frac{\hbar^2}{m_e^2 c^2 R^2} . \end{aligned}$$

Mais $R \sim a_0 = \hbar^2 / m e^2 \implies$

$$\frac{W_{so}}{H_0} = \frac{e^4}{\hbar^2 c^2} = \alpha^2 = \left(\frac{1}{137} \right)^2$$

Même ordre de grandeur que la correction relativiste.

(iii) Terme de Darwin. Dans l'approximation non-relativiste, l' e^- ne ressent pas un champ local. En fait, il est étendu à l'origine. Cet effet prend la forme

$$W_D = \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \vec{\nabla}^2 V(R) = -e^2 \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \vec{\nabla}^2 \left(\frac{1}{R} \right) .$$

Mais

$$\vec{\nabla}^2 \left(\frac{1}{R} \right) = -4\pi\delta(R) .$$

Donc, dans un état atomique, il y a une correction

$$W_D = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} |\psi(0)|^2 ,$$

où $\psi(0)$ est la fonction d'onde à l'origine. Alors, le terme de Darwin n'affecte que les électrons de type s .

L'ordre de grandeur de cette correction est encore $\sim \alpha^2$.

Structure hyperfine: le proton a un spin $\vec{I} \implies$ moment magnétique $\vec{M}_I = \mu_n \vec{I} / \hbar$, avec $\mu_n = g_p \hbar / 2M_p$. Alors,

$$\vec{M}_I = + \frac{g_p \vec{I}}{2M_p} .$$

Pour le proton, $g_p \simeq 5.6$.

Comme il y a un facteur M_p dans le dénominateur, les interactions impliquant \vec{M}_I sont plus faibles que celles impliquant \vec{M}_S .

Il y a 3 termes impliquant \vec{M}_I :

$$W_{hf} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left\{ \frac{q}{m_e R^3} \vec{L} \cdot \vec{M}_I + \frac{1}{R^3} \left[3(\vec{M}_S \cdot \hat{n})(\vec{M}_I \cdot \hat{n}) - \vec{M}_S \cdot \vec{M}_I \right] + \frac{8\pi}{3} \vec{M}_S \cdot \vec{M}_I \delta(\vec{R}) \right\} .$$

1^{er} terme: interaction entre \vec{M}_I et le champ magnétique créé par le courant dû au mouvement de l' e^- .

2^{me} terme: interaction entre deux moments dipolaires: interaction entre un moment dipolaire et le champ magnétique créé par l'autre moment dipolaire.

3^{me} terme: le proton n'est pas ponctuel \implies le champ magnétique à l'intérieur du proton \neq le champ magnétique à l'extérieur. Le troisième terme décrit l'interaction entre le moment magnétique de l' e^- et le champ interne.

Ordre de grandeur: tous les termes sont ~ 1800 fois plus petits que W_{SO} (à cause du facteur m_e/M_p).

On peut calculer les effets des corrections. On va considérer le niveau $n = 2$ d'hydrogène, qui comprend $2s$ ($n = 2, l = 0$) et $2p$ ($n = 2, l = 1$). L'énergie de ce niveau est $-E_I/4$.

Dégénérescence: $2s$: 1 état, $2p$: 3 états. Mais l'électron peut avoir $S_z = \pm \frac{1}{2}$ et le proton $I_z = \pm \frac{1}{2}$. Donc, en fait, le niveau $2s$ a 4 états ($n = 2, l = 0, m_L = 0, m_S = \pm \frac{1}{2}, m_I = \pm \frac{1}{2}$) et le niveau $2p$ 12 états ($n = 2, l = 1, m_L = \{-1, 0, 1\}, m_S = \pm \frac{1}{2}, m_I = \pm \frac{1}{2}$). Alors, pour le niveau $n = 2$, il y a 16 états dégénérés! \implies si on veut utiliser la théorie des perturbations, il faut diagonaliser une matrice 16×16 !?

Un instant. Nous savons qu'il y a deux types de corrections: structure fine et hyperfine, avec $W_{hf} \ll W_f$. Donc, d'abord on néglige W_{hf} :

$$W_f = -\frac{\vec{p}^4}{8m_e^3c^2} + \frac{e^2}{2m_e^2c^2} \frac{1}{R^3} \vec{L} \cdot \vec{S} + \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2c^2} \delta(R) .$$

W_f n'affecte pas les variables de spin du proton \implies on peut ignorer m_I . La matrice devient 8×8 .

Ensuite, on note que $[\vec{L}^2, \vec{L}] = [\vec{L}^2, \vec{S}] = [\vec{L}^2, \vec{R}] = [\vec{L}^2, \vec{P}^2] = 0 \implies$
 $[W_f, \vec{L}^2] = 0$.

Or, les états $2s$ et $2p$ sont des états propres de \vec{L}^2 . Mais W_f ne relie pas les états $2s$ et $2p$. La matrice 8×8 devient deux matrices, de dimension 2×2 et 6×6 .

Également: W_f est pair sous la parité, P . Mais les états $2s$ et $2p$ ont la parité opposée. Donc W_f n'a pas d'éléments entre $2s$ et $2p$.

La sous-matrice 2×2 (état $2s$) dépend des degrés de liberté du spin.

Mais $-\frac{\vec{p}^4}{8m_e^3c^2}$ et $\frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} \delta(R)$ ne dépendent pas de $\vec{S} \implies$ les éléments de matrice de ces opérateurs sont proportionnels à l'identité:

$$\begin{pmatrix} X & 0 \\ 0 & X \end{pmatrix}.$$

On peut calculer les corrections. Comme on connaît les états, on trouve

$$\langle n = 2, l = 0, m_L = 0 | -\frac{\vec{p}^4}{8m_e^3 c^2} | n = 2, l = 0, m_L = 0 \rangle = -\frac{13}{128} m_e c^2 \alpha^4 ,$$

$$\langle n = 2, l = 0, m_L = 0 | \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} \delta(R) | n = 2, l = 0, m_L = 0 \rangle = +\frac{1}{16} m_e c^2 \alpha^4 .$$

On considère le troisième terme, $\frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{R^3} \vec{L} \cdot \vec{S}$. On remarque que

$\vec{L} \cdot \vec{S} = L_z S_z + L_x S_x + L_y S_y$. Mais l'état $2s$ a $l = 0 \implies$ c'est décrit par le ket $|l m_L\rangle = |0 0\rangle$. Comme $L_z |0 0\rangle = L_{\pm} |0 0\rangle = 0$, ce terme n'a pas d'effet.

Donc l'effet de W_f est de déplacer le niveau $2s$ entier par

$$-\frac{5}{128} m_e c^2 \alpha^4 .$$

On passe à la sous-matrice 6×6 (état $2p$). Comme $-\frac{\vec{p}^4}{8m_e^3c^2}$ et $\frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} \delta(R)$ commutent avec \vec{L} et \vec{S} , leurs éléments de matrice sont encore proportionnels à l'identité, avec

$$\langle n = 2, l = 1 | -\frac{\vec{p}^4}{8m_e^3c^2} | n = 2, l = 1 \rangle = -\frac{7}{384} m_e c^2 \alpha^4 ,$$

$$\langle n = 2, l = 1 | \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} \delta(R) | n = 2, l = 1 \rangle = 0 \quad (\text{état } p) .$$

Pour le couplage spin-orbite, la partie $\vec{L} \cdot \vec{S}$ dépend de L_z , etc. On écrit

$$W_{so} = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{R^3} \vec{L} \cdot \vec{S} = \xi(R) \vec{L} \cdot \vec{S} .$$

Ensuite,

$$\langle \dots | W_{so} | \dots \rangle = \langle \text{radial} | \xi(R) | \text{radial} \rangle \langle \text{angulaire} | \vec{L} \cdot \vec{S} | \text{angulaire} \rangle .$$

On peut calculer la partie radiale. On trouve

$$\frac{1}{48\hbar^2} m_e c^2 \alpha^4 .$$

On considère maintenant la partie angulaire. Je vous rappelle le problème à résoudre pour l'addition des moments cinétiques (p. 23): "étant donné des bases pour \vec{J}_1 et \vec{J}_2 , qui ne commutent pas avec H , quelle est la base pour $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$, où $[\vec{J}, H] = 0$?" Si, par exemple, H contient le terme $\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2$, \vec{J}_1 et \vec{J}_2 ne commuteront pas avec H et les états propres de H seront les états propres de \vec{J}^2 et de J_z .

Ici, H contient $\vec{L} \cdot \vec{S}$. Donc, les états propres de H seront les états propres de \vec{J}^2 et J_z , où $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. On a $l = 1, s = 1/2 \implies j = 1/2, 3/2$. Nous savons comment calculer les états dans cette base.

De plus, dans cette base, $\vec{L} \cdot \vec{S}$ est diagonal: $\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) \implies$ les valeurs propres sont

$$\frac{1}{2}\hbar^2 \left[J(J+1) - 2 - \frac{3}{4} \right].$$

Les valeurs propres de $\vec{L} \cdot \vec{S}$ dépendent de J , mais pas de m_J , donc la dégénérescence n'est que partiellement levée. Le nombre d'états n'a pas changé: dans la base $\{l, s\}$, on avait 6 états; dans la base $\{j\}$, on a 6 états: 4 états avec $3/2$, 2 états avec $j = 1/2$.

Vous ne me croyez pas? Bon, on va diagonaliser $\langle 2p' | \vec{L} \cdot \vec{S} | 2p \rangle$, qui est une matrice 6×6 . L'opérateur $\vec{L} \cdot \vec{S} = L_z S_z + \frac{1}{2}(L_+ S_- + L_- S_+)$. On a $l = 1, s = 1/2$, donc on écrira les états comme $|m_l\rangle |m_s\rangle$. Il y a 6 états: $\{|1\rangle |+\rangle, |0\rangle |+\rangle, |-1\rangle |+\rangle, |1\rangle |-\rangle, |0\rangle |-\rangle, |-1\rangle |-\rangle\}$.

Dans cette base (dans cet ordre), la matrice $\langle 2p' | \vec{L} \cdot \vec{S} | 2p \rangle$ est:

$$\begin{pmatrix} 1/2 & & & & & \\ & 0 & & 1/\sqrt{2} & & \\ & & -1/2 & & 1/\sqrt{2} & \\ & 1/\sqrt{2} & & -1/2 & & \\ & & 1/\sqrt{2} & & 0 & \\ & & & & & 1/2 \end{pmatrix} \hbar^2$$

Il faut diagonaliser cette matrice. Les états $|1\rangle |+\rangle$ et $|-1\rangle |-\rangle$ sont déjà des états propres, avec la même valeur propre $\frac{1}{2}\hbar^2$.

Donc, on trouve les valeurs propres et les états propres de la sous-matrice 4×4 :

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & -1/2 - \lambda & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 0 & -1/2 - \lambda & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 & -\lambda \end{pmatrix} = 0.$$

Alors,

$$-\lambda \left[\left(-\frac{1}{2} - \lambda \right) \left(-\frac{1}{2} - \lambda \right) (-\lambda) + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2} + \lambda \right) \right] \\ + \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{1}{2} + \lambda \right) (-\lambda) \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2} \right] = 0$$

$$\Rightarrow \left[\lambda \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} \right]^2 = 0$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{1}{2} \left[-\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + 2} \right] \Rightarrow \lambda = -1 \text{ où } \frac{1}{2}.$$

Valeurs propres: $\frac{1}{2}\hbar^2$ (4 fois), $-\hbar^2$ (2 fois).

États propres (première colonne: $\frac{1}{2}\hbar^2$, deuxième colonne: $-\hbar^2$):

$$\begin{array}{cc}
 |1\rangle |+\rangle & \\
 \sqrt{\frac{1}{3}} |1\rangle |-\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |0\rangle |+\rangle & \sqrt{\frac{2}{3}} |1\rangle |-\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |0\rangle |+\rangle \\
 \sqrt{\frac{2}{3}} |0\rangle |-\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |-1\rangle |+\rangle & \sqrt{\frac{1}{3}} |0\rangle |-\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |-1\rangle |+\rangle \\
 |-1\rangle |-\rangle &
 \end{array}$$

Mêmes états propres que pour l'addition des moments cinétiques 1 et 1/2.

En fait, si on avait cru qu'il s'agissait simplement de l'addition des moments cinétiques 1 et 1/2, on se serait rendu compte du fait suivant: dans la base des états propres de $j = 1/2, 3/2$ l'opérateur $\vec{L} \cdot \vec{S}$ est diagonal: $\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) \implies$ les valeurs propres sont

$$\begin{aligned} \vec{L} \cdot \vec{S} &= \frac{1}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 \left[\begin{matrix} 3/4 \\ 15/4 \end{matrix} \right] - 2 - \frac{3}{4} \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 \begin{matrix} -2 \\ 1 \end{matrix} \end{aligned}$$

Mêmes valeurs propres qu'on a trouvé plus tôt.

Nouvelle notation: pour $2s, j = 1/2$; pour $2p, j = 1/2, 3/2 \implies \exists 3$ niveaux:

$$2s_{1/2} , \quad 2p_{1/2} , \quad 2p_{3/2} .$$

Niveau $2s_{1/2}$ baissé par

$$-\frac{5}{128}m_e c^2 \alpha^4 .$$

Niveau $2p_{1/2}$ baissé par

$$\frac{1}{48\hbar^2}m_e c^2 \alpha^4 \cdot \frac{1}{2}\hbar^2(-2) - \frac{7}{384}m_e c^2 \alpha^4 = -\frac{5}{128}m_e c^2 \alpha^4 .$$

Niveau $2p_{3/2}$ baissé par

$$\frac{1}{48\hbar^2}m_e c^2 \alpha^4 \cdot \frac{1}{2}\hbar^2(1) - \frac{7}{384}m_e c^2 \alpha^4 = -\frac{1}{128}m_e c^2 \alpha^4 .$$

Il s'avère que les corrections donnent la même énergie pour $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$. Mais le couplage spin-orbite scinde en deux les niveaux $2p_{1/2}$ et $2p_{3/2}$. Maintenant la transition $2p \rightarrow 1s$ comprend deux transitions:

$$2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2} \quad , \quad 2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2} \quad ,$$

avec une différence d'énergie $= \frac{1}{32}m_e c^2 \alpha^4$. Expérimentalement, ceci a été observé. C'est la *structure fine* de l'atome d'hydrogène.

Pour la structure hyperfine, on considère le niveau $1s$. Pour ce niveau, la structure fine donne

$$\begin{aligned}\langle 1s | W_{SO} | 1s \rangle &= 0, \\ \langle 1s | -\frac{\vec{p}^4}{8m_e^3 c^2} | 1s \rangle &= -\frac{5}{8} m_e c^2 \alpha^4, \\ \langle 1s | \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} \delta(R) | 1s \rangle &= +\frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^4.\end{aligned}$$

Donc, l'effet net est de baisser ce niveau par $-\frac{1}{8} m_e c^2 \alpha^4$.

L'effet de W_{hf} : 1^{er} terme: $W_{hf} \sim \vec{L} \cdot \vec{M}_I$. Mais $\langle 1s | \vec{L} \cdot \vec{M}_I | 1s \rangle = 0$.

2^{me} terme: comme un tenseur de rang 2 \implies proportionnel à Y_{2m} .

Donc l'élément de matrice $\sim \int Y_{00} Y_{2m} Y_{00}$, ce qui donne zéro!

3^{me} terme:

$$-\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{8\pi}{3} \vec{M}_S \cdot \vec{M}_I \delta(\vec{R}) = -\frac{2\mu_0}{3} \vec{M}_S \cdot \vec{M}_I \delta(\vec{R}) \equiv \xi'(r) \vec{I} \cdot \vec{S}.$$

On peut calculer l'intégrale radiale, on obtient \mathcal{A} .

La partie angulaire: il faut calculer $\langle 1s | \vec{I} \cdot \vec{S} | 1s \rangle$. On connaît déjà la réponse, mais calculons explicitement. Il y a 4 états: $|I I_z\rangle |S S_z\rangle =$

$$\left\{ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle \right\}.$$

On a $\vec{I} \cdot \vec{S} = I_z S_z + \frac{1}{2}(I_+ S_- + I_- S_+)$. Pour les éléments de matrice, il faut calculer l'action de cet opérateur sur chacun des états. On obtient la matrice

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\hbar^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4}\hbar^2 & \frac{1}{2}\hbar^2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\hbar^2 & -\frac{1}{4}\hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}\hbar^2 \end{pmatrix}$$

Il faut diagonaliser cette matrice. Déterminant

$$\left(\frac{1}{4}\hbar^2 - \lambda \right)^2 \left[\left(\frac{1}{4}\hbar^2 - \lambda \right)^2 - \frac{1}{4}\hbar^4 \right] = 0 \implies \lambda = \begin{cases} \frac{1}{4}\hbar^2 & 3 \text{ fois} \\ -\frac{3}{4}\hbar^2 & 1 \text{ fois} \end{cases}$$

Calculons les vecteurs propres. Si $\lambda = -\frac{3}{4}\hbar^2$, $\mathcal{M} - \lambda I$ devient

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \hbar^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\hbar^2 & \frac{1}{2}\hbar^2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\hbar^2 & \frac{1}{2}\hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hbar^2 \end{pmatrix} \implies V = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Si $\lambda = \frac{1}{4}\hbar^2$, $\mathcal{M} - \lambda I$ devient

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\hbar^2 & \frac{1}{2}\hbar^2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\hbar^2 & -\frac{1}{2}\hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \implies V = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

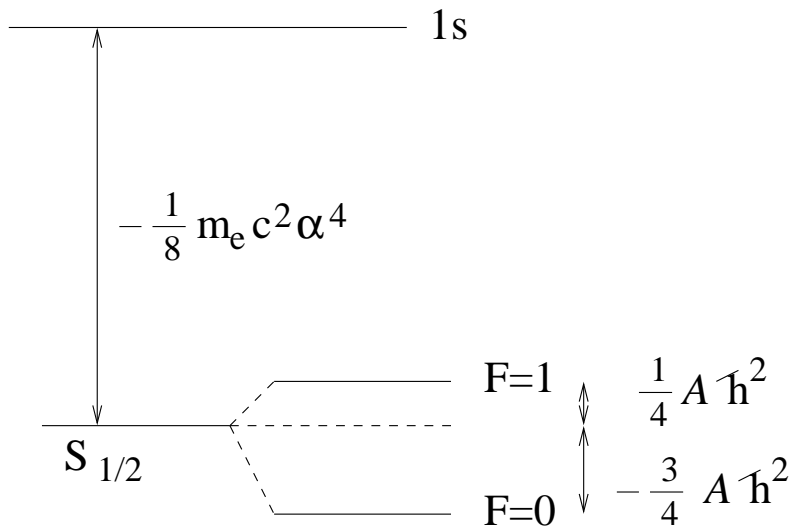
Tous ces états correspondent aux états qu'on aurait pu trouver avec les coefficients de Clebsch-Gordan.

La diagonalisation de la matrice \implies un changement de base.
 Effectivement, on utilise la base des états propres de \vec{F}^2 et F_z , où $\vec{F} = \vec{S} + \vec{I}$. On a $S = 1/2$, $I = 1/2 \implies F = 0, 1$.

On a $\vec{I} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{F}^2 - \vec{S}^2 - \vec{I}^2) \implies$ les valeurs propres sont

$$\frac{1}{2}\hbar^2 \left[F(F+1) - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right] = \begin{cases} -\frac{3}{4}\hbar^2 & \text{pour } F = 0 \\ +\frac{1}{4}\hbar^2 & \text{pour } F = 1 \end{cases}$$

La dégénérescence de degré 4 est partiellement levée par l'interaction hyperfine. On obtient 3 états avec $F = 1$, 1 état avec $F = 0$.



W_f baisse le niveau $1s_{1/2}$ par $-\frac{1}{8}m_e c^2 \alpha^4$. W_{hf} le scinde en deux niveaux hyperfines. La transition $F = 1 \leftrightarrow F = 0$ a été mesurée expérimentalement. Elle est en accord avec la mécanique quantique.

Effet Zeeman

On place l'atome d'hydrogène dans un champ magnétique $\vec{B}_0 = B_0 \hat{z}$. Le champ interagit avec tous les moments magnétiques (orbital, spin de l' e^- , spin du proton):

$$\vec{M}_L = \frac{q}{2m_e} \vec{L} \quad , \quad \vec{M}_S = \frac{q}{m_e} \vec{S} \quad , \quad \vec{M}_I = -\frac{qg_p \vec{I}}{2M_p} .$$

L'Hamiltonien d'interaction est

$$W_Z = -\vec{B}_0 \cdot (\vec{M}_L + \vec{M}_S + \vec{M}_I) = \omega_0(L_z + 2S_z) + \omega_n I_z ,$$

où $\omega_0 = -qB_0/2m_e$ et $\omega_n = qg_p B_0/2M_p$. Remarque: $|\omega_n| \ll |\omega_0| \implies$ ignorer $\omega_n I_z$ (il est facile de l'inclure).

On considère l'effet sur l'état $1s$, qui n'a qu'une structure hyperfine. Il y a deux corrections, W_Z et W_{hf} . $W_Z \ll W_{hf}$ pour des champs faibles; $W_Z \gg W_{hf}$ pour des champs forts.

On a $W_{hf} = \mathcal{A}\vec{I} \cdot \vec{S}$ et nous avons calculé $\langle 1s | \mathcal{A}\vec{I} \cdot \vec{S} | 1s \rangle$. Il faut maintenant calculer $\langle 1s | \omega_0(L_z + 2S_z) | 1s \rangle$. Remarque: $\langle 1s | L_z | 1s \rangle = 0$.

Donc, il faut diagonaliser l'opérateur $\mathcal{A}\vec{I} \cdot \vec{S} + 2\omega_0 S_z$. Il y a trois possibilités:

(i) $\hbar\omega_0 \ll \mathcal{A}\hbar^2$: champ faible ,

(ii) $\hbar\omega_0 \gg \mathcal{A}\hbar^2$: champ fort ,

(iii) $\hbar\omega_0 \simeq \mathcal{A}\hbar^2$: champ intermédiaire .

On verra que, pour l'analyse de (iii), il est nécessaire de diagonaliser l'opérateur complètement. Il est utile de traiter $\mathcal{A}\vec{I} \cdot \vec{S}$ et $2\omega_0 S_z$ séparément afin de voir l'interpolation de (iii) entre les deux extrêmes.

(i) champ faible: $\hbar\omega_0 \ll \mathcal{A}\hbar^2$. La première perturbation est $\mathcal{A}\vec{I} \cdot \vec{S}$.

Nous avons vu que l'effet est de scinder l'état $1s_{1/2}$ en deux niveaux:

$F = 1, m_F = \{1, 0, -1\}$; énergie $\frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2$ et $F = 0, m_F = 0$; énergie $-\frac{3}{4}\mathcal{A}\hbar^2$.

L'opérateur $2\omega_0 S_z$ est une perturbation à ceci. Les états propres de $\mathcal{A}\vec{I} \cdot \vec{S}$ sont les $|F, m_F\rangle$; il faut calculer l'action de $2\omega_0 S_z$ sur ces états.

On exprime les $|F, m_F\rangle$ en fonction des états $|S, m_S\rangle |I, m_I\rangle$:

$$|1\ 1\rangle = \left| \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle, \quad |1\ -1\rangle = \left| \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} \right\rangle,$$

$$|1\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle \right],$$

$$|0\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle \right].$$

L'opérateur S_z agit sur le premier ket à droite. Donc

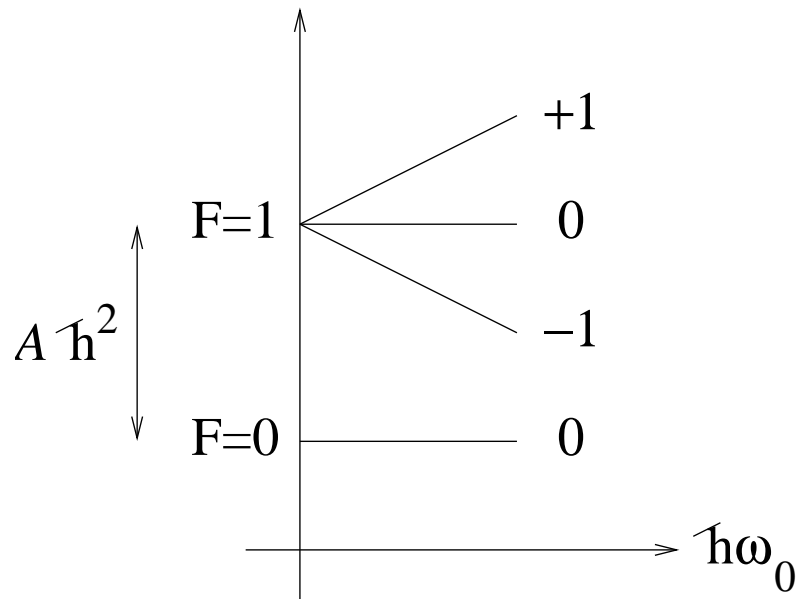
$$S_z |1\ 1\rangle = \frac{1}{2}\hbar |1\ 1\rangle, \quad S_z |1\ -1\rangle = -\frac{1}{2}\hbar |1\ -1\rangle,$$

$$S_z |1\ 0\rangle = \frac{1}{2}\hbar |0\ 0\rangle, \quad S_z |0\ 0\rangle = \frac{1}{2}\hbar |1\ 0\rangle.$$

Dans la base $|F, m_F\rangle$, la matrice qui représente la perturbation $2\omega_0 S_z$ est

$$\frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

Mais c'est seulement la matrice dans le sous-espace avec $F = 1$ qui est importante



L'effet:

$$|1 \ 1\rangle : E = \frac{1}{4} \mathcal{A} \hbar^2 + \hbar \omega_0 ,$$

$$|1 \ 0\rangle : E = \frac{1}{4} \mathcal{A} \hbar^2 ,$$

$$|1 \ -1\rangle : E = \frac{1}{4} \mathcal{A} \hbar^2 - \hbar \omega_0 ,$$

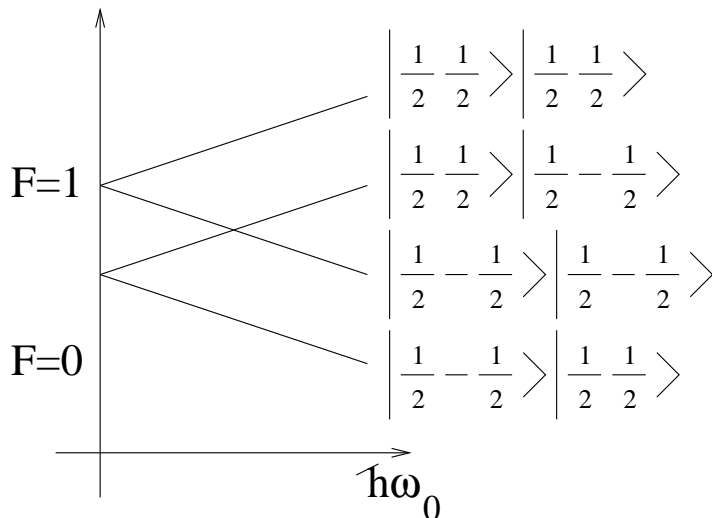
$$|0 \ 0\rangle : E = -\frac{3}{4} \mathcal{A} \hbar^2 .$$

(ii) champ fort: $\hbar\omega_0 \gg \mathcal{A}\hbar^2$. La première perturbation est $2\omega_0 S_z$. La meilleure base est $|S, m_S\rangle |I, m_I\rangle$:

$$2\omega_0 S_z |S, m_S\rangle |I, m_I\rangle = 2m_S \hbar\omega_0 |S, m_S\rangle |I, m_I\rangle ,$$

Donc: les 4 états dans le niveau $1s$ sont scindés en deux niveaux dégénérés: $|\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$ recoivent une correction d'énergie $+\hbar\omega_0$; $|\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$ recoivent une correction $-\hbar\omega_0$.

On considère l'effet de $\mathcal{A}\vec{I} \cdot \vec{S}$ dans chacun des niveaux $\{|\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle\}$ et $\{|\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle\}$. Nous avons $\vec{I} \cdot \vec{S} = I_z S_z + \frac{1}{2} (I_+ S_- + I_- S_+)$. $I_+ S_-$ et $I_- S_+$ n'ont pas d'éléments de matrices à l'intérieur de ces sous-espaces $\implies I_z S_z$ est la seule correction.



L'effet:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle & : E = \hbar\omega_0 \pm \frac{1}{4} \mathcal{A}\hbar^2 , \\ \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle & : E = -\hbar\omega_0 \mp \frac{1}{4} \mathcal{A}\hbar^2 . \end{aligned}$$

(iii) champ intermédiaire: $\hbar\omega_0 \simeq \mathcal{A}\hbar^2$. Il faut diagonaliser l'Hamiltonien au complet: $\mathcal{A}\vec{I} \cdot \vec{S} + 2\omega_0 S_z$. Nous avons déjà calculé les effets. Dans la base $\{|1 1\rangle, |1 -1\rangle, |1 0\rangle, |0 0\rangle\}$, La matrice est

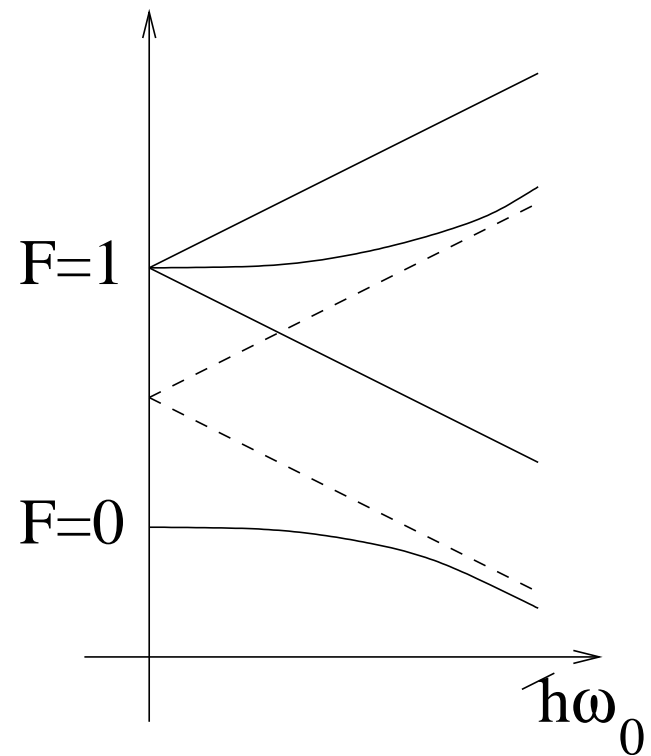
$$\begin{pmatrix} \frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 + \hbar\omega_0 & & & \\ & \frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 - \hbar\omega_0 & & \\ & & \frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 & \hbar\omega_0 \\ & & \hbar\omega_0 & -\frac{3}{4}\mathcal{A}\hbar^2 \end{pmatrix}.$$

Donc l'état $|1 1\rangle$ a $E = \frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 + \hbar\omega_0$, l'état $|1 -1\rangle$ $E = \frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 - \hbar\omega_0$. Pour les états $|1 0\rangle$ et $|0 0\rangle$, il faut diagonaliser la sous-matrice. On calcule les valeurs propres:

$$\det \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 - \lambda & \hbar\omega_0 \\ \hbar\omega_0 & -\frac{3}{4}\mathcal{A}\hbar^2 - \lambda \end{pmatrix} = 0$$

$$\implies \lambda = -\frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 \pm \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{2}\right)^2 + \hbar^2\omega_0^2}.$$

Donc on interpole entre les deux extrêmes:



Effet Stark

On met l'atome d'hydrogène dans un champ électrique $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\hat{z}$. Le champ électrique interagit avec le moment dipolaire électrique de l'atome, $q\vec{R}$:

$$W_S = -q\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{R} = -q\mathcal{E}z .$$

On calcul les effets sur les états. Pour simplicité, on néglige les structures fine et hyperfine. Comme H_0 et W_S n'impliquent pas les variables de spin, on ignore m_S et m_I .

Niveau $n = 1$: au premier ordre, l'effet est

$$-q\mathcal{E} \langle n = 1; l = 0; m_L = 0 | z | n = 1; l = 0; m_L = 0 \rangle .$$

Mais: l'état fondamental est pair \implies cet élément de matrice = 0.

Deuxième ordre:

$$\epsilon_2 = q^2 \mathcal{E}^2 \sum_{n \neq 1, l, m} \frac{|\langle 1 \ 0 \ 0 | z | n \ l \ m \rangle|^2}{E_1 - E_n} ,$$

avec $E_n = -E_I/n^2$. Comme \exists des états de parité négative, $\epsilon_2 \neq 0$. Puisque $E_1 - E_n < 0$, ϵ_2 baisse l'énergie de l'état fondamental.

Niveau $n = 2$: 4 états: $|2\ 0\ 0\rangle$, $|2\ 1\ m\rangle$ ($m = -1, 0, 1$). L'état $|2\ 0\ 0\rangle$ est pair, les états $|2\ 1\ m\rangle$ impairs. Il faut diagonaliser $-q\mathcal{E}z$ dans le sous-espace 4×4 . À cause de la parité, nous savons que $\langle 2\ 0\ 0|z|2\ 0\ 0\rangle = \langle 2\ 1\ m|z|2\ 1\ m\rangle = 0$. Mais l'élément de matrice $\langle 2\ 1\ m|z|2\ 0\ 0\rangle$ peut être non-nul.

Or, $z = r \cos \theta \sim Y_{10}$. Donc l'élément de matrice est proportionnel à

$$\int d\Omega Y_{1m} Y_{10} Y_{00} ,$$

ce qui est non-nul seulement si $m = 0$. Donc le seul élément de matrice non-nul est $\langle 2\ 1\ 0|z|2\ 0\ 0\rangle$.

On ne calcule pas, on définit $\langle 2\ 1\ 0|W_s|2\ 0\ 0\rangle \equiv \gamma\mathcal{E}$. Dans la base $\{|2\ 1\ 1\rangle, |2\ 1\ -1\rangle, |2\ 1\ 0\rangle, |2\ 0\ 0\rangle\}$, la matrice est

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma\mathcal{E} \\ 0 & 0 & \gamma\mathcal{E} & 0 \end{pmatrix} .$$

Il faut diagonaliser la matrice. Valeurs propres: 0 (2 fois), $\gamma\mathcal{E}$, $-\gamma\mathcal{E}$.
Donc:

$$\begin{aligned}
 |2\ 1\ 1\rangle & : \text{ correction} = 0 , \\
 |2\ 1\ -1\rangle & : \text{ correction} = 0 , \\
 \frac{1}{\sqrt{2}} [|2\ 1\ 0\rangle + |2\ 0\ 0\rangle] & : \text{ correction} = \gamma\mathcal{E} , \\
 \frac{1}{\sqrt{2}} [|2\ 1\ 0\rangle - |2\ 0\ 0\rangle] & : \text{ correction} = -\gamma\mathcal{E} .
 \end{aligned}$$

La dégénérescence est partiellement levée.

Remarque: en présence du champ électrique, les états propres ne sont plus des états propres de \vec{L}^2 (ils sont un mélange de $l = 1$ et $l = 0$). La raison est que la perturbation ne commute pas avec \vec{L}^2 . Pourquoi? Parce que le champ électrique choisit une direction préférée \implies il brise l'invariance rotationnelle. Mais: on a encore l'invariance sous des rotations autour de l'axe $\hat{z} \implies$ le champ électrique commute avec L_z et m est encore un bon nombre quantique.

Muonium/Positronium

Muonium: $e^- \mu^+$; positronium: $e^- e^+$. La différence avec l'atome d'hydrogène est que le moment magnétique du μ^+ ou e^+ n'est pas négligeable (par opposition au moment magnétique du p). Donc: on considère la structure hyperfine et l'effet Zeeman en gardant ce moment magnétique. On applique ceci à l'état $1s$.

La structure hyperfine de l'état $1s$ est $\mathcal{A} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$, où \vec{S}_1 est le spin de l' e^- et \vec{S}_2 le spin du μ^+ ou e^+ .

Effet Zeeman: on applique un champ magnétique $\vec{B}_0 = B_0 \hat{z}$:

$$H = \omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z} .$$

Ici, $\omega_i = -\gamma_i B_0$ où $\vec{M}_i = \gamma_i \vec{S}_i$. Pour muonium, $|\omega_2| < |\omega_1|$; pour positronium $\omega_2 = -\omega_1$.

Il faut diagonaliser l'Hamiltonien complet:

$$\mathcal{A} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z} .$$

On choisit la base $|F, m_F\rangle$ pour l'état $1s$, qui est dégénéré 4 fois.

Dans la base $\{|1 1\rangle, |1 -1\rangle, |1 0\rangle, |0 0\rangle\}$, la matrice est

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 + \frac{\hbar}{2}(\omega_1 + \omega_2) & & & \\ & \frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 - \frac{\hbar}{2}(\omega_1 + \omega_2) & & \\ & & \frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 & \frac{\hbar}{2}(\omega_1 - \omega_2) \\ & & \frac{\hbar}{2}(\omega_1 - \omega_2) & -\frac{3}{4}\mathcal{A}\hbar^2 \end{pmatrix}.$$

On diagonalise, on trouve

$$|1 1\rangle : E_1 = \frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 + \frac{\hbar}{2}(\omega_1 + \omega_2),$$

$$|1 -1\rangle : E_2 = \frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 - \frac{\hbar}{2}(\omega_1 + \omega_2).$$

Pour la sous-matrice 2×2 , on trouve

$$E_3 = -\frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 + \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{2}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{4}(\omega_1 - \omega_2)^2},$$

$$E_4 = -\frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 - \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{2}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{4}(\omega_1 - \omega_2)^2}.$$

Dans un champ faible ($\omega_1, \omega_2 \ll \mathcal{A}\hbar$), les états 3 et 4 correspondent à $|1\ 0\rangle$ et $|0\ 0\rangle$. Dans un champ fort ($\omega_1, \omega_2 \gg \mathcal{A}\hbar$), ils sont $|+-\rangle$ et $|-\rangle$.

Comparé à l'atome d'hydrogène (où on a négligé ω_2), on ne voit des différences que dans un champ fort. Donc on suppose que

$$\hbar(\omega_1 - \omega_2) \gg \mathcal{A}\hbar^2 \implies$$

$$E_1 = \frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 + \frac{1}{2}\hbar(\omega_1 + \omega_2) ,$$

$$E_2 = \frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 - \frac{1}{2}\hbar(\omega_1 + \omega_2) ,$$

$$E_3 \simeq -\frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 + \frac{1}{2}\hbar(\omega_1 - \omega_2) ,$$

$$E_4 \simeq -\frac{1}{4}\mathcal{A}\hbar^2 - \frac{1}{2}\hbar(\omega_1 - \omega_2) .$$

Dans le cas où on néglige ω_2 (l'atome d'hydrogène), E_1 et E_3 ont le même comportement asymptotique, de même que E_2 et E_4 .

Mais pour muonium et positronium, c'est différent: on ne peut pas négliger ω_2 . Dans la limite d'un champ très fort, on peut négliger la structure hyperfine ($\mathcal{A}\hbar^2 \simeq 0$). Donc

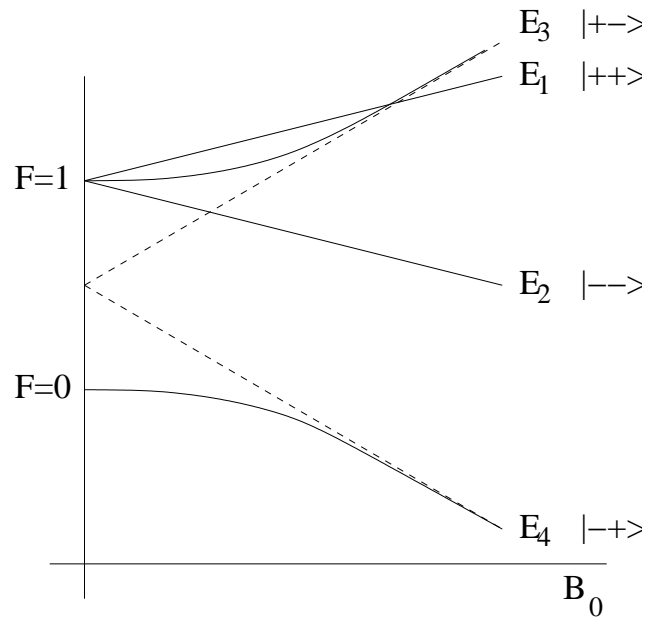
$$\begin{aligned} E_1 &\rightarrow -\frac{1}{2}\hbar(\gamma_1 + \gamma_2) , & E_2 &\rightarrow +\frac{1}{2}\hbar(\gamma_1 + \gamma_2) , \\ E_3 &\rightarrow -\frac{1}{2}\hbar(\gamma_1 - \gamma_2) , & E_4 &\rightarrow +\frac{1}{2}\hbar(\gamma_1 - \gamma_2) . \end{aligned}$$

Comme les deux particules ont des charges opposées, γ_1 et γ_2 ont des signes opposés \implies dans un champ suffisamment fort, l'énergie du niveau 3 (l'état $|+-\rangle$) sera *plus grande* que l'énergie du niveau 1 (l'état $|++\rangle$):

$$\begin{aligned} E_1 - E_3 &= \frac{1}{2}\mathcal{A}\hbar^2 + \frac{\hbar}{2}(\omega_1 + \omega_2) - \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{2}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{4}(\omega_1 - \omega_2)^2} \\ &= \frac{1}{2}\mathcal{A}\hbar^2 - \frac{\hbar}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)B_0 - \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{2}\right)^2 + \frac{\hbar^2 B_0^2}{4}(\gamma_1 - \gamma_2)^2} . \end{aligned}$$

(Par contre, $E_2 > E_4$ toujours.)

Le spectre d'énergie pour muonium. Ce comportement a été mesuré.

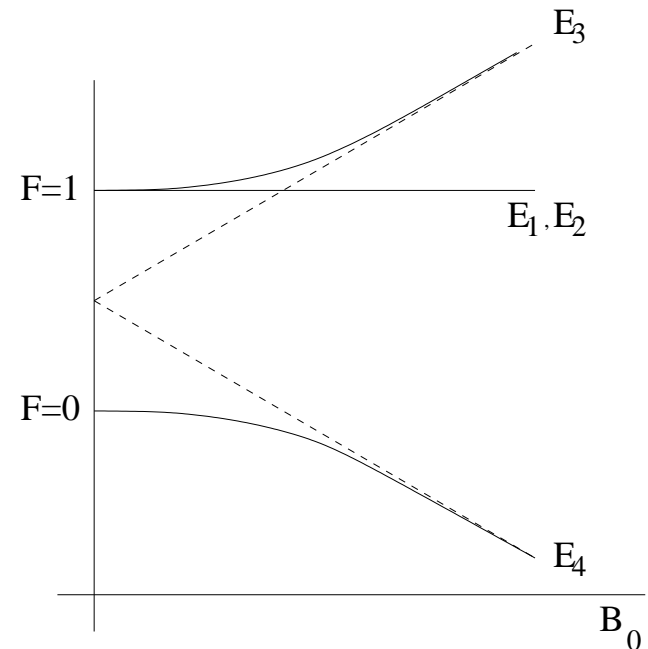


Positronium: $\omega_1 = -\omega_2$:

$$E_1 = E_2 = \frac{1}{4} \mathcal{A} \hbar^2 ,$$

$$E_3 = -\frac{1}{4} \mathcal{A} \hbar^2 + \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A} \hbar^2}{2}\right)^2 + \hbar^2 \gamma_1^2 B_0^2} ,$$

$$E_4 = -\frac{1}{4} \mathcal{A} \hbar^2 - \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A} \hbar^2}{2}\right)^2 + \hbar^2 \gamma_1^2 B_0^2} .$$



Perturbations Dépendantes du Temps

On a $H_0 |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$, où on suppose que H_0 est discret et non-dégénéré (simplicité). H_0 est indépendant de t . À $t = 0$, on applique une perturbation:

$$H(t) = H_0 + W(t) = H_0 + \lambda \widehat{W}(t) ,$$

où $\lambda \ll 1$. $\widehat{W}(t)$ est du même ordre que H_0 et égal à 0 pour $t < 0$.

Donc: à $t = 0$, l'état est $|\varphi_i\rangle$ ($H_0 |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle$). On applique la perturbation $W(t)$ à $t = 0$. Pour $t > 0$, en général, l'état ne sera plus $|\varphi_i\rangle$. En fait, en général, l'état ne sera plus un état propre de H_0 . Nous cherchons $\mathcal{P}_{fi}(t)$, la probabilité de trouver le système dans $|\varphi_f\rangle$, un autre état propre de H_0 , au temps t . On étudiera les transitions induites par $W(t)$ entre les états stationnaires de H_0 .

Pour les temps de 0 à t , le système est décrit par

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left[H_0 + \lambda \widehat{W}(t) \right] |\psi(t)\rangle ,$$

où $|\psi(t = 0)\rangle = |\varphi_i\rangle$. Cette équation a une solution unique.

La probabilité cherchée, $\mathcal{P}_{fi}(t)$, est donnée par

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2 .$$

Le problème est de trouver $|\psi(t)\rangle$.

On utilisera une méthode d'approximation. D'abord, on écrit $|\psi(t)\rangle$ dans la base $\{|\varphi_n\rangle\}$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\varphi_n\rangle \implies c_n(t) = \langle \varphi_n | \psi(t) \rangle .$$

Nous avons l'équation de Schroedinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left[H_0 + \lambda \widehat{W}(t) \right] |\psi(t)\rangle .$$

On insère un ensemble complet d'états: $\sum_k |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k|$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \sum_k |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k | \psi(t) \rangle = \sum_{k'} \left[H_0 |\varphi_{k'}\rangle \langle \varphi_{k'} | \psi(t) \rangle + \lambda \widehat{W}(t) |\varphi_{k'}\rangle \langle \varphi_{k'} | \psi(t) \rangle \right] .$$

On multiplie de la gauche par $\langle \varphi_n |$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \sum_k \langle \varphi_n | \varphi_k \rangle \langle \varphi_k | \psi(t) \rangle \\ = \sum_{k'} \left[\langle \varphi_n | H_0 | \varphi_{k'} \rangle \langle \varphi_{k'} | \psi(t) \rangle + \lambda \langle \varphi_n | \widehat{W}(t) | \varphi_{k'} \rangle \langle \varphi_{k'} | \psi(t) \rangle \right] . \end{aligned}$$

On a $\langle \varphi_n | \varphi_k \rangle = \delta_{nk}$ et $\langle \varphi_n | H_0 | \varphi_{k'} \rangle = E_n \delta_{nk'}$. De plus, on définit

$$\widehat{W}_{nk}(t) \equiv \langle \varphi_n | \widehat{W}(t) | \varphi_k \rangle .$$

Alors,

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t) + \sum_k \lambda \widehat{W}_{nk}(t) c_k(t) .$$

Ceci est un ensemble d'équations linéaires différentielles couplées \implies on détermine les $c_n(t)$, qui sont les composantes de $|\psi(t)\rangle$. Le couplage entre les équations est dû à un $\widehat{W}_{nk}(t)$ non-nul \implies induit des transitions $|\varphi_n\rangle \leftrightarrow |\varphi_k\rangle$.

Remarque: si $\widehat{W}_{nk}(t) = 0$, les équations ne sont plus couplées:

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t) \implies c_n(t) = b_n e^{-iE_n t/\hbar},$$

où b_n est une constante qui dépend des conditions initiales.

Or, si $\widehat{W}_{nk}(t) \neq 0$, mais $\lambda \ll 1$, $c_n(t)$ devrait être proche de la solution ci-dessus:

$$c_n(t) = b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar},$$

où $b_n(t)$ est une fonction de t qui varie très lentement (i.e. presque une constante).

$$\implies i\hbar \frac{d}{dt} \left(b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \right) = E_n b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} + \sum_k \lambda \widehat{W}_{nk}(t) b_k(t) e^{-iE_k t/\hbar}.$$

On prend les dérivées, on multiplie par $\exp(+iE_n t/\hbar)$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n(t) + E_n b_n(t) = E_n b_n(t) + \sum_k \lambda \widehat{W}_{nk}(t) b_k(t) e^{i(E_n - E_k)t/\hbar}.$$

On définit $\omega_{nk} \equiv (E_n - E_k)/\hbar$. Donc

$$i\hbar \dot{b}_n(t) = \lambda \sum_k \widehat{W}_{nk}(t) b_k(t) e^{i\omega_{nk}t} .$$

Jusqu'ici, on n'a pas fait d'approximation. Ceci est équivalent à l'équation de Schroedinger. Maintenant, on utilise le fait que $\lambda \ll 1$. On écrit

$$b_n(t) = b_n^{(0)}(t) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + \dots$$

Alors

$$\begin{aligned} i\hbar \left[\dot{b}_n^{(0)}(t) + \lambda \dot{b}_n^{(1)}(t) + \lambda^2 \dot{b}_n^{(2)}(t) + \dots \right] \\ = \lambda \sum_k \widehat{W}_{nk}(t) e^{i\omega_{nk}t} \left[b_k^{(0)}(t) + \lambda b_k^{(1)}(t) + \lambda^2 b_k^{(2)}(t) + \dots \right] . \end{aligned}$$

Les coefficients des différentes puissances de λ doivent être égaux les deux côtés:

$$\lambda^0 : \quad i\hbar \dot{b}_n^{(0)}(t) = 0 .$$

Donc $b_n^{(0)}(t)$ est une constante (indépendant de t).

Autres puissances de λ :

$$i\hbar \dot{b}_n^{(r)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \widehat{W}_{nk}(t) b_k^{(r-1)}(t) .$$

Donc: par recurrence on a la solution à l'ordre r en fonction de la solution à l'ordre $r - 1$.

Solution au premier ordre: pour $t < 0$, le système est dans l'état $|\varphi_i\rangle$
 \implies seul $b_i(t) \neq 0$ pour $t < 0$. À $t = 0$, on a

$$b_n^{(0)}(t = 0) = \delta_{ni} , \quad b_n^{(r)}(t = 0) = 0 \text{ pour } r \geq 1 .$$

À $t = 0$, on "allume" $\lambda \widehat{W}(t)$. Pour $t > 0$, $b_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}$ (comme c'est une constante). C'est la solution à l'ordre 0. La solution à l'ordre 1:

$$i\hbar \dot{b}_n^{(1)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \widehat{W}_{nk}(t) \delta_{ki} = e^{i\omega_{ni}t} \widehat{W}_{ni}(t) .$$

On intègre:

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} \widehat{W}_{ni}(t') .$$

La probabilité de transition:

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2 = |b_f(t)|^2 ,$$

où $b_f(t) = b_f^{(0)}(t) + \lambda b_f^{(1)}(t) + \dots$

On suppose que $|\varphi_f\rangle \neq |\varphi_i\rangle \implies$ on ne considère que des transitions induites par $\widehat{W}(t)$ entre deux états stationnaires différents. Alors

$$b_f^{(0)}(t) = 0 \implies \mathcal{P}_{fi}(t) = \lambda^2 \left| b_f^{(1)}(t) \right|^2 .$$

On remplace $\lambda \widehat{W}(t)$ par $W(t)$:

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i\omega_{fi}t'} W_{fi}(t') \right|^2 .$$

Ceci est la probabilité de transition entre $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$.

Remarque: cette probabilité est proportionnelle à la transformée de Fourier de $\widetilde{W}_{fi}(t)$, où

$$\widetilde{W}_{fi}(t) = \begin{cases} 0 & \text{pour } t' < 0 \\ W_{fi}(t) & \text{pour } 0 \leq t' \leq t \\ 0 & \text{pour } t' > t, \end{cases}$$

évaluée à la pulsation de Bohr, qui correspond à $E_f - E_i$, l'énergie de transition.

On suppose que $\widehat{W}(t) = A(x)B(t)$ (séparation de variables) \implies
 $\widehat{W}_{fi}(t) = \langle \varphi_f | A(x) | \varphi_i \rangle B(t)$. Il s'avère que, occasionnellement, à cause de la forme de $A(x)$, $\langle \varphi_f | A(x) | \varphi_i \rangle = 0$. Dans ce cas, il faut pousser au 2^{me} ordre.

E.g. puits infini entre $x = -a/2$ et $x = a/2$:

$$\varphi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{(n+1)\pi x}{a} & n = 0, 2, 4, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{(n+1)\pi x}{a} & n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad E_n = (n + 1)^2 \hbar \omega .$$

E.g. si $A(x) = \sin \pi x/a$, la probabilité de transition de $|\varphi_0\rangle$ à $|\varphi_2\rangle$ est proportionnelle à

$$\int_{-a/2}^{a/2} \cos \frac{\pi x}{a} \cos \frac{3\pi x}{a} \sin \frac{\pi x}{a} = 0 ,$$

(Fonction impaire, intervalle pair.) Donc il faut pousser au 2^{me} ordre.

Nous avons

$$i\hbar \dot{b}_n^{(r)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \widehat{W}_{nk}(t) b_k^{(r-1)}(t)$$

$$\implies b_f^{(2)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \sum_k e^{i\omega_{fk}t'} \widehat{W}_{fk}(t') b_k^1(t') .$$

Mais

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{ki}t''} \widehat{W}_{ki}(t'')$$

$$\implies b_f^{(2)}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_0^t dt' e^{i\omega_{fk}t'} \widehat{W}_{fk}(t') \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{ki}t''} \widehat{W}_{ki}(t'') .$$

Et

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \lambda^4 \left| b_f^{(2)}(t) \right|^2 .$$

Dans l'exemple précédent, pour (e.g.) $k = 1$:

$$\int_{-a/2}^{a/2} \cos \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} \sin \frac{\pi x}{a} \neq 0 , \quad (\text{transition } 0 \rightarrow 1)$$

$$\int_{-a/2}^{a/2} \cos \frac{3\pi x}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} \sin \frac{\pi x}{a} \neq 0 . \quad (\text{transition } 1 \rightarrow 2)$$

Donc, la transition $0 \rightarrow 2$ n'est pas permise directement (1^{er} ordre), mais elle est permise indirectement (2^{me} ordre) par (e.g.) $0 \rightarrow 1, 1 \rightarrow 2$.

C'est similaire aux perturbations indépendantes du temps:

$$\epsilon_2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \varphi_m | W | \varphi_n \rangle|^2}{(E_n^0 - E_m)^2}.$$

Même si $\varphi_n \rightarrow \varphi_n$ n'est pas permis par W ($\epsilon_1 = 0$), elle est permise par $\varphi_n \rightarrow \varphi_m, \varphi_m \rightarrow \varphi_n$.

Différence: ici,

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \left| \sum_k (\dots) \right|^2.$$

Donc, il y a interférence entre les différents états intermédiaires.

Validité de l'approximation: nous avons remplacé $b_k(t)$ dans

$$i\hbar \dot{b}_f(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{fk}t} \widehat{W}_{fk}(t) b_k(t)$$

par sa valeur initiale. Si t est petit, $b_k(t)$ ne différera pas beaucoup de sa valeur initiale et l'approximation est bonne. Mais si t est suffisamment grand que $b_k(t) \neq b_k(0)$, l'approximation n'est plus valide.

Cas spécial important:

$$\widehat{W}(t) = \widehat{W} \sin \omega t \quad \text{ou} \quad \widehat{W}(t) = \widehat{W} \cos \omega t ,$$

où \widehat{W} est indépendant du temps. Ceci est une situation commune: on applique une onde électromagnétique de pulsation ω . $\mathcal{P}_{fi}(t)$ est la probabilité de transition entre $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ induite par cette radiation.

D'abord, $\sin \omega t$:

$$\widehat{W}(t) = \widehat{W}_{fi} \sin \omega t = \frac{\widehat{W}_{fi}}{2i} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) .$$

Alors

$$\begin{aligned} b_n^{(1)}(t) &= -\frac{\widehat{W}_{ni}}{2\hbar} \int_0^t dt' \left[e^{i(\omega_{ni}+\omega)t'} - e^{i(\omega_{ni}-\omega)t'} \right] \\ &= \frac{\widehat{W}_{ni}}{2i\hbar} \left[\frac{1 - e^{i(\omega_{ni}+\omega)t}}{\omega_{ni} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{ni}-\omega)t}}{\omega_{ni} - \omega} \right] . \end{aligned}$$

Pour un état final général $|\varphi_f\rangle$,

$$\mathcal{P}_{fi}(t; \omega) = \frac{|\widehat{W}_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 .$$

Si nous avons choisi $\cos \omega t$,

$$\mathcal{P}_{fi}(t; \omega) = \frac{|\widehat{W}_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 .$$

Remarque: si on met $\omega = 0$, la perturbation en $\cos \omega t$ devient une constante. L'effet d'une perturbation constante:

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \frac{|\widehat{W}_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| 2 \frac{1 - e^{i\omega_{fi}t}}{\omega_{fi}} \right|^2 = \frac{|\widehat{W}_{fi}|^2}{\hbar^2} F(t, \omega_{fi}) ,$$

où

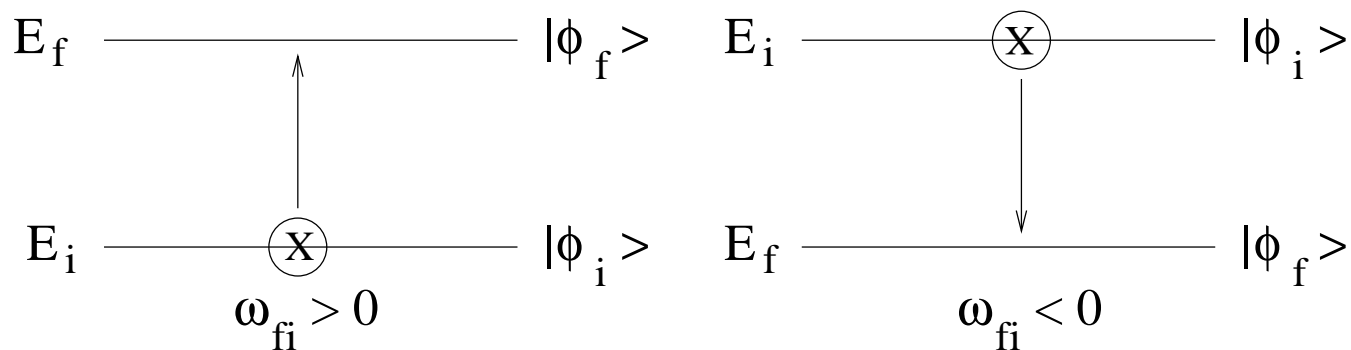
$$F(t, \omega_{fi}) = \left[\frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}/2} \right]^2 .$$

La physique: on considère de nouveau la perturbation en $\sin \omega t$:

$$\mathcal{P}_{fi}(t; \omega) = \frac{|\widehat{W}_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 .$$

Si on fixe t , cette fonction a sa valeur maximale quand $\omega = +\omega_{fi}$ ou $\omega = -\omega_{fi}$. C'est-à-dire: on a une résonance quand l'énergie de la perturbation, $\hbar\omega$, est égale à l'énergie de transition, $\hbar\omega_{fi}$.

On choisit $\omega > 0$. Les deux pulsations de résonance sont $\omega_{fi} > 0$ (l'absorption résonante) ou $\omega_{fi} < 0$ (l'émission stimulée):



Désormais, on suppose que $\omega_{fi} > 0$ (ceci n'est pas spécial – on aurait pu prendre au lieu $\omega_{fi} < 0$).

\mathcal{P}_{fi} a 2 termes:

$$A_+ \equiv \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} = -ie^{i(\omega_{fi} + \omega)t/2} \frac{\sin[(\omega_{fi} + \omega)t/2]}{(\omega_{fi} + \omega)/2}$$

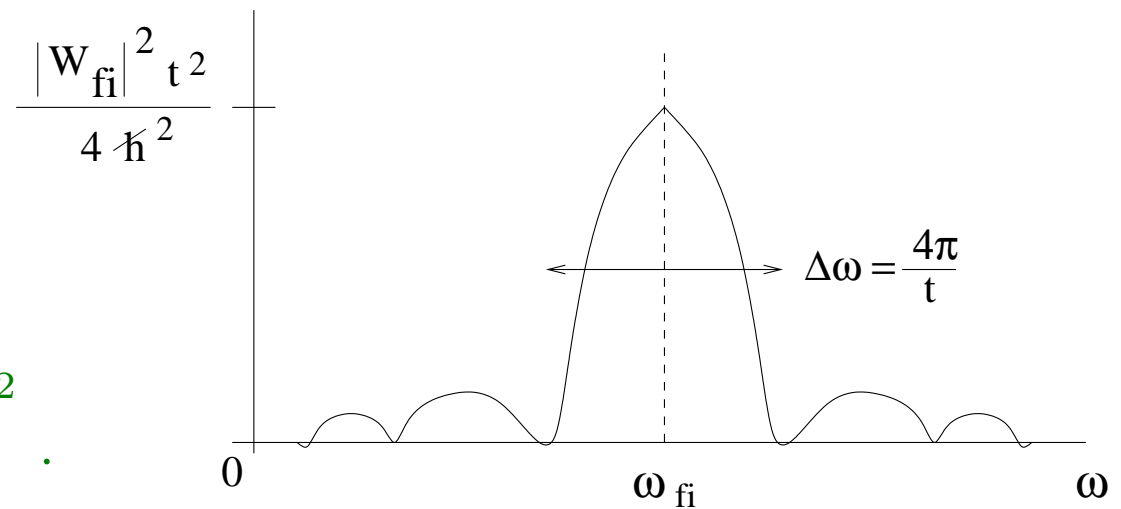
$$A_- \equiv \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} = -ie^{i(\omega_{fi} - \omega)t/2} \frac{\sin[(\omega_{fi} - \omega)t/2]}{(\omega_{fi} - \omega)/2} .$$

Pour $\omega \simeq \omega_{fi}$, seul le terme A_- est important: terme résonante. A_+ est le terme anti-résonante.

On suppose que $|\omega - \omega_{fi}| \ll 1$
(i.e. $\omega \simeq \omega_{fi}$) \implies on peut négliger A_+ :

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \frac{|\widehat{W}_{fi}|^2}{\hbar^2} F(t, \omega - \omega_{fi}) ,$$

$$F(t, \omega - \omega_{fi}) = \left\{ \frac{\sin(\omega_{fi} - \omega)t/2}{(\omega_{fi} - \omega)/2} \right\}^2 .$$



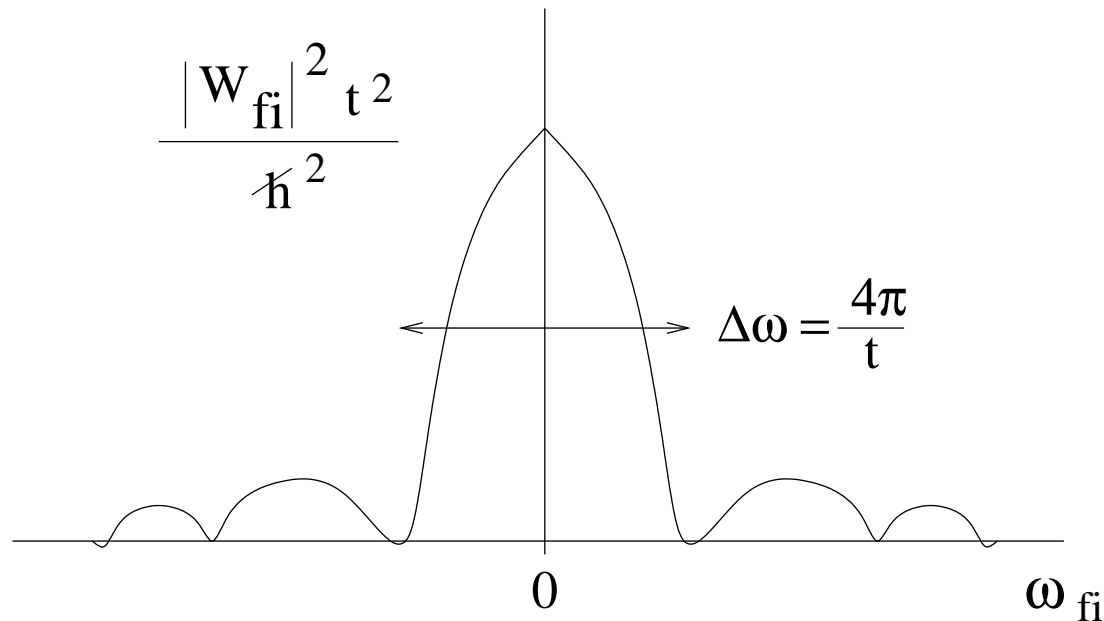
Remarque: largeur $\Delta\omega \simeq 4\pi/t$. Donc, pour t grand, on a une largeur petite. C'est similaire à une relation d'incertitude. On mesure la différence d'énergie $E_f - E_i = \hbar\omega_{fi}$ en appliquant une perturbation sinusoïdale de pulsation ω et en cherchant une résonance. Si la perturbation agit pour un temps t , l'incertitude sur l'énergie est $\Delta E = \hbar\Delta\omega \simeq \hbar/t$.

Validité de l'approximation: nous avons négligé A_+ par rapport à A_- . Cependant, $|A_+|^2$ a la même forme que $|A_-|^2$, mais centré à $-\omega_{if}$. Mais la différence entre les centres est petite si $\Delta\omega \ll 2\omega_{fi}$. Donc il faut que $t \gg 1/|\omega_{fi}| \simeq 1/\omega$ (rappel: $\Delta\omega \simeq 4\pi/t$). Alors, l'expression pour $\mathcal{P}_{fi}(t)$ n'est valide que pour des temps $t \gg 1/\omega$.

Par contre: nous avons vu que le développement en fonction des perturbations n'est pas valide pour des temps très grands. Ceci est vrai ici: la valeur maximale de $\mathcal{P}_{fi}(t)$ est $|\widehat{W}_{fi}|^2 t^2 / 4\hbar^2$. Alors, lorsque $t \rightarrow \infty$, $\mathcal{P}_{fi}(t) \rightarrow \infty$, ce qui est impossible parce que toute probabilité doit être ≤ 1 . Donc, il faut que $t \ll \hbar / |\widehat{W}_{fi}|$.

Qu'est-ce qui se passe si $\omega = 0$? Ceci est la perturbation constante (le terme $\cos \omega t$). Nous avons dit que la théorie des perturbations n'est valide que pour $t \gg 1/\omega$. Ceci est impossible si $\omega = 0$. Quoi faire?

On refait les calculs avec $\omega = 0$. Dans ce cas, $A_+ = A_- \implies$ le terme anti-résonante n'est pas négligeable. Si on tient compte de ceci:



Donc: on trouve une résonance, mais centrée à $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar = 0$. C'est-à-dire: cette perturbation induit des transitions entre états de la même énergie (niveaux dégénérés).

Exemple: puits infini, $|x| < |a/2|$:

$$\varphi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{(n+1)\pi x}{a} & n = 0, 2, 4, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{(n+1)\pi x}{a} & n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad E_n = (n+1)^2 \hbar \omega .$$

1. On applique $W(x, t) = -qEx \cos \omega t$. Trouvez $\mathcal{P}_{0 \rightarrow 1}$. Pour quel ω y a-t-il une résonance? Quel est $\mathcal{P}_{0 \rightarrow 1}$ dans ce cas?

Solution:

$$\mathcal{P}_{0 \rightarrow 1} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i\omega_{10}t'} W_{fi}(t') \right|^2 .$$

Comme $W_{fi}(t') = \langle \varphi_1 | W(x, t') | \varphi_0 \rangle = -qE \langle \varphi_1 | x | \varphi_0 \rangle \cos \omega t'$, on a

$$\mathcal{P}_{0 \rightarrow 1} = \frac{q^2 E^2}{\hbar^2} |\langle \varphi_1 | x | \varphi_0 \rangle|^2 \left| \int_0^t dt' e^{i\omega_{10}t'} \cos \omega t' \right|^2 .$$

Il faut calculer deux intégrales.

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_1 | x | \varphi_0 \rangle &= \int_{-a/2}^{a/2} dx \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a} x \\
& \qquad \qquad \qquad y = \frac{\pi x}{a} \implies x = \frac{a}{\pi} y \\
&= \frac{2a^2}{a\pi^2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dy \cos y \sin 2y \cdot y = \frac{2a}{\pi^2} N .
\end{aligned}$$

L'autre intégrale: $\omega_{10} = \omega_1 - \omega_0 = 4\omega_0 - \omega_0 = 3\omega_0$.

$$\begin{aligned}
\int_0^t dt' e^{3i\omega_0 t'} \frac{1}{2} \left(e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'} \right) &= \frac{1}{2} \left[\frac{e^{i(3\omega_0 + \omega)t'}}{(3\omega_0 + \omega)} + \frac{e^{i(3\omega_0 - \omega)t'}}{(3\omega_0 - \omega)} \right]_0^t \\
&= -\frac{1}{2} \left[\frac{1 - e^{i(3\omega_0 + \omega)t}}{(3\omega_0 + \omega)} + \frac{1 - e^{i(3\omega_0 - \omega)t}}{(3\omega_0 - \omega)} \right] .
\end{aligned}$$

résonance à $\omega = 3\omega_0$. (Pour $1 \rightarrow 0$, la résonance est à $-3\omega_0$.) \implies le 2^{me} terme est important. Il est

$$-\frac{1}{2} e^{i(3\omega_0 - \omega)\frac{t}{2}} \frac{e^{-i(3\omega_0 - \omega)\frac{t}{2}} - e^{i(3\omega_0 - \omega)\frac{t}{2}}}{2(3\omega_0 - \omega)/2} = \frac{1}{2} e^{i(3\omega_0 - \omega)\frac{t}{2}} \frac{2i \sin(3\omega_0 - \omega)t/2}{2(3\omega_0 - \omega)/2} .$$

Alors,

$$\mathcal{P}_{0 \rightarrow 1} \simeq \frac{1}{\hbar^2} q^2 E^2 \frac{4a^2}{\pi^2} N^2 \frac{1}{4} \left[\frac{\sin(3\omega_0 - \omega)t/2}{2(3\omega_0 - \omega)/2} \right]^2 .$$

Qu'est-ce qui se passe lorsque $\omega \rightarrow 3\omega_0$? Dans la probabilité, on a

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin xt}{x} = t \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\sin z}{z} = t .$$

Donc,

$$\mathcal{P}_{0 \rightarrow 1} \simeq \frac{1}{\hbar^2} q^2 E^2 \frac{a^2}{\pi^2} N^2 t^2 .$$

2. On applique $W(x, t) = -qEx \cos \omega t$, avec $\omega = 7\omega_0$. Trouvez $\mathcal{P}_{0 \rightarrow 2}$. Quel terme domine?

1^{er} ordre: on aura à calculer $\langle \varphi_2 | x | \varphi_0 \rangle$. Mais $|\varphi_0\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ sont pairs, tandis que x est impair $\implies \langle \varphi_2 | x | \varphi_0 \rangle = 0$. Il faut pousser au 2^{me} ordre.

Rappel:

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \left| -\frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_0^t dt' e^{i\omega_{fk}t'} W_{fk}(t') \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{ki}t''} W_{ki}(t'') \right|^2 .$$

Remarque: $|\varphi_0\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ sont pairs, x impair \implies les états intermédiaires doivent être impairs $\implies |\varphi_k\rangle \sim \sin[(n+1)\pi x/a]$, n impair.

Or, $W_{ki} = -qE \langle \varphi_k | x | \varphi_0 \rangle \cos \omega t$, $W_{fk} = -qE \langle \varphi_2 | x | \varphi_k \rangle \cos \omega t$. Alors

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \frac{1}{\hbar^4} q^4 E^4 \left| \sum_{k \text{ impairs}} \langle \varphi_2 | x | \varphi_k \rangle \langle \varphi_k | x | \varphi_0 \rangle \int_0^t dt' e^{i\omega_{2k}t'} \cos \omega t' \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{k0}t''} \cos \omega t'' \right|^2 .$$

Il faut d'abord effectuer les intégrales sur le temps. La 2^{me} intégrale est

$$\frac{1}{2} \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{k0}t''} \left(e^{i\omega t''} + e^{-i\omega t''} \right) = \frac{1}{2} \left[\frac{e^{i(\omega_{k0}+\omega)t'} - 1}{(\omega_{k0} + \omega)} + \frac{e^{i(\omega_{k0}-\omega)t'} - 1}{(\omega_{k0} - \omega)} \right] .$$

Ensuite:

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{4} \int_0^t dt' e^{i\omega_{2k}t'} \left(e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'} \right) \left[\frac{e^{i(\omega_{k0}+\omega)t'} - 1}{(\omega_{k0} + \omega)} + \frac{e^{i(\omega_{k0}-\omega)t'} - 1}{(\omega_{k0} - \omega)} \right] \\
 &= \frac{1}{4} \left\{ \frac{e^{i(\omega_{2k}+\omega_{k0}+2\omega)t} - 1}{(\omega_{k0} + \omega)(\omega_{2k} + \omega_{k0} + 2\omega)} - \frac{e^{i(\omega_{2k}+\omega)t} - 1}{(\omega_{k0} + \omega)(\omega_{2k} + \omega)} \right. \\
 &\quad + \frac{e^{i(\omega_{2k}+\omega_{k0})t} - 1}{(\omega_{k0} + \omega)(\omega_{2k} + \omega_{k0})} - \frac{e^{i(\omega_{2k}-\omega)t} - 1}{(\omega_{k0} + \omega)(\omega_{2k} - \omega)} \\
 &\quad + \frac{e^{i(\omega_{2k}+\omega_{k0})t} - 1}{(\omega_{k0} - \omega)(\omega_{2k} + \omega_{k0})} - \frac{e^{i(\omega_{2k}+\omega)t} - 1}{(\omega_{k0} - \omega)(\omega_{2k} + \omega)} \\
 &\quad \left. + \frac{e^{i(\omega_{2k}+\omega_{k0}-2\omega)t} - 1}{(\omega_{k0} - \omega)(\omega_{2k} + \omega_{k0} - 2\omega)} - \frac{e^{i(\omega_{2k}-\omega)t} - 1}{(\omega_{k0} - \omega)(\omega_{2k} - \omega)} \right\} .
 \end{aligned}$$

Or,

$$\omega_{2k} = \omega_2 - \omega_k = 9\omega_0 - (k+1)^2\omega_0 = 8\omega_0 - (k^2 + 2k)\omega_0 ,$$

$$\omega_{k0} = \omega_k - \omega_0 = (k+1)^2\omega_0 - \omega_0 = (k^2 + 2k)\omega_0 .$$

Nous avons $\omega = 7\omega_0$ Y a-t-il un k qui donne une résonance?

On a des résonances à

$$\omega = \pm\omega_{k0} \quad , \quad \omega = \pm\omega_{2k} \quad , \quad \omega = \pm\frac{1}{2} [\omega_{2k} + \omega_{k0}] \quad .$$

Or, $\pm\omega_{k0} = \pm(k^2 + 2k)\omega_0$. Doit être positif: $k = 1: 3\omega_0$; $k = 3: 15\omega_0$.

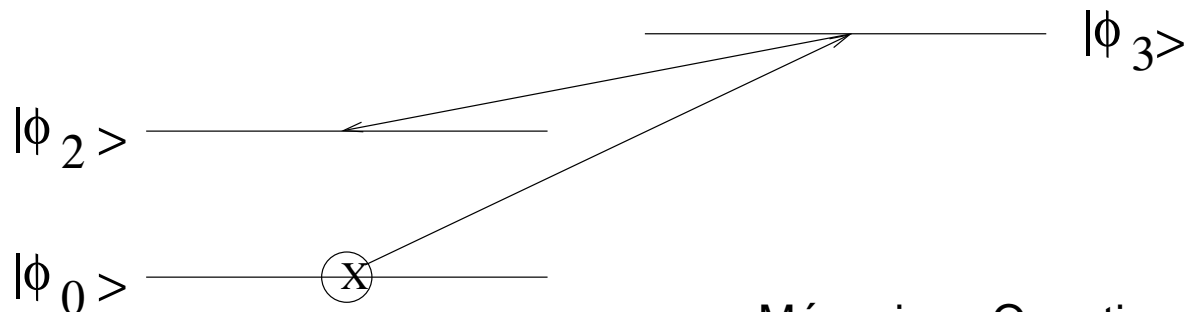
Nous n'avons pas de $7\omega_0$; $\pm\frac{1}{2} [\omega_{2k} + \omega_{k0}] = \pm 4\omega_0 \neq 7\omega_0$.

Mais $\pm\omega_{2k} = \pm(8 - k^2 - 2k)\omega_0$. Si $k = 3$, signe $- \implies = 7\omega_0$. Donc le terme $1/(\omega_{2k} + \omega)$ donne une résonance (termes 2 et 6):

$$-\frac{e^{i(\omega_{2k}+\omega)t} - 1}{\omega_{2k} + \omega} \left[\frac{1}{\omega_{k0} + \omega} + \frac{1}{\omega_{k0} - \omega} \right] = -2 \frac{e^{i(\omega_{2k}+\omega)t} - 1}{\omega_{2k} + \omega} \cdot \frac{\omega_{k0}}{\omega_{k0}^2 - \omega^2} \quad .$$

Pour $k = 3$, $\omega_{30} = 15\omega_0$:

$$\frac{\omega_{k0}}{\omega_{k0}^2 - \omega^2} = \frac{15}{176} \frac{1}{\omega_0} \implies \mathcal{P}_{0 \rightarrow 2} = \frac{q^4 E^4}{\hbar^4} \left(\frac{30}{176} \right)^2 \frac{1}{\omega_0^2} t^2 |\langle \varphi_2 | x | \varphi_3 \rangle \langle \varphi_3 | x | \varphi_0 \rangle|^2 \quad .$$



Comportement résonant à Long Terme Cohen-Tannoudji, C_{XIII} : nous avons vu qu'il faut que $t \ll \hbar / |\widehat{W}_{fi}|$. Qu'est-ce qui se passe si on veut étudier le système pendant longtemps? On peut essayer d'utiliser

$$\mathcal{P}_{fi}(t; \omega) = \left| \lambda b_f^{(1)}(t) + \lambda^2 b_f^{(2)}(t) + \dots \right|^2,$$

mais ce sera très long.

Plus vite: on utilise le fait que la perturbation a un comportement résonant. Lorsque $\omega = \omega_{fi}$, seulement les états $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ sont couplés par $W(t)$ (bonne approximation). À $t = 0$, le système est dans l'état $|\varphi_i\rangle$. Plus tard, on a une bonne probabilité de trouver le système dans l'état $|\varphi_f\rangle$. Mais: tous les autres coefficients $b_n(t)$, ($n \neq i, f$) ne satisfont pas à la condition de résonance \implies ils sont petits.

Nous avons

$$i\hbar \dot{b}_n(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \widehat{W}_{nk}(t) b_k(t) .$$

Nous avons remplacé $b_k(t) \rightarrow b_k(0)$ et résolu par récurrence.

Au lieu: on met $b_k(t) = b_k(0)$ pour $k \neq i, f$. Mais on laisse général pour $k = i, f$. Comme auparavant, on suppose que $\widehat{W}_{nk}(t) = \widehat{W}_{nk} \sin \omega t$.

Donc:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{b}_i(t) &= \frac{1}{2i} \left\{ [e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}] W_{ii} b_i(t) + [e^{i(\omega - \omega_{fi})t} - e^{-i(\omega + \omega_{fi})t}] W_{if} b_f(t) \right\} \\ i\hbar \dot{b}_f(t) &= \frac{1}{2i} \left\{ [e^{i(\omega + \omega_{fi})t} - e^{-i(\omega - \omega_{fi})t}] W_{fi} b_i(t) + [e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}] W_{ff} b_f(t) \right\} \end{aligned}$$

Remarque: il y a des termes $e^{\pm\omega t}$, $e^{\pm(\omega - \omega_{fi})t}$, $e^{\pm(\omega + \omega_{fi})t}$. Pour $\omega \simeq \omega_{fi}$, les termes $e^{\pm(\omega - \omega_{fi})t}$ oscillent lentement, les autres oscillent rapidement.

Approximation (séculaire): lorsqu'on intègre sur le temps, les termes $e^{\pm(\omega-\omega_{fi})t}$ donnent de grandes contributions (résonances); la moyenne des autres est nulle \implies on néglige ces termes. On peut résoudre les équations!

$$\dot{b}_i(t) = -\frac{1}{2\hbar} e^{i(\omega-\omega_{fi})t} W_{if} b_f(t) \quad , \quad \dot{b}_f(t) = \frac{1}{2\hbar} e^{-i(\omega-\omega_{fi})t} W_{fi} b_i(t) .$$

Pour $\omega \sim \omega_{fi}$,

$$\dot{b}_f(t) = \frac{W_{if}^*}{2\hbar} b_i(t) \implies \frac{d^2}{dt^2} b_i(t) = -\frac{|W_{if}|^2}{4\hbar^2} b_i(t) .$$

À $t = 0$, $b_i(0) = 1$, $b_f(0) = 0$. Alors,

$$\dot{b}_i(0) = 0 \quad , \quad \dot{b}_f(0) = \frac{W_{if}^*}{2\hbar} .$$

Solution:

$$b_i(t) = \cos\left(\frac{|W_{if}|t}{2\hbar}\right) \quad , \quad b_f(t) = e^{i\alpha_{fi}} \sin\left(\frac{|W_{if}|t}{2\hbar}\right) \quad ,$$

où α_{fi} est l'argument de W_{fi} .

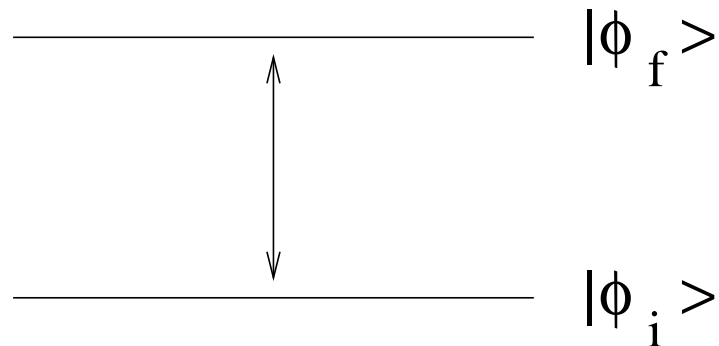
Donc,

$$\mathcal{P}_{fi}(t; \omega = \omega_{fi}) = \sin^2 \left(\frac{|W_{if}| t}{2\hbar} \right)$$

On peut résoudre même si $\omega \simeq \omega_{fi}$:

$$\mathcal{P}_{fi}(t; \omega) = \frac{|W_{if}|^2}{|W_{if}|^2 + \hbar^2(\omega - \omega_{fi})^2} \sin^2 \left[\sqrt{\frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} + (\omega - \omega_{fi})^2} \frac{t}{2} \right].$$

Point: le système oscille entre $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$:



Pour t petit, $\mathcal{P}_{fi}(t; \omega) = (|W_{if}|^2 / 4\hbar^2) t^2$, comme auparavant.

Perturbations Adiabatiques

Qu'est-ce qui se passe si $W(t)$ est appliqué de façon adiabatique, i.e. le changement de $W(t)$ dans le temps est très lent?

On avait

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} \widehat{W}_{ni}(t') .$$

On intègre par parties (avec $\widehat{W}(0) = 0$):

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{1}{i\omega_{ni}} e^{i\omega_{ni}t'} \widehat{W}_{ni}(t') \Big|_0^t - \frac{1}{i\omega_{ni}} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} \left(\frac{d\widehat{W}_{ni}(t')}{dt'} \right) \right] .$$

Comme $W(t)$ varie lentement, $d\widehat{W}(t)/dt \simeq 0$:

$$b_n^{(1)}(t) = -\frac{1}{\hbar\omega_{ni}} e^{i\omega_{ni}t} \widehat{W}_{ni}(t) = -\frac{\langle \varphi_n | W | \varphi_i \rangle}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} e^{i\omega_{ni}t} .$$

Rappel: le système est dans l'état $|\varphi_i\rangle$ à $t = 0$. Rappel aussi:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle .$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow |\psi(t)\rangle &= e^{-iE_i t/\hbar} |\varphi_i\rangle + \sum_{n \neq i} b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle \\
&= e^{-iE_i t/\hbar} |\varphi_i\rangle + \sum_{n \neq i} \frac{\langle \varphi_n | W | \varphi_i \rangle}{E_i^{(0)} - E_n^{(0)}} e^{i(E_n - E_i)t/\hbar} e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle \\
\Rightarrow |\psi(t)\rangle &= e^{-iE_i t/\hbar} |\varphi\rangle,
\end{aligned}$$

où $|\varphi\rangle$ est un état propre de l'Hamiltonien complet, $H = H_0 + W$. Alors

$$|\varphi\rangle = |\varphi_i\rangle + \sum_{n \neq i} \frac{\langle \varphi_n | W | \varphi_i \rangle}{E_i^{(0)} - E_n^{(0)}} |\varphi_n\rangle.$$

C'est comme la théorie des perturbations indépendantes du temps.

Mais remarque: $|\varphi\rangle$ est un état propre de l'Hamiltonien complet: c'est l'état i . C'est-à-dire: l'état reste le même! Donc: si au début l'état est $|\varphi_i\rangle$, où $|\varphi_i\rangle$ est un état propre de H_0 , à la fin d'une perturbation adiabatique, il est dans $|\tilde{\varphi}\rangle_i$, l'état i de H_{TOT} .

Donc: $\varphi_i(0) \rightarrow \varphi_i(t)$ et $E_i(0) \rightarrow E_i(t)$, où $\varphi_i(t)$ et $E_i(t)$ sont calculés avec la théorie des perturbations *indépendantes du temps* à partir de $[H_0 + W] |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$.

Une autre façon de voir ceci: on a

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}_{ni}(t) &= \left| b_n^{(1)}(t) \right|^2 = \frac{1}{(\hbar\omega_{ni})^2} \left| e^{i\omega_{ni}t} W_{ni}(t) - \left(\frac{dW_{ni}(t)}{dt} \right) \int_0^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} \right|^2 \\
 &= \frac{1}{(\hbar\omega_{ni})^2} \left| e^{i\omega_{ni}t} W_{ni}(t) - \left(\frac{dW_{ni}(t)}{dt} \right) \frac{1}{i\omega_{ni}} (e^{i\omega_{ni}t} - 1) \right|^2 \\
 &= \frac{1}{(\hbar\omega_{ni})^2} \left[|W_{ni}(t)|^2 - \frac{4}{\omega_{ni}} W_{ni}(t) \frac{dW_{ni}(t)}{dt} \sin \frac{\omega_{ni}t}{2} \cos \frac{\omega_{ni}t}{2} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{4}{\omega_{ni}^2} \left(\frac{dW_{ni}(t)}{dt} \right)^2 \sin^2 \frac{\omega_{ni}t}{2} \right].
 \end{aligned}$$

Le premier terme, $|W_{ni}(t)|^2$, correspond au cas où l'état ne change pas. En moyenne, $\langle \sin \frac{\omega_{ni}t}{2} \rangle = 0$ et $\langle \sin^2 \frac{\omega_{ni}t}{2} \rangle = \frac{1}{2}$. Donc, la probabilité que l'état change est

$$\frac{2}{\hbar^2 \omega_{ni}^4} \left| \frac{dW_{ni}(t)}{dt} \right|^2.$$

Mais: pour une perturbation adiabatique, ce terme est très petit \implies l'état reste le même.

Perturbations Brusques

On considère le cas opposé: qu'est-ce qui se passe si le système change soudainement? E.g. prenons un oscillateur harmonique dans l'état fondamental et mettons que la raideur du ressort change d'un facteur 2. Dans quel état est l'oscillateur après la perturbation?

On connaît les états propres et les énergies avant et après la perturbation:

$$H |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \quad (t < 0) \quad , \quad H' |\varphi'_n\rangle = E'_n |\varphi'_n\rangle \quad (t > 0) \quad .$$

À $t = 0$, $|\psi(0)\rangle = |\varphi_i\rangle$. Plus tard, à un temps t ,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n b_n e^{-iE'_n t/\hbar} |\varphi'_n\rangle \quad \Longrightarrow \quad |\psi(0)\rangle = \sum_n b_n |\varphi'_n\rangle \quad .$$

Donc: la probabilité qu'un système, au début dans $|\varphi_i\rangle$, se trouve plus tard dans l'état $|\varphi'_f\rangle$ est

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = |\langle \varphi'_f | \varphi_i \rangle|^2 \quad .$$

Pour que cette approximation ait du sens, il faut que $|\varphi_i\rangle$

- garde sa forme à $t = 0^+$,
- se trouve dans l'espace d'Hilbert engendré par les $|\varphi'_f\rangle$.

\implies cette approximation est approprié au cas d'une particule dans un puits infini où les murs sont agrandis soudainement d'un facteur 2, mais pas au cas où les murs sont raptissés d'un facteur 2.

Remarque: même une perturbation "indépendante" du temps est en fait dépendant du temps parce qu'elle est appliqué à $t = 0 \implies \exists$ une relation entre la théorie des perturbations indépendantes du temps et la théorie des perturbations dépendantes du temps.

Problème: on considère un hamiltonien H dont les états propres sont $|\phi_n\rangle$, avec énergies E_n . On suppose que les $|\phi_n\rangle$ sont non-dégénérés. Pour $t < 0$ l'état du système est $|\phi_i\rangle$. À $t = 0$ on applique une perturbation réelle $W(x)$, qui est indépendante du temps. Les états propres de $H' = H + W$ sont $|\phi'_n\rangle$, avec énergies E'_n . Il y a une correspondance 1-1 entre les $|\phi_n\rangle$ et les $|\phi'_n\rangle$, donnée par la théorie des perturbations indépendantes du temps.

(a) Calculer la probabilité de transition $P(\phi_i \rightarrow \phi_f, f \neq i)$ à l'ordre W^2 .

(b) Calculer la probabilité de transition $P(\phi_i \rightarrow \phi'_f, f \neq i)$ à l'ordre W^2 et montrer qu'elle diffère de la réponse en (a) par un facteur $4 \sin^2 \omega_{fi} t / 2$, où $\omega_{fi} = (E_f - E_i) / \hbar$.

(c) Si je vous avais demandé de trouver la probabilité de transition $P(\phi_i \rightarrow \phi'_i)$ à l'ordre W^2 , vous n'auriez pas pu donner la réponse correcte en utilisant seulement les formules déjà données. Quelle autre information faudrait-il pour calculer cette probabilité de transition à l'ordre W^2 ?

(a) Il y a deux façons de calculer $\mathcal{P}(\phi_i \rightarrow \phi_f)$: (i) la théorie des perturbations dépendantes du temps, (ii) perturbations brusques + la théorie des perturbations indépendantes du temps.

(i) À l'ordre 1, nous avons

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \lambda^2 \left| b_1^{(1)}(t) \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |W_{fi}|^2 \left| \int_0^t dt' e^{i\omega_{fi}t'} \right|^2 ,$$

où W_{fi} est indépendant du temps.

On peut évaluer l'intégrale. On trouve

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \cdot \frac{4 \sin^2 \omega_{fi}t/2}{\omega_{fi}^2} .$$

(ii) Après la perturbation, l'état du système est

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k b_k e^{-i\epsilon'_k t/\hbar} |\phi'_k\rangle$$

$$|\psi(0)\rangle = |\phi_i\rangle \implies |\psi(t)\rangle = \sum_k |\phi'_k\rangle \langle \phi'_k | \phi_i \rangle e^{-i\epsilon'_k t/\hbar} .$$

La probabilité de transition de $|\phi_i\rangle$ à $|\phi_f\rangle$: $\mathcal{P}_{i \rightarrow f}(t) = |\langle \phi_f | \psi(t) \rangle|^2$
(perturbations brusques), où

$$\langle \phi_f | \psi(t) \rangle = \sum_k \langle \phi_f | \phi'_k \rangle \langle \phi'_k | \phi_i \rangle e^{-i\epsilon'_k t / \hbar} .$$

Les états $|\phi'_k\rangle$ et énergies ϵ'_k sont reliés aux quantités non-perturbées par la théorie des perturbations indépendantes du temps:

$$|\phi'_k\rangle = |\phi_k\rangle + \sum_{m \neq k} \frac{\langle \phi_m | W | \phi_k \rangle}{\epsilon_k - \epsilon_m} |\phi_m\rangle , \quad \epsilon'_k = \epsilon_k + \langle \phi_k | W | \phi_k \rangle .$$

Alors (attention aux bras/kets!):

$$\langle \phi_f | \phi'_k \rangle = \delta_{fk} + \frac{\langle \phi_f | W | \phi_k \rangle}{\epsilon_k - \epsilon_f} , \quad \langle \phi'_k | \phi_i \rangle = \delta_{ki} + \frac{\langle \phi_k | W | \phi_i \rangle}{\epsilon_k - \epsilon_i} .$$

Donc,

$$\langle \phi_f | \phi'_k \rangle \langle \phi'_k | \phi_i \rangle = \delta_{if} (= 0) + \frac{\langle \phi_f | W | \phi_i \rangle}{\epsilon_i - \epsilon_f} \delta_{ki} + \frac{\langle \phi_f | W | \phi_i \rangle}{\epsilon_f - \epsilon_i} \delta_{fk} + O(W^2) .$$

Nous avons

$$\langle \phi_f | \psi(t) \rangle = \frac{\langle \phi_f | W | \phi_i \rangle}{\epsilon_i - \epsilon_f} \left[e^{-i\epsilon'_i t/\hbar} - e^{-i\epsilon'_f t/\hbar} \right].$$

Mais $|\langle \phi_f | \psi(t) \rangle|^2$ est déjà $O(W^2) \implies$ on peut mettre $\epsilon'_k = \epsilon_k$. Donc

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \left| e^{-i\epsilon_i t/\hbar} - e^{-i\epsilon_f t/\hbar} \right|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \cdot \frac{4 \sin^2 \omega_{fi} t/2}{\omega_{fi}^2}.$$

Même réponse qu'auparavant.

(b) La probabilité de transition à l'état final $|\phi'_f\rangle$: $|\langle \phi'_f | \psi(t) \rangle|^2$. Mais

$$\langle \phi'_f | \psi(t) \rangle = \langle \phi'_f | \phi_i \rangle e^{-i\epsilon'_f t/\hbar}.$$

Avec l'expression pour $|\phi'_f\rangle$ donnée par la théorie des perturbations indépendantes du temps, on a

$$\langle \phi'_f | \psi(t) \rangle = \delta_{if}(=0) + \frac{\langle \phi_f | W | \phi_i \rangle}{\epsilon_f - \epsilon_i}.$$

On obtient

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \left| \frac{\langle \phi_f | W | \phi_i \rangle}{\epsilon_f - \epsilon_i} e^{-i\epsilon'_f t \hbar} \right|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} .$$

Ca diffère de la réponse en (a) par le facteur $4 \sin^2 \omega_{fi} t / 2$.

(c) À $O(W)$, on a

$$\langle \phi'_i | = \langle \phi_i | + \sum_{m \neq i} \frac{\langle \phi_i | W | \phi_m \rangle}{\epsilon_i - \epsilon_m} \langle \phi_m | ,$$

ce qui implique $\langle \phi'_i | \phi_i \rangle = 1$ à cet ordre.

Pour trouver $\mathcal{P}_{i \rightarrow i'}$ à $O(W^2)$, il faudrait le développement de $\langle \phi'_i |$ en fonction des $\langle \phi_m |$ jusqu'à l'ordre $W^2 \implies \langle \phi'_i | \phi_i \rangle = 1 + O(W^2)$. Dans ce cas, on aurait

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow i'} = 1 + 2O(W^2) + O(W^4) .$$

Ondes Électromagnétiques

Équations de Maxwell sans sources:

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \cdot \vec{E} &= 0 & , & & \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0 , \\ \vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= 0 & , & & \vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} &= 0 .\end{aligned}$$

On peut décrire \vec{E} et \vec{B} en fonction des potentiels scalaire $U(\vec{r}, t)$ et vectoriel $\vec{A}(\vec{r}, t)$:

$$\begin{aligned}\vec{B} &= \vec{\nabla} \times \vec{A} & \implies & & \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0 , \\ \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} U & \implies & & \vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= 0 .\end{aligned}$$

Les deux autres équations sont compliquées:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \vec{\nabla}^2 U &= 0 , \\ \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \vec{\nabla}^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} U \right) &= 0 .\end{aligned}$$

Étant donnés \vec{A} et U , on peut décrire \vec{E} et \vec{B} uniquement. Mais l'inverse n'est pas vrai: étant donnés \vec{E} et \vec{B} , on ne peut pas trouver des potentiels uniques. \vec{A}' et U' satisfont aussi aux équations de Maxwell:

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\chi, \quad U \rightarrow U' = U - \frac{\partial\chi}{\partial t},$$

où χ est une fonction arbitraire. Ceci est *une transformation de jauge*.

On a donc *la liberté de jauge*: on peut choisir χ comme on veut. On choisit χ tel que $\vec{\nabla}^2\chi = -\vec{\nabla} \cdot \vec{A} \implies \vec{\nabla} \cdot \vec{A}' = 0$. Alors,

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \cdot \vec{A}' + \vec{\nabla}^2 U' = 0 \implies \vec{\nabla}^2 U' = 0.$$

On a donc $U' = 0$: c'est la seule solution qui a un bon comportement à $r = 0$ et à $r = \infty$. Cette jauge s'appelle *la jauge de radiation*.

On laisse tomber les primes. L'autre équation devient

$$-\vec{\nabla}^2 \vec{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = 0 .$$

Solution:

$$\vec{A} = \hat{\lambda} \left(A_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + A_0^* e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right) .$$

On choisit A_0 purement imaginaire. $\hat{\lambda}$ est la polarisation, \vec{k} est le vecteur d'onde et ω est la pulsation, qui satisfait à $\omega^2 = c^2 \vec{k}^2$.

Nous avons $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \implies \vec{k} \cdot \hat{\lambda} = 0$: \exists 2 polarisations.

Alors,

$$\begin{aligned} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} &= \hat{\lambda} \omega \left(i A_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} - i A_0^* e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right) \\ &= \hat{\lambda} E_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) , \\ \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} &= i \vec{k} \times \hat{\lambda} \left(A_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} - A_0^* e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right) \\ &= \hat{k} \times \hat{\lambda} B_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) . \end{aligned}$$

Ici, $E_0 = 2 i \omega A_0$ (réel) et $B_0 = E/c$ (réel).

On choisit un système de coordonnées droitier:

$$\hat{k} = \hat{y} , \quad \hat{\lambda} = \hat{z} , \quad \hat{k} \times \hat{\lambda} = \hat{x}$$
$$\implies \vec{E} = \hat{z} E_0 \cos(ky - \omega t) , \quad \vec{B} = \hat{x} B_0 \cos(ky - \omega t) .$$

On considère maintenant l'interaction de ces ondes électromagnétiques avec un système (e.g. l'atome d'hydrogène). L'Hamiltonien est

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + V(\vec{r}) - qU(\vec{r}, t) (= 0) \equiv H_0 + W .$$

Ici,

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) , \quad W = -\frac{q}{2m} \left[\vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) + \vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) \right] .$$

On a $\vec{p} \cdot \vec{A} = -i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{A}$ (opérateurs!) $= -i\hbar(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) (= 0) + \vec{A} \cdot (-i\hbar \vec{\nabla})$:

$$W = -\frac{q}{m} \vec{A} \cdot \vec{p} + \frac{q^2}{2m} \vec{A} \cdot \vec{A} .$$

Pour des champs faibles, on peut négliger le terme en A^2 (théorie des champs: correspond aux interactions à deux photons).

$$\implies W = -\frac{q}{m} \left(A_0 e^{i(ky-\omega t)} + A_0^* e^{-i(ky-\omega t)} \right) p_z .$$

Physique: si $\lambda \gg$ grandeur du système (e.g. a_0 pour un atome d'hydrogène), l'onde électromagnétique est à peu près indépendante de l'espace pour le système:

$$ky \simeq \frac{a_0}{\lambda} \ll 1 \implies e^{iky} \simeq 1 .$$

Avec cette approximation (dipolaire), l'onde électromagnétique est uniforme et varie dans le temps de façon sinusoïdale:

$$W \simeq \frac{q}{m} \frac{E_0}{\omega} \sin \omega t p_z .$$

Maintenant: l' e^- , dans l'état $|\varphi_i\rangle$, interagit avec cette onde et passe à l'état $|\varphi_f\rangle$. Quelles sont les propriétés de $|\varphi_f\rangle$? Nous avons (pour une perturbation $\sin \omega t$)

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 ,$$

avec $W_{fi} = \langle \varphi_f | W(x) | \varphi_i \rangle$, où $W(x) = (q/m)(E_0/\omega) p_z$.

On cherche $\langle \varphi_f | p_z | \varphi_i \rangle$. Truc:

$$\begin{aligned} [H_0, z] &= \left[\frac{\vec{p}^2}{2m}, z \right] + [V(\vec{r}), z] (= 0) \\ &= \frac{1}{2m} p_i [p_i, z] + \frac{1}{2m} [p_i, z] p_i = -i\hbar \frac{1}{m} p_z . \end{aligned}$$

Donc, $p_z = i(m/\hbar) [H_0, z]$.

$$\begin{aligned} \implies \langle \varphi_f | p_z | \varphi_i \rangle &= \frac{im}{\hbar} \langle \varphi_f | H_0 z - z H_0 | \varphi_i \rangle \\ &= \frac{im}{\hbar} (E_f - E_i) \langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle = im \omega_{fi} \langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle . \end{aligned}$$

L'élément de matrice $\langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle$ est plus familier. Si $\langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle \neq 0$, on a une *transition dipolaire électrique* (le plus intense, car c'est à plus bas ordre dans l'approximation).

Mais nous avons fait ce genre de calcul:

$$|\varphi_i\rangle = R_{n_i, l_i}(r) Y_{l_i, m_i}(\theta, \phi) \quad , \quad |\varphi_f\rangle = R_{n_f, l_f}(r) Y_{l_f, m_f}(\theta, \phi) \quad ,$$
$$z = r \cos \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{10}(\theta, \phi) \quad .$$

$\langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle$ comprend une intégrale sur tout l'espace. On applique la parité:

$$z \rightarrow -z \quad , \quad \varphi_i \rightarrow (-1)^{l_i} \varphi_i \quad , \quad \varphi_f \rightarrow (-1)^{l_f} \varphi_f \quad .$$

Donc, la parité de l'intégrand est $(-1)^{l_i + l_f + 1}$. Comme on veut qu'elle soit positive,

$$l_i + l_f = \text{entier impair} \quad .$$

Intégrale angulaire:

$$\int d\Omega Y_{l_f, m_f}^* Y_{10} Y_{l_i, m_i} \quad .$$

Cette intégrale est non-nulle si $l_f = l_i + 1, l_i, l_i - 1$. Mais si $l_f = l_i$, $l_i + l_f$ n'est pas un entier impair. Donc,

$$l_f = l_i \pm 1 \quad .$$

Intégrale angulaire: non-nulle si $m_f = m_i$. Mais si nous avons choisi $\vec{k} = \hat{x}$ (ou \hat{y}), on aurait trouvé que $W \sim Y_{11}$ ou Y_{1-1} . Alors, il faut que

$$m_f = m_i, \quad m_i \pm 1.$$

Ces conditions sur ℓ_f et m_f caractérisent des transitions dipolaires électriques.

On obtient d'autres transitions en gardant des termes d'ordre supérieur dans le développement de e^{iky} :

$$e^{iky} \simeq 1 + iky.$$

Le terme iky correspond à des transitions quadropolaire électrique et dipolaire magnétique (le rotationnel est non-nul).

À cet ordre,

$$\begin{aligned} W^{(1)} &= -\frac{q}{m} \left(A_0 (iky) e^{-i\omega t} + A_0^* (-iky) e^{i\omega t} \right) p_z \\ &= -\frac{q}{m} (ik) \left(A_0 e^{-i\omega t} - A_0^* e^{i\omega t} \right) yp_z = -\frac{q}{m} B_0 \cos \omega t yp_z. \end{aligned}$$

Il est plus utile d'écrire

$$\begin{aligned} W^{(1)} &= -\frac{q}{2m} B_0 \cos \omega t (yp_z - zp_y) - \frac{q}{2m} B_0 \cos \omega t (yp_z + zp_y) \\ &= -\frac{q}{2m} L_x B_0 \cos \omega t - \frac{q}{2mc} E_0 \cos \omega t (yp_z + zp_y) . \end{aligned}$$

Le premier terme correspond aux transitions dipolaires magnétiques, le deuxième aux transitions quadrupolaires électriques.

Remarque: le spin de la particule interagit avec le champ magnétique de l'onde électromagnétique: terme $-(q/m)\vec{S} \cdot \vec{B}$. Comme $\vec{B} = B_0\hat{x}$:

$$-\frac{q}{m} S_x B_0 \cos \omega t .$$

\implies le terme dipolaire magnétique total: $-(q/2m)(L_x + 2S_x)B_0 \cos \omega t$.
Mais: pour l'instant, on ne garde que le terme en L_x .

Transitions dipolaires magnétiques: plus faibles que les transitions dipolaires électriques d'un facteur a_0/λ . On a $L_x \sim L_+ + L_- \implies \ell_f = \ell_i, m_f = m_i \pm 1$. Si on avait choisi $\vec{B} = B_0\hat{z}$, on aurait trouvé $L_z \implies m_f = m_i$.

Règles de transition pour une transition dipolaire magnétique:

$$l_f = l_i , \quad m_f = m_i , \quad m_i \pm 1 .$$

Mais: si l'état initial est $|0\ 0\rangle$, l'action de L_z , L_+ et L_- donnent 0. Donc: il n'y a pas de transitions $0 \rightarrow 0$ avec l'émission d'un seul photon.

Transitions quadropolaires électriques: aussi plus faibles que les transitions dipolaires électriques d'un facteur a_0/λ . Il faut calculer:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_f | (y p_z + p_y z) | \varphi_i \rangle &= \frac{im}{\hbar} \langle \varphi_f | (y [H_0, z] + [H_0, y] z) | \varphi_i \rangle \\ &= \frac{im}{\hbar} \langle \varphi_f | y H_0 z - y z H_0 + H_0 y z - y H_0 z | \varphi_i \rangle \\ &= \frac{im}{\hbar} (E_f - E_i) \langle \varphi_f | y z | \varphi_i \rangle = im \omega_{fi} \langle \varphi_f | y z | \varphi_i \rangle . \end{aligned}$$

Alors,

$$\langle \varphi_f | W_{QE} | \varphi_i \rangle = -i \frac{q}{2c} \omega_{fi} \langle \varphi_f | y z | \varphi_i \rangle E_0 \cos \omega t .$$

Mais: yz est un élément du tenseur du moment quadrupolaire électrique: rappel:

$$T_2^{(2)} = T_1^{(1)} T_1^{(1)},$$

$$T_1^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[T_1^{(1)} T_0^{(1)} + T_0^{(1)} T_1^{(1)} \right],$$

etc.

Mais $T_0^{(1)} \sim z$, $T_1^{(1)}$ et $T_{-1}^{(1)}$ sont des combinaisons linéaires de x et y .
Donc: yz est une combinaison linéaire de $Y_{2\ 1}$ et $Y_{2\ -1} \implies \ell = 2!$

L'élément de matrice $\langle \varphi_f | yz | \varphi_i \rangle$ comprend une partie angulaire:

$$\int d\Omega Y_{\ell_f, m_f}^* Y_{2\ \pm 1} Y_{\ell_i, m_i}.$$

On applique la parité:

$$yz \rightarrow +yz, \quad Y_{\ell_i, m_i} \rightarrow (-1)^{\ell_i} Y_{\ell_i, m_i}, \quad Y_{\ell_f, m_f} \rightarrow (-1)^{\ell_f} Y_{\ell_f, m_f}.$$

La parité de l'intégrand est $(-1)^{\ell_i + \ell_f}$. Comme on veut qu'elle soit positive, $\ell_i + \ell_f =$ entier pair.

L'addition du moment angulaire $\implies l_f = l_i \pm 2, l_i \pm 1, l_i$. Mais $l_i \pm 1$ n'est pas permis à cause de la parité. Donc

$$l_f = l_i \pm 2, l_i .$$

La partie $\Delta l = 2$ est due purement à la transition quadrupolaire électrique.

De l'intégrale angulaire, on a $m_f = m_i \pm 1$. Mais si on avait choisi nos directions autrement on aurait trouvé les opérateurs xy , etc. Alors

$$m_f = m_i \pm 2, m_i \pm 1, m_i .$$

Ce sont les règles de transition pour une transition quadrupolaire électrique.

Une autre façon d'analyser les ondes électromagnétique: utile pour la règle d'or de Fermi. Nous avons utilisé la théorie des perturbations dépendantes du temps avec

$$W = -\frac{q}{2m} \left(\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p} \right) ,$$

où nous avons négligé le terme en A^2 .

On a $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$. En utilisant $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ (choix de jauge), on a $\vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p}$. L'élément de matrice $\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle$ comprend deux termes:

$$-\frac{q}{m} \int d\vec{r} \varphi_f^2 \vec{A} \cdot \vec{p} \varphi_i , \quad -\frac{q}{m} \int d\vec{r} \varphi_f^2 \vec{p} \cdot \vec{A} \varphi_i .$$

Or, dans la théorie des champs (QED), on quantifie le champ électromagnétique. On associe \vec{A} avec la création d'un photon d'énergie $\hbar\omega$. Alors, $\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle$ correspond à deux termes différents:

$$\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle = \begin{cases} -(q/m) \langle \varphi_f; \hbar\omega | \vec{p} | \varphi_i \rangle & (i) , \\ -(q/m) \langle \varphi_f | \vec{p} | \varphi_i; \hbar\omega \rangle & (ii) . \end{cases}$$

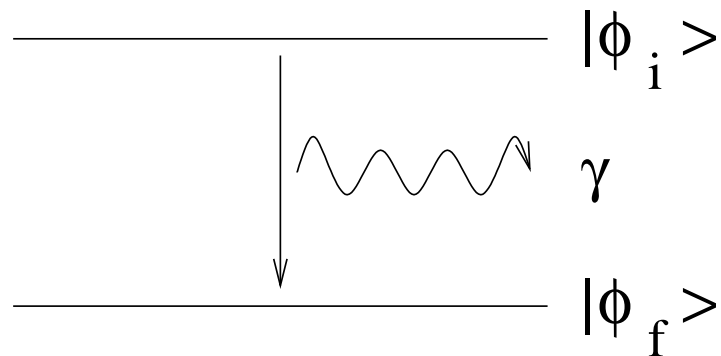
(i) correspond à l'émission d'un photon par le système; (ii) correspond à l'absorption d'un photon par le système. Les taux d'émission et absorption sont égaux.

Nous avons aussi

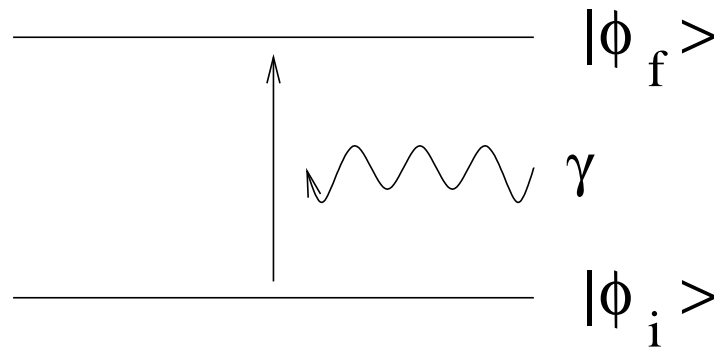
$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 .$$

On voit qu'il y a deux résonances: $\omega = -\omega_{fi}$ et $\omega = +\omega_{fi}$.

Si $\omega = -\omega_{fi} \implies$ l'énergie de $|\varphi_f\rangle$ est plus petite que l'énergie de $|\varphi_i\rangle$. Ceci correspond à l'émission d'un photon:



Par contre, si $\omega = +\omega_{fi} \implies$ l'énergie de $|\varphi_f\rangle$ est plus grande que l'énergie de $|\varphi_i\rangle$. Ceci correspond à l'absorption d'un photon:



On avait

$$\vec{A} = \hat{\lambda} \left(A_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} + A_0^* e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \right) = \vec{A}_+ + \vec{A}_- ,$$

où

$$\vec{A}_+ \equiv \hat{\lambda} A_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} , \quad \vec{A}_- \equiv \hat{\lambda} A_0^* e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} .$$

Donc, \vec{A}_+ et \vec{A}_- correspondent respectivement à l'absorption et à l'émission d'un photon, associés aux termes $e^{-i\omega t}$ et $e^{i\omega t}$. On trouve ces mêmes termes en théorie des champs.

Coefficients d'Einstein

Si le système possède deux états, $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$, nous avons vu que la transition $|\varphi_i\rangle \rightarrow |\varphi_f\rangle$ peut se faire par l'absorption d'un photon. On peut avoir aussi $|\varphi_f\rangle \rightarrow |\varphi_i\rangle$ avec l'émission d'un photon. Il y a deux façons de produire ce dernier processus: émission stimulée (en présence d'un champ électromagnétique, avec $\omega = \omega_{fi}$) ou émission spontanée. L'émission spontanée est une propriété du système, due à la quantification des ondes électromagnétiques.

On considère la transition $|\varphi_k\rangle \rightarrow |\varphi_l\rangle$ ($E_{\varphi_k} > E_{\varphi_l}$), avec émission d'un photon d'énergie $h\nu$. Le taux d'émission stimulée est proportionnel au nombre d'atomes N_k et au nombre de photons de fréquence ν dans le champ électromagnétique. Le nombre de photons est proportionnel à la densité en énergie des photons, $u(\nu)$. Par contre, le taux d'émission spontanée implique seulement le nombre d'atomes.

Le taux total est

$$W_{kl} = [A_{kl} + B_{kl}u(\nu)] N_k = w_{kl} N_k ,$$

où w_{kl} est le taux de transition par atome. A_{kl} et B_{kl} sont les *coefficients d'Einstein*.

La transition inverse, $|\varphi_l\rangle \rightarrow |\varphi_k\rangle$, ne peut se faire que par l'absorption d'un photon. Le taux est

$$W_{lk} = B_{lk}u(\nu)N_l = w_{lk}N_l .$$

En équilibre, les deux taux sont égaux: $W_{kl} = W_{lk}$. Ceci implique que

$$\frac{N_l}{N_k} = \frac{A_{kl} + B_{kl}u(\nu)}{B_{lk}u(\nu)} .$$

En mécanique statistique, N_l et N_k sont donnés par leurs distributions de Boltzmann: $N_i \sim \exp(-E_i/k_B T)$. Donc, on a

$$\frac{N_l}{N_k} = e^{-(E_l - E_k)/k_B T} = e^{h\nu/k_B T} \implies u(\nu) = \frac{A_{kl}}{B_{lk}e^{h\nu/k_B T} - B_{kl}} .$$

Quel est B_{kl} ? On utilise nos résultats pour les ondes électromagnétiques. Avec l'approximation dipolaire électrique, on a

$$\mathcal{P}_{kl} = \frac{q^2}{4\hbar^2} \left(\frac{\omega_{kl}}{\omega} \right)^2 |\langle \varphi_k | z | \varphi_l \rangle|^2 E_0^2 F(t, \omega - \omega_{kl}) .$$

Mais $(\omega_{kl})^2 = (\omega_{lk})^2$. De plus, $|\langle \varphi_k | z | \varphi_l \rangle| = |\langle \varphi_l | z | \varphi_k \rangle|$. Et $F(t, \omega - \omega_{lk})$ donne la même probabilité que $F(t, \omega - \omega_{lk})$ (mais dans l'autre direction). Donc, on a

$$B_{kl} = B_{lk} .$$

Alors,

$$u(\nu) = \frac{A/B}{e^{h\nu/k_B T} - 1} .$$

Mais, rappel: la radiation du corps noir. En mécanique quantique, la loi de Planck:

$$u(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} .$$

Alors, on reproduit ce résultat, avec

$$\frac{A}{B} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} .$$

La Règle d'Or de Fermi

Nous avons considéré la transition $|\varphi_i\rangle \rightarrow |\varphi_f\rangle$, où $|\varphi_f\rangle$ fait partie du spectre discret de H_0 . Qu'est-ce qui se passe si $|\varphi_f\rangle$ fait partie du spectre continu de H_0 ?

Dans ce cas, il n'y a pas d'état $|\varphi_f\rangle$ bien défini au temps t (principe d'incertitude) $\implies |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2$ est une *densité de probabilité* \implies il faut intégrer sur un ensemble d'états finaux.

E.g. la diffusion de particules de spin 0 et de masse m d'un potentiel $W(\vec{r})$. Au temps t , on peut développer $|\psi(t)\rangle$ en fonction d'états d'impulsion bien définie $|\vec{p}\rangle$, avec énergie $E = \vec{p}^2/2m$. Les $|\vec{p}\rangle$ sont des ondes planes:

$$\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} .$$

La densité de probabilité associée avec une mesure de l'impulsion est

$$|\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2 .$$

On veut mesurer $\vec{p}_f \implies$ on utilise un détecteur. Mais ce détecteur (i) a une largeur angulaire finie, (ii) a une résolution finie en énergie. Donc il détecte des particules dans un angle solide $d\Omega_f$ autour de \vec{p}_f et avec une résolution en énergie δE_f autour de $E_f = \vec{p}_f^2/2m$.

Donc, la probabilité d'obtenir un signal du détecteur est

$$\delta P(\vec{p}_f, t) = \int_{\vec{p} \in D_f} d^3p |\langle \vec{p} | \psi(t) \rangle|^2 ,$$

où D_f est le domaine comprenant $d\Omega_f$ et δE_f .

Si on veut mesurer l'énergie, il faut faire un changement de variables:

$$d^3p = p^2 dp d\Omega = \rho(E) dE d\Omega .$$

Ici, $\rho(E)$ est la *densité d'états finaux*. Dans ce cas, $E = p^2/2m$, donc

$$\rho(E) = p^2 \frac{dp}{dE} = 2mE \frac{2m}{2p} = \frac{2m^2 E}{\sqrt{2mE}} = m\sqrt{2mE} .$$

Alors, la probabilité de trouver une particule avec énergie final E_f est

$$\delta P(E_f, t) = \int_{\Omega \in \delta\Omega_f, E \in \delta E_f} d\Omega dE \rho(E) |\langle \vec{p} | \psi(t) \rangle|^2 .$$

Cas général: \exists des nombres quantiques continus α caractérisant les états propres de H_0 , avec

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha') .$$

Au temps t , le système est dans l'état $|\psi(t)\rangle$. Quelle est la probabilité $\delta P(\alpha_f, t)$ de trouver le système avec un ensemble donné de tels paramètres α_f ?

Ca veut dire qu'on trouve l'ensemble d'états avec $\alpha \in D_f$, où D_f est le domaine de valeurs de α , centré à α_f :

$$\delta P(\alpha_f, t) = \int_{\alpha \in D_f} d\alpha |\langle \vec{p} | \psi(t) \rangle|^2 .$$

Il est utile de séparer α en deux composantes: l'énergie, E , et les autres valeurs continues, β :

$$d\alpha = \rho(\beta, E) d\beta dE .$$

(Souvent, $\rho(\beta, E)$ dépend seulement de E .) Donc,

$$\delta P(\alpha_f, t) = \int_{\beta \in \delta\beta_f, E \in \delta E_f} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle \beta, E | \psi(t) \rangle|^2 .$$

Maintenant: on suppose que l'état initial est $|\varphi_i\rangle$, faisant partie du spectre discret. On suppose aussi que la perturbation prend la forme

$$\widehat{W}(t) = \widehat{W} \sin \omega t \quad \text{ou} \quad \widehat{W}(t) = \widehat{W} \cos \omega t ,$$

Tous les calculs d'auparavant sont bons, même si l'état final fait partie du spectre continu (sauf qu'il faut des intégrales).

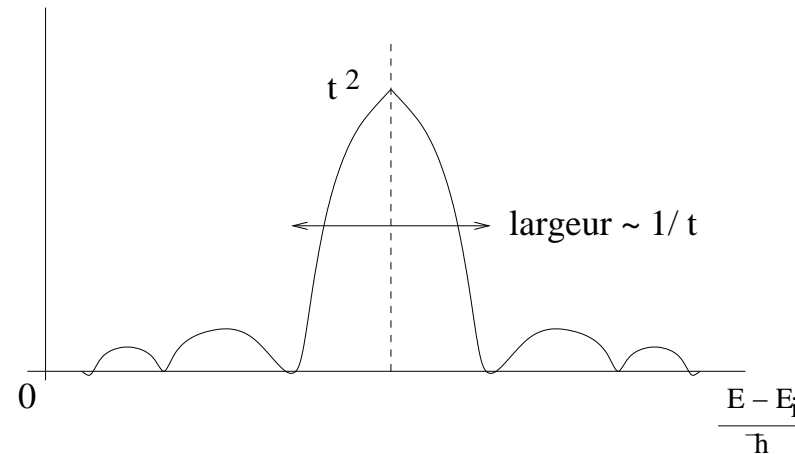
E.g. perturbation constante: nous avons

$$\mathcal{P}_{fi}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} F(t, \omega_{fi}) \quad \text{où} \quad F(t, \omega_{fi}) = \left[\frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}/2} \right]^2 .$$

Maintenant,

$$\delta P(\varphi_i, \alpha_f, t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\beta \in \delta\beta_f, E \in \delta E_f} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2 F \left(t, \frac{E - E_i}{\hbar} \right) .$$

$$F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right):$$



Lorsque $t \rightarrow \infty$, la largeur $\rightarrow 0$, la hauteur $\rightarrow \infty$. Ça a l'air d'une fonction δ . En fait, on peut démontrer que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) = \pi t \delta\left(\frac{E - E_i}{2\hbar}\right) = 2\pi\hbar t \delta(E - E_i).$$

Si on suppose que t est suffisamment grand qu'on peut négliger la variation de $\rho(\beta, E) |\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2$ avec l'énergie, on peut remplacer $F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right)$ par une fonction δ .

On n'intègre pas sur $\delta\beta_f$. Alors, si $E_i \in \delta E_f$,

$$\delta P(\varphi_i, \alpha_f, t) = \delta\beta_f \frac{2\pi}{\hbar} t |\langle \beta_f, E_f = E_i | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i)$$

Bien sûr, si $E_i \notin \delta E_f$, $\delta P(\varphi_i, \alpha_f, t) = 0$.

Rappel: si $|\varphi_f\rangle$ faisait partie du spectre discret, la perturbation pouvait induire de transitions entre états de la même énergie (dégénérescence). Ici, on trouve un résultat similaire pour le spectre continu. On introduit $w(\varphi_i, \alpha_f)$: la probabilité de transition par unité de temps et par unité d'intervalle de β_f :

$$w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{1}{\delta\beta_f} \frac{d}{dt} \delta P(\varphi_i, \alpha_f, t) .$$

$$\implies w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \beta_f, E_f = E_i | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i) .$$

Ceci est *la règle d'or de Fermi*.

Remarque: si la perturbation n'est pas constante, mais sinusoïdale, dans le cas du spectre discret, nous avons des résonances à $\omega = \omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$. Donc, $E_f = E_i + \hbar\omega$. Pour le spectre continu, c'est pareil:

$$w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{\pi}{2\hbar} |\langle \beta_f, E_f = E_i + \hbar\omega | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i + \hbar\omega) .$$

Voici une autre dérivation de la règle d'or de Fermi, sous guise de problème. On considère une particule dans l'état lié $|\varphi_i\rangle$. On suppose que cette particule est ionisée. Quel est le taux d'ionisation? On suppose une perturbation sinusoïdale.

État final: particule libre, décrite par une onde plane. Comment est-ce qu'on traite les ondes planes? On a $\psi_f = A e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$, où A est la constante de normalisation. On peut utiliser la normalisation avec fonction δ : $\langle\vec{p}'|\vec{p}\rangle = \delta(\vec{p}' - \vec{p})$. Alternatif: on peut imaginer que le problème est dans une boîte de côté L (on prendra $L \rightarrow \infty$ à la fin). Normalisation:

$$\int d^3r \psi_f^* \psi_f = 1 \implies |A|^2 = \frac{1}{L^3} \implies A = \frac{1}{L^{3/2}}.$$

De plus, on impose des conditions périodiques à la frontière:

$\psi(0) = \psi(L) \implies \vec{k} = (2\pi/L)\vec{n}$, où $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$ et n_x, n_y et n_z sont des entiers. Donc la normalisation en boîte a l'effet de changer les valeurs continues de \vec{k} en valeurs discrètes:

$$\psi_f = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\frac{2\pi}{L}\vec{n}\cdot\vec{r}}.$$

Maintenant: comment traite-t-on la densité d'états finaux avec cette normalisation? Rappel: l'état final n'est pas bien défini. Comme le détecteur a une résolution finie, "l'état final" comprend plusieurs états ($E \pm \Delta E$, $\Omega \pm \Delta\Omega$, ou $\vec{p} \pm \Delta\vec{p}$). Donc, on ne cherche pas $\mathcal{P}_{i \rightarrow f}$, mais plutôt $\sum \text{états finaux } \mathcal{P}_{i \rightarrow f}$.

La probabilité $\mathcal{P}_{i \rightarrow f}$ dépend de l'impulsion. Donc, ce n'est pas constant à l'intérieur de la sommation. Mais: on divise Δp en petites parties, ϵ_p . Pour ϵ_p suffisamment petit, $\mathcal{P}_{i \rightarrow f}$ est essentiellement constant sur cet intervalle. Donc on peut écrire

$$\sum_{\text{états finaux}} \mathcal{P}_{i \rightarrow f} \rightarrow \sum_{\epsilon_p} \epsilon_p \frac{\# \text{ états}}{\epsilon_p} \mathcal{P}_{i \rightarrow f} = \sum_{\Delta k} \Delta k \frac{\# \text{ états}}{\Delta k} \mathcal{P}_{i \rightarrow f} .$$

Le facteur $\# \text{ états} / \Delta k$ est la densité d'états finaux.

Pour la normalisation en boîte, on a

$$d^3 k = \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 dn_x dn_y dn_z \implies dn_x dn_y dn_z = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 d^3 k .$$

Le facteur $(L/2\pi)^3$ est la densité d'états finaux.

Nous avons

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow f} = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{4\hbar^2} |\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle|^2 F \left(t, \frac{E_f - E_i}{\hbar} \right) .$$

(Le facteur $1/4\hbar^2$ est pour une perturbation $\sin \omega t$.) On peut remplacer

$$F \left(t, \frac{E_f - E_i}{\hbar} \right) \rightarrow 2\pi\hbar t \delta(E_f - (E_i + \hbar\omega)) . \text{ Alors}$$

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow f} = \frac{\pi}{2\hbar} t |\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle|^2 \delta(E_f - (E_i + \hbar\omega)) .$$

$\mathcal{P}_{i \rightarrow f}$ est une densité de probabilité. On divise par t afin d'obtenir la densité de probabilité par unité de temps, \bar{w}_{if} . Pour obtenir w_{if} , la probabilité de transition par unité de temps (le taux), il faut intégrer sur les états finaux:

$$w_{if} = \int d\vec{n} \bar{w}_{if} = \frac{\pi}{2\hbar} \int |\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle|^2 \delta(E_f - (E_i + \hbar\omega)) \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 d^3k .$$

Nous avons $d^3k = k^2 dk d\Omega$. Pour une particule libre, $E_f = \hbar^2 k^2 / 2m$

$$\implies k^2 dk = \frac{m\sqrt{2mE_f}}{\hbar^3} dE_f .$$

Alors,

$$w_{if} = \frac{\pi}{2\hbar} \int |\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(E_f) d\Omega ,$$

où

$$\rho(E) = \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 m\sqrt{2mE} .$$

Nous avons essentiellement redérivé la règle d'or de Fermi, mais pour une particule finale libre.

Point: l'état final $|\varphi_f\rangle$ est une particule libre. Le facteur $|\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle|^2$ est proportionnel à $1/L^3$. Mais $\rho(E) \sim L^3$. Les facteurs de L s'annulent \implies la normalisation en boîte disparaît.

Problème/application: un proton est dans un puits de potentiel de rayon r_0 , dans l'état $1s$. Il interagit avec une onde électromagnétique et est ionisé. Quel est le taux d'ionisation? Utilisez l'approximation dipolaire.

État initial (approximation):

$$|\varphi_i\rangle = R(r) Y_{00}(\theta, \phi) ,$$

où $R(r)$ est constant pour $r < r_0$, 0 ailleurs. L'état final est une onde plane. On utilise la normalisation en boîte:

$$|\varphi_f\rangle = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} .$$

Nous avons dérivé

$$w_{if} = \frac{\pi}{2\hbar} \int |\langle\varphi_f| W |\varphi_i\rangle|^2 \rho(E_f) d\Omega , \quad \rho(E) = \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 m\sqrt{2mE} ,$$

avec $E_f = E_i + \hbar\omega$. Il s'agit maintenant de calculer $|\langle\varphi_f| W |\varphi_i\rangle|$.

On choisit $\hat{k} = \hat{z}$:

$$W_{DE} = \frac{q}{m} \frac{E_0}{\omega} \sin \omega t p_z .$$

(On a inclut le facteur $\sin \omega t$ dans l'expression pour w_{if} .)

Nous avons vu que $\langle \varphi_f | p_z | \varphi_i \rangle = im \omega_{fi} \langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle$. Donc,

$$\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle = iqE_0 \langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle .$$

Il faut calculer cette intégrale, avec

$$z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{10}(\theta, \phi) , \quad |\varphi_i\rangle = \sqrt{\frac{3}{r_0^3}} Y_{00}(\theta, \phi) , \quad |\varphi_f\rangle = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} .$$

(Nous avons normé l'état $|\varphi_i\rangle$.)

Astuce: on développe $|\varphi_f\rangle$ en fonction des fonctions de Bessel:

$$|\varphi_f\rangle = \frac{4\pi}{L^{3/2}} \sum_{\ell, m} i^\ell j_\ell(kr) Y_{\ell, m}^*(\hat{k}) Y_{\ell, m}(\theta, \phi) .$$

Il faut calculer

$$\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle = \frac{4\pi}{L^{3/2}} iqE_0 \sqrt{\frac{3}{r_0^3}} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{\ell, m} i^\ell Y_{\ell, m}^*(\hat{k}) \times \\ \int d^3r j_\ell(kr) Y_{\ell, m}^*(\theta, \phi) r Y_{10}(\theta, \phi) Y_{00}(\theta, \phi) .$$

Or, $\int d^3r = \int r^2 dr d\Omega$. Intégrale angulaire:

$$\int d\Omega Y_{\ell, m}^*(\theta, \phi) Y_{10}(\theta, \phi) Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \delta_{\ell 1} \delta_{m 0} .$$

On définit

$$I \equiv \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int_0^{r_0} dr r^3 j_1(kr) .$$

$$\Rightarrow \langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle = \frac{4\pi}{L^{3/2}} iqE_0 \sqrt{\frac{3}{r_0^3}} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} (-i) Y_{10}^*(\hat{k}) I .$$

Alors,

$$|\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle|^2 = \frac{1}{L^3} (4\pi)^2 \frac{3q^2 E_0^2}{r_0^3} I^2 \cos^2 \theta_k .$$

$$\implies w_{if} = \frac{\pi}{2\hbar} \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 m \sqrt{2mE_f} \frac{3}{L^3} (4\pi)^2 \frac{q^2 E_0^2}{r_0^3} I^2 \int d\Omega_k \cos^2 \theta_k .$$

Dernière intégrale: $= 4\pi/3$, alors

$$w_{if} = \frac{4\pi}{\hbar^4} m \sqrt{2mE_f} \frac{q^2 E_0^2 I^2}{r_0^3} .$$

(Si on avait pris une autre direction pour \hat{k} , on aurait trouvé la même réponse, mais une intégrale différente sur $d\Omega_k$.)

Temps de Vie

Nous avons vu que, pour des états discrets, pour t grand, le système oscille entre les deux états (en résonance). Qu'est-ce qui se passe si on a un état discret couplé à un état faisant partie du spectre continu? Le système oscille-t-il entre les deux niveaux? Non: dans ce cas la transition est irréversible. C'est la désintégration de l'état initial avec un temps de vie fini. Ceci est un problème physique important.

Afin de voir ceci, on utilise un modèle simple. (Les conclusions ne changent pas si on change de modèle.) Le système contient *un* état discret — $H_0 |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle$ — et un spectre d'états continus — $H_0 |\alpha\rangle = E |\alpha\rangle$ — où E prend toutes les valeurs positives, y compris E_i .

On suppose que les états $|\alpha\rangle$ possèdent plusieurs paramètres continus; on les sépare en β et E : $d\alpha = \rho(\beta, E) d\beta dE$. On a

$$\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle = 1, \quad \langle \varphi_i | \alpha \rangle = 0, \quad \langle \alpha' | \alpha \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$$
$$\implies |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| + \int d\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| = 1.$$

On suppose que (i) la perturbation est indépendante du temps et (ii) les éléments de matrice de W sont non-nuls seulement pour $\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle$, i.e. les états discrets sont couplés aux états continus ($\langle \varphi_i | W | \varphi_i \rangle = \langle \alpha' | W | \alpha \rangle = 0$).

Nous avons

$$\delta P(\varphi_i, \alpha, t) = \int d\beta \frac{2\pi}{\hbar} t |\langle \beta, E_f = E_i | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta, E_f = E_i) \equiv \Gamma t .$$

Ceci est la probabilité de transition de $|\varphi_i\rangle$ à $|\alpha\rangle$. La probabilité de rester dans l'état $|\varphi_i\rangle$ est donc $\mathcal{P}_{ii} = 1 - \Gamma t$.

Or, la théorie des perturbations n'est valide que si $t \ll 1/\Gamma$. Mais il y a une deuxième condition. Rappel: nous avons aussi

$$\delta P(\varphi_i, \alpha, t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\beta \in \delta\beta, E \in \delta E} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2 F \left(t, \frac{E - E_i}{\hbar} \right) ,$$

$$F \left(t, \frac{E - E_i}{\hbar} \right) = \left[\frac{\sin(E - E_i)t/\hbar}{(E - E_i)/\hbar} \right] .$$

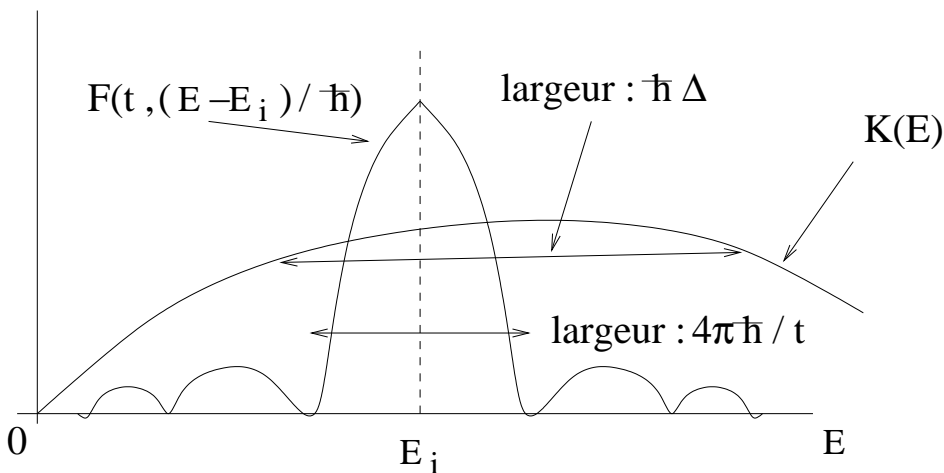
Donc,

$$\delta P(\varphi_i, \alpha, t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE F \left(t, \frac{E - E_i}{\hbar} \right) K(E),$$

$$K(E) = \int d\beta |\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta, E).$$

Auparavant, nous avons remplacé $F \left(t, \frac{E - E_i}{\hbar} \right) \rightarrow 2\pi\hbar t \delta(E - E_i)$. Mais ceci est vrai seulement pour $t \rightarrow \infty$, ce qui est inconsistant avec $t \ll 1/\Gamma$. Alors, strictement parlant, on ne peut pas prendre $t \rightarrow \infty$.

Mais: on peut toujours remplacer $F \left(t, \frac{E - E_i}{\hbar} \right)$ par une fonction δ si certaines conditions sont satisfaites. Examinons $K(E)$ et $F \left(t, \frac{E - E_i}{\hbar} \right)$:



la largeur de $F \left(t, \frac{E - E_i}{\hbar} \right)$ est $4\pi\hbar/t$; on appelle $\hbar\Delta$ la largeur de $K(E)$.

Donc: si t est suffisamment grand que la largeur $4\pi\hbar/t$ est petite, $F\left(t, \frac{E-E_i}{\hbar}\right)$ agit comme une fonction δ . Il faut que $4\pi\hbar/t \ll \hbar\Delta \implies t \gg 1/\Delta$ (on laisse tomber le 4π).

Dans ce cas,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE F\left(t, \frac{E-E_i}{\hbar}\right) K(E) &\rightarrow \frac{2\pi}{\hbar} t \int_0^\infty dE \delta(E-E_i) K(E) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} t K(E=E_i) = \Gamma t . \end{aligned}$$

Donc, les deux conditions sont satisfaites si $\Delta \gg \Gamma$. Desormais, on suppose que ceci est vrai.

Quand on n'avait que des états discrets,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle .$$

Ici, on a

$$|\psi(t)\rangle = b_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} |\varphi_i\rangle + \int d\alpha b(\alpha, t) e^{-iE t/\hbar} |\alpha\rangle .$$

On utilise l'équation de Schroedinger: $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = [H_0 + W] |\psi(t)\rangle$:

$$\begin{aligned}
 & i\hbar \dot{b}_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} |\varphi_i\rangle + b_i(t) E_i e^{-iE_i t/\hbar} |\varphi_i\rangle \\
 & + i\hbar \int d\alpha' \dot{b}(\alpha', t) e^{-iE t/\hbar} |\alpha'\rangle + \int d\alpha b(\alpha, t) E e^{-iE t/\hbar} |\alpha\rangle \\
 & = b_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} E_i |\varphi_i\rangle + b_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} W |\varphi_i\rangle \\
 & + \int d\alpha b(\alpha, t) e^{-iE t/\hbar} E |\alpha\rangle + \int d\alpha b(\alpha, t) e^{-iE t/\hbar} W |\alpha\rangle .
 \end{aligned}$$

Les termes proportionnels à E_i et E (termes # 2, 4, 5, 7) s'annulent les deux côtés.

On multiplie par $\langle \varphi_i |$. On utilise les faits que $\langle \varphi_i | W | \varphi_i \rangle = 0$, $\langle \varphi_i | \alpha \rangle = 0$

$$\implies i\hbar \dot{b}_i(t) = \int d\alpha e^{i(E_i - E)t/\hbar} b(\alpha, t) \langle \varphi_i | W | \alpha \rangle .$$

On multiplie par $\langle \alpha |$. On utilise les faits que $\langle \alpha | W | \alpha' \rangle = 0$, $\langle \alpha | \varphi_i \rangle = 0$

$$\implies i\hbar \dot{b}(\alpha, t) = e^{i(E - E_i)t/\hbar} \langle \alpha | W | \varphi_i \rangle b_i(t) .$$

Les conditions initiales sont $b_i(0) = 1$, $b(\alpha, 0) = 0$.

2^{me} équation:

$$b(\alpha, t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i(E-E_i)t'/\hbar} \langle \alpha | W | \varphi_i \rangle b_i(t') .$$

Insérer dans la première équation:

$$\begin{aligned} \dot{b}_i(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \int d\alpha \int_0^t dt' e^{i(E_i-E)(t-t')/\hbar} |\langle \varphi_i | W | \alpha \rangle|^2 b_i(t') \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE \int_0^t dt' e^{i(E_i-E)(t-t')/\hbar} K(E) b_i(t') . \end{aligned}$$

Jusqu'ici: exact. Afin de résoudre: il faut une approximation.

(i) Approximation de temps court. Si t n'est pas trop grand, $b_i(t') \simeq b_i(0) = 1$. Alors,

$$\dot{b}_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE \int_0^t dt' K(E) e^{i(E_i-E)(t-t')/\hbar} .$$

On considère l'exponentiel lorsque $t \rightarrow \infty$. Si $E \neq E_i$, l'exponentiel oscille \implies la moyenne est 0. Si $E = E_i$, on obtient ∞ . C'est comme une fonction $\delta(E - E_i)$. En fait,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t d\tau e^{i(E_i - E)\tau/\hbar} = \hbar \left[\pi \delta(E - E_i) + i \mathcal{P} \frac{1}{E_i - E} \right].$$

Rappel: pas besoin de $t \rightarrow \infty$. Il faut seulement que $t \gg \hbar \Delta$ (la largeur de $K(E)$).

$$\implies \dot{b}_i(t) = -\frac{\pi}{\hbar} K(E = E_i) - \frac{i}{\hbar} \mathcal{P} \int_0^\infty dE \frac{K(E)}{E_i - E} \equiv -\frac{\Gamma}{2} - i \frac{\delta E}{\hbar}.$$

$$\implies b_i(t) = 1 - \left(\frac{\Gamma}{2} + i \frac{\delta E}{\hbar} \right) t.$$

Ceci est valide pour $b_i(t') \simeq b_i(0) \implies \Gamma/2, \delta E/\hbar$ sont des perturbations. Donc, il faut que $t \ll 1/\Gamma, \hbar/\delta E$.

$$\implies \mathcal{P}_{ii}(t) = 1 - \Gamma t.$$

(ii) Autre approximation. On a

$$\dot{b}_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE \int_0^t dt' e^{i(E_i - E)(t - t')/\hbar} K(E) b_i(t').$$

On considère l'intégrale sur E :

$$-\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE K(E) e^{i(E_i - E)(t - t')/\hbar}.$$

En général, $K(E)$ est une fonction qui varie lentement avec E (largeur $\hbar\Delta$). Par contre, la période de l'exponentiel est $2\pi\hbar/(t - t')$. Si t est différent de t' , la période est petite \implies l'exponentiel oscille rapidement, sa moyenne est $\simeq 0$.

\implies L'intégrale est grande seulement pour $t - t' \simeq 0$, négligeable pour $t - t' \gg 1/\Delta$. Donc, $\dot{b}_i(t)$ dépend seulement des valeurs de $b_i(t)$ juste avant t . Ceci est vrai $\forall t$!

$$\implies \dot{b}_i(t) = b_i(t) \left[-\frac{\Gamma}{2} - i \frac{\delta E}{\hbar} \right].$$

Solution:

$$b_i(t) = e^{-\Gamma t/2} e^{-i\delta E t/\hbar} .$$

Valide pour t grand (tant que $\Delta \gg \Gamma, \delta E/\hbar$).

De plus, nous avons

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{b}(\alpha, t) &= e^{i(E-E_i)t/\hbar} \langle \alpha | W | \varphi_i \rangle b_i(t) \\ \implies b(\alpha, t) &= \frac{\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle}{\hbar} \frac{1 - e^{-\Gamma t/2} e^{i(E-E_i-\delta E)t/\hbar}}{\frac{1}{\hbar}(E - E_i - \delta E) + i\frac{\Gamma}{2}} . \end{aligned}$$

Examinons ces quantités.

$$\mathcal{P}_{ii}(t) = |b_i(t)|^2 = e^{-\Gamma t} .$$

Alors, la probabilité que le système reste dans l'état $|\varphi_i\rangle$ décroît avec le temps de façon exponentielle et irréversible. (Probabilité $\rightarrow 0$ lorsque $t \rightarrow \infty$.)

$\tau = 1/\Gamma$ est le *temps de vie* de l'état $|\varphi_i\rangle$.

Rappel:

$$c_i(t) = e^{-iE_i t/\hbar} b_i(t) = e^{-\Gamma t/2} e^{-i(E_i + \delta E)t/\hbar} .$$

S'il n'y a pas de perturbation, $c_i(t) = e^{-iE_i t/\hbar}$. Alors, la perturbation donne le temps de vie ($e^{-\Gamma t/2}$) et aussi déplace l'énergie de l'état $|\varphi_i\rangle$: $E_i \rightarrow E_i + \delta E$.

$$\delta E = \mathcal{P} \int_0^\infty dE \frac{K(E)}{E_i - E} = \mathcal{P} \int_0^\infty dE \frac{1}{E_i - E} \int d\beta |\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta, E) .$$

(Le \mathcal{P} enlève le pôle.) Mais: $d\alpha = \rho(\beta, E) d\beta dE$.

$$\implies \delta E = \mathcal{P} \int d\alpha \frac{|\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle|^2}{E_i - E} .$$

Donc, pour les états dont l'énergie $\neq E_i$, la contribution à δE est

$$\frac{|\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle|^2}{E_i - E} .$$

Alors, pour les états stationnaires, on trouve le déplacement en énergie qu'on aurait trouvé avec la théorie des perturbations indépendantes du temps!

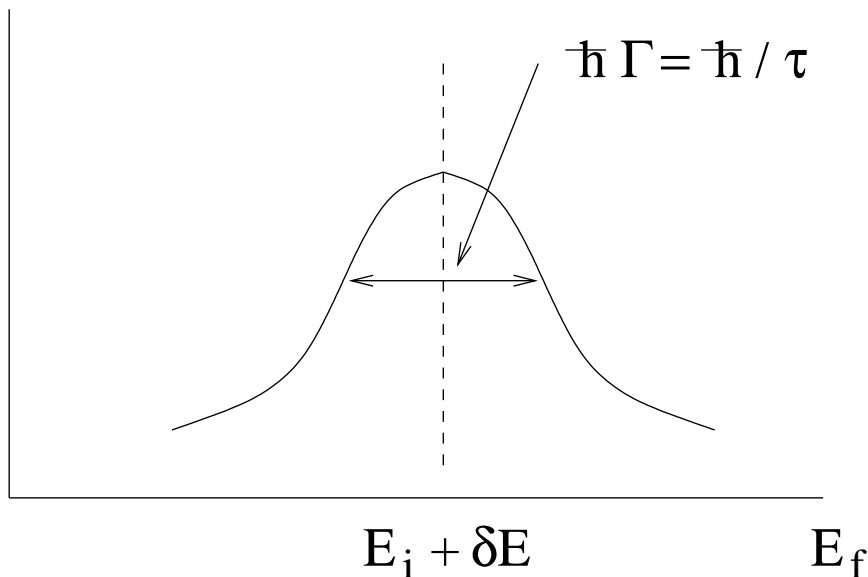
Finale­ment, pour $t \gg 1/\Gamma$ ($e^{-\Gamma t} \simeq 0$), la distribution en énergie de l'état final est

$$|b(\alpha, t)|^2 = |\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle|^2 \frac{1}{(E - E_i - \delta E)^2 + \hbar^2 \Gamma^2 / 4} .$$

C'est une densité de probabilité:

$$d\mathcal{P}(\beta_f, E_f, t) = |\langle \beta_f, E_f | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f) \frac{1}{(E_f - E_i - \delta E)^2 + \hbar^2 \Gamma^2 / 4} d\beta_f dE_f .$$

Examinons la dépendance en E_f . $|\langle \beta_f, E_f | W | \varphi_i \rangle|^2$ et $\rho(\beta_f, E_f)$ varient peu lorsque E_f varie sur un interval de $O(\hbar\Gamma) \implies$ la dépendance en E_f est gouvernée par le dénominateur:



La distribution Wigner-Weisskopf. Plus la largeur est grande, plus le temps de vie est court.

L'incertitude sur l'énergie de l'état final: $\Delta E_f = \hbar\Gamma = \hbar/\tau$ (principe d'incertitude). Donc: plus le temps de vie est long, plus l'incertitude en énergie est petite. Alors, l'énergie d'un état d'un temps de vie long peut être mesurée avec beaucoup plus de précision que si le temps de vie est court. Il y a une limite intrinsèque à la précision avec laquelle on peut mesurer l'énergie d'un état.

Diffusion

On considère l'interaction entre deux particules en trois dimensions. L'Hamiltonien s'écrit

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) .$$

On peut transformer ceci en coordonnées du centre de masse et coordonnées relatives:

$$\begin{aligned} \vec{r} &\equiv \vec{r}_1 - \vec{r}_2 & , & & \vec{R} &\equiv \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} , \\ \vec{p} &\equiv \frac{m_2\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_2}{m_1 + m_2} & , & & \vec{P} &\equiv \vec{p}_1 + \vec{p}_2 . \end{aligned}$$

$$\implies H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(|\vec{r}|) ,$$

où $M = m_1 + m_2$, $(1/\mu) = (1/m_1) + (1/m_2)$ (masse réduite).

Premier terme: mouvement du centre de masse. Pas intéressant. On peut transformer au référentiel du centre de masse $\vec{P} = 0 \implies$ ignorer ce terme. Les autres termes décrivent le mouvement relatif, qui contient la physique.

$$\implies H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(|\vec{r}|) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}^2 + V(|\vec{r}|) .$$

Remarque: $V(r)$ dépend de r , avec $r \geq 0$. Il est plus naturel de traiter le problème en coordonnées sphériques.

En coordonnées sphériques,

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2} .$$

On définit

$$p_r \equiv -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \implies p_r^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r .$$

$$\implies H = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{\vec{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) .$$

Remarque: H n'est pas défini pour $r = 0$ ($r = 0$ est un point spécial en coordonnées sphériques).

Comme p_r dépend seulement de r et \vec{L}^2 de θ et ϕ ,

$$[p_r^2, \vec{L}^2] = 0 \quad , \quad [H, \vec{L}^2] = 0 \quad .$$

Alors, la solution $u_E(\vec{r})$ à l'équation $Hu_E(\vec{r}) = Eu_E(\vec{r})$ doit aussi être un état propre de \vec{L}^2 . Elle s'écrit

$$u_E(\vec{r}) = R_{Elm}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad .$$

Comme $\vec{L}^2 Y_{lm} = \ell(\ell + 1)\hbar^2 Y_{lm}$, l'équation radiale devient

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right] R_{Elm}(r) + V(r)R_{Elm}(r) = ER_{Elm}(r) \quad .$$

Remarque: cette équation est indépendante de $m \implies$ pour un ℓ donné, il y a une dégénérescence de degré $2\ell + 1$. Desormais, on laisse tomber l'indice m dans $R_{Elm}(r)$.

Important: le système de deux particules interagissantes est équivalent au système d'une particule de masse μ se déplaçant dans le potentiel $V_{eff} = V(r) + \hbar^2 \ell(\ell + 1)/2\mu r^2$. Dernier terme: barrière centripète.

D'abord, on considère une particule libre, $V(r) = 0$. On définit $E \equiv \hbar^2 k^2 / 2\mu$, $x \equiv kr$. L'équation à résoudre devient

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} + 1 - \frac{\ell(\ell + 1)}{x^2} \right] R(x) = 0 .$$

C'est l'équation différentielle sphérique de Bessel.

Si on écrit $u(x) \equiv xR(x)$, on obtient

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{\ell(\ell + 1)u}{x^2} + u = 0 .$$

Comme c'est une équation différentielle de degré 2, il y a deux solutions.

$$(i) \quad \ell = 0 : \quad \frac{d^2 u}{dx^2} + u = 0 \quad \Longrightarrow \quad u = \sin x , \quad \cos x .$$

Alors,

$$R_0(x) = \frac{\sin x}{x} \quad (\text{regulier}) , \quad R_0(x) = \frac{\cos x}{x} \quad (\text{irregulier}) .$$

Solution régulière $\sim r^\ell$ lorsque $r \rightarrow 0$ (~ 1 pour $\ell = 0$), solution irrégulière $\sim r^{-(\ell+1)}$ ($\sim 1/r$ pour $\ell = 0$).

$$(ii) \ell = 1 : \frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{2u}{x} + u = 0 \implies u = \frac{\sin x}{x} - \cos x, -\frac{\cos x}{x} - \sin x.$$

Alors,

$$R_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x} \text{ (regulier) }, \quad R_1(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x} \text{ (irregulier) }.$$

ℓ général. Solutions: $R_\ell(x) =$

$$j_\ell(x) = (-x)^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \left(\frac{\sin x}{x} \right) \text{ (regulier) },$$

$$n_\ell(x) = -(-x)^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \left(\frac{\cos x}{x} \right) \text{ (irregulier) }.$$

Les $j_\ell(x)$ et les $n_\ell(x)$ sont les fonctions sphériques de Bessel et de Neumann, respectivement.

Bien sûr, une particule libre comprend $r = 0 \implies$ on ne garde que les fonctions sphériques de Bessel. Les états propres et énergies d'une particule libre en coordonnées sphériques sont

$$\varphi_{k\ell m}(r, \theta, \phi) = j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}.$$

Problème (pas de diffusion): trouvez tous les états propres et les énergies pour le puits sphérique infini:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a, \\ \infty & r > a. \end{cases}$$

Solution: dans le puits ($r < a$), la particule est libre:

$$\varphi_{k\ell m}(r, \theta, \phi) = j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi).$$

À $r = 0$, la fonction d'onde doit s'annuler. Donc, les énergies sont données par la condition $j_\ell(ka) = 0$.

Loin de l'origine, $x \gg 0$,

$$j_\ell(x) \simeq \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) \quad \left[\text{De plus, } n_\ell(\rho) \simeq -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right) \right].$$

Donc, pour $ka \gg 1$, les solutions de $j_\ell(ka) = 0$ sont $ka \approx n\pi + \ell\pi/2$.

Solutions exactes (quelques valeurs de ℓ):

$\ell = 0$	$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$	$\ell = 4$	$\ell = 5$
3.14	4.49	5.76	6.99	8.18	9.36
6.28	7.73	9.10	10.42		
9.42					

Remarque: seulement certaines valeurs de ka sont permises. Donc, pour un a donné, k est quantifié $\implies E$ est quantifié (spectre discret).

On nomme $n = 1$ la première racine pour un ℓ donné, $n = 2$ la deuxième racine, etc. On utilise la notation spectroscopique pour les valeurs de ℓ : S ($\ell = 0$), P ($\ell = 1$), D ($\ell = 2$), F ($\ell = 3$), G ($\ell = 4$), H ($\ell = 5$).

L'ordre des niveaux: $1S, 1P, 1D, 2S, 1F, 2P, 1G, 2D, 1H, 3S, \dots$

Problème (diffusion): états propres pour le puits sphérique fini:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a, \\ 0 & r > a. \end{cases}$$

Équations à résoudre:

$$\left[- \left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \right) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} (E + V_0) R(r) = 0 \quad r < a,$$

$$\left[- \left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \right) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} E R(r) = 0 \quad r > a.$$

On définit $k^2 \equiv 2\mu E/\hbar^2$, $\kappa^2 \equiv 2\mu(E + V_0)/\hbar^2$.

Pour $r < a$, on a la solution régulière (avec κ); pour $r > a$, les solutions régulières et irrégulières sont permises (avec k):

$$R_\ell^1(r) = A j_\ell(\kappa r),$$

$$R_\ell^2(r) = B j_\ell(kr) + C n_\ell(kr).$$

On trouve les valeurs des constantes en raccordant ψ et ψ' à $r = a$.

Loin de l'origine,

$$j_\ell(x) \simeq \frac{1}{x} \sin \left(x - \frac{\ell\pi}{2} \right) , \quad n_\ell(x) \simeq -\frac{1}{x} \cos \left(x - \frac{\ell\pi}{2} \right) .$$

Donc, la forme asymptotique de R_ℓ^2 est

$$\begin{aligned} R_\ell^2 &\simeq \frac{B}{2ikr} \left[\exp i \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} \right) - \exp -i \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} \right) \right] \\ &\quad - \frac{C}{2kr} \left[\exp i \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} \right) + \exp -i \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} \right) \right] \\ &= \frac{-C + iB}{2kr} \left[\exp -i \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} \right) + \frac{C + iB}{C - iB} \exp i \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} \right) \right] \\ &= (-i)^\ell \frac{B + iC}{2ikr} \left[(-1)^{\ell+1} e^{-ikr} + \frac{B - iC}{B + iC} e^{ikr} \right] . \end{aligned}$$

Premier terme: onde allant vers l'origine (onde entrante); deuxième terme: onde allant vers l'infini (onde sortante).

À $x = a$,

$$\begin{aligned} A j_\ell(\kappa a) &= B j_\ell(ka) + C n_\ell(ka) , \\ \kappa A j'_\ell(\kappa a) &= k (B j'_\ell(ka) + C n'_\ell(ka)) . \end{aligned}$$

$$\implies \kappa \left[\frac{j'_\ell(\kappa a)}{j_\ell(\kappa a)} \right] = k \left[\frac{B j'_\ell(ka) + C n'_\ell(ka)}{B j_\ell(ka) + C n_\ell(ka)} \right] .$$

Mais j_ℓ et n_ℓ sont des fonctions réelles $\implies B/C$ est réel. Alors, $(B - iC)/(B + iC)$ est une pure phase:

$$\frac{B - iC}{B + iC} \equiv e^{2i\delta_\ell(k)} \implies \tan \delta_\ell(k) = -C/B .$$

Donc, la forme asymptotique de R_ℓ^2 est

$$R_\ell^2 \simeq \frac{\text{constante}}{r} \sin \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell(k) \right) .$$

$\delta_\ell(k)$ est le *déphasage*: résultat important pour la diffusion.

Généraliser: on envoie une onde plane e^{ikz} vers l'origine, sans potentiel. On peut la développer en ondes sphériques (ou *ondes partielles*):

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) j_{\ell}(kr) .$$

$P_{\ell}(\cos \theta) = \sqrt{4\pi/(2\ell + 1)} Y_{\ell 0}(\theta, \phi)$: polynômes de Legendre.

Dans la limite $r \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} e^{ikz} &\rightarrow \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} \right) \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) \frac{1}{2ikr} \left((-1)^{\ell+1} e^{-ikr} + e^{ikr} \right) . \end{aligned}$$

Le premier terme est l'onde entrante, le deuxième terme est l'onde sortante. Remarque: ici, l'onde sortante n'est pas une onde diffusée: il n'y a pas de diffusion car il n'y a pas de potentiel.

Maintenant, on rajoute un potentiel. Ce potentiel va diffuser l'onde, ce qui aura un effet sur l'onde sortante seulement. Nous avons vu que cet effet est un déphasage de l'onde sortante:

$$\psi \rightarrow \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) \frac{1}{2ikr} \left((-1)^{\ell+1} e^{-ikr} + S_{\ell}(k) e^{ikr} \right) ,$$

où $S_{\ell}(k) = \exp[2i\delta_{\ell}(k)]$ ($\delta_{\ell}(k)$ est le déphasage de l'onde).

De façon équivalente:

$$\psi \rightarrow e^{ikz} + \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) \frac{1}{2ikr} (S_{\ell}(k) - 1) e^{ikr} \equiv e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} .$$

$f(\theta)$ est l'amplitude de diffusion:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) (S_{\ell}(k) - 1) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) e^{i\delta_{\ell}} \sin \delta_{\ell} . \end{aligned}$$

Or, dans une expérience de diffusion, on veut mesurer la section efficace différentielle, définie comme suit. On compte le nombre de particules dn diffusées dans une petite région angulaire $d\Omega$ en direction $\theta, \phi \equiv d\Omega$ dans un certain intervalle de temps dt .

dn est proportionnel à $d\Omega dt$, au courant de particules incidentes et à la section efficace différentielle:

$$dn = \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot j_{inc} \cdot dt \cdot d\Omega .$$

$d\sigma/d\Omega$ est la section efficace différentielle. Rappel: le faisceau incident est dans la direction \hat{z} . Donc, si le potentiel est symétrique par rapport aux rotations autour de \hat{z} , $d\sigma/d\Omega$ ne dépend pas de ϕ .

La section efficace totale est simplement l'intégral de $d\sigma/d\Omega$ sur tous les angles:

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} .$$

La dimension de σ est longueur²: l'unité standard est le *barn*:

$$1 \text{ bn} = 10^{-24} \text{ cm}^2 .$$

Nous avons

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r},$$

ce qui comprend une onde incidente et une onde diffusée. De ceci, on peut calculer le flux incident:

$$\vec{j}(r) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right).$$

Le courant contient trois parties: un terme quadratique en l'onde incidente, un terme mixte et un terme quadratique en l'onde diffusée. Premier terme: le flux est $\hbar k \hat{z} / m$.

Terme mixte: termes proportionnels à $\exp \pm [ikr(1 - \cos \theta)]$. Ces termes varient *très* rapidement en fonction de θ : comme kr est grand dans la région asymptotique, une petite variation de $\cos \theta$ implique un grand changement de la phase de l'exponentiel. Dans une région angulaire arbitrairement petite, on aura une annulation entre différentes contributions au courant \implies ce terme donne zéro.

Troisième terme (courant diffusé): la contribution du gradient sur $f(\theta)/r$ est proportionnelle à $1/r^3$, qui est négligeable pour r grand. Donc, seulement l'exponentiel contribue au flux.

Au total, on a

$$\vec{j} = \frac{\hbar k}{m} \hat{z} + \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \hat{r} .$$

Donc,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 .$$

Alors: dans des problèmes de diffusion, il faut calculer $f(\theta)$. (Ou, de façon équivalente, il faut calculer $\delta_\ell(k)$. Le déphasage dépend de la forme du potentiel.)

On peut montrer que la section efficace total, σ , reçoit des contributions de chaque onde partielle:

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta |f(\theta)|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_\ell (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell \equiv \sum_\ell \sigma_\ell .$$

Retour au puits sphérique fini: on avait

$$\kappa \left[\frac{j'_\ell(\kappa a)}{j_\ell(\kappa a)} \right] = k \left[\frac{B j'_\ell(ka) + C n'_\ell(ka)}{B j_\ell(ka) + C n_\ell(ka)} \right]$$

$$\Rightarrow \tan \delta_\ell = \frac{k j'_\ell(ka) j_\ell(\kappa a) - \kappa j_\ell(ka) j'_\ell(\kappa a)}{k n'_\ell(ka) j_\ell(\kappa a) - \kappa n_\ell(ka) j'_\ell(\kappa a)} .$$

Cette expression n'est pas très transparente: on considère le cas de faible énergie, $ka \ll 1$. Remarque: pour $x \rightarrow 0$,

$$j_\ell(x) \rightarrow \frac{x^\ell}{1 \cdot 3 \cdots (2\ell + 1)} = \frac{x^\ell}{(2\ell + 1)!!} ,$$

$$n_\ell(x) \rightarrow -\frac{1 \cdot 3 \cdots (2\ell - 1)}{x^{\ell+1}} = -\frac{(2\ell - 1)!!}{x^{\ell+1}} .$$

Donc

$$\tan \delta_\ell = \frac{(ka)^{2\ell+1}}{(2\ell + 1)!!(2\ell - 1)!!} \left\{ \frac{\ell j_\ell(\kappa a) - \kappa a j'_\ell(\kappa a)}{(\ell + 1) j_\ell(\kappa a) + \kappa a j'_\ell(\kappa a)} \right\} .$$

À part des points spéciaux où le numérateur ou le dénominateur est zéro, l'expression $\{\dots\}$ est un nombre d'ordre 1. Alors $\tan \delta_\ell \ll 1$:

$$\sin \delta_\ell \simeq \delta_\ell \simeq \tan \delta_\ell = \frac{(ka)^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!!(2\ell-1)!!} \cdot O(1).$$

Remarque: cette quantité diminue rapidement avec ℓ .

Dans le canal ℓ , la section efficace est

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell \simeq \pi a^2 (ka)^{4\ell} \frac{4}{(2\ell+1)!!(2\ell-1)!!^3} \cdot O(1).$$

(Le premier facteur est la surface bidimensionnelle de la cible vue par le faisceau.)

Donc: la diffusion est dominée par $\ell = 0$:

$$\sigma \simeq \sigma_0 = 4\pi a^2 \cdot O(1).$$

(Le facteur $O(1)$ dépend de la forme du potentiel.)

La diffusion est dominée par $\ell = 0$: isotrope. Des corrections, dépendantes de l'angle θ , viennent de $\ell > 0$. E.g. si on garde $\ell = 0, 1$,

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 &\simeq \frac{1}{k^2} \left| e^{i\delta_0} \sin \delta_0 P_0(\cos \theta) + 3e^{i\delta_1} \sin \delta_1 P_1(\cos \theta) \right|^2 \\ &\simeq \frac{\sin^2 \delta_0 P_0(\cos \theta)^2}{k^2} \left(1 + 6 \frac{\delta_1 P_1(\cos \theta)}{\delta_0 P_0(\cos \theta)} \right) . \end{aligned}$$

On a $\delta_0 \simeq ka$, $\delta_1 \simeq (ka)^3/3$, $P_0(\cos \theta) = 1$, $P_1(\cos \theta) = \cos \theta \implies$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq a^2 \left[1 + 2(ka)^2 \cos \theta + O((ka)^4) \right] .$$

Coefficients d' $O(1)$ sont implicites.

Premier terme: $\ell = 0$. Deuxième terme: interférence entre $\ell = 0$ et $\ell = 1$. Ce terme donne une anisotropie dans la diffusion: la diffusion vers en avant est augmentée, celle vers en arrière est diminuée. (Mais remarque: l'anisotropie dépend des facteurs d' $O(1)$ dont les signes ne sont pas nécessairement positifs!)

Donc: la diffusion à basse énergie diminue avec ℓ . Même si on a trouvé ce résultat en étudiant le puits sphérique fini, il est général. On peut le comprendre intuitivement: si $\ell \neq 0$, il y a une barrière centrifuge qui empêche la particule de s'approcher à l'origine.

Rappel: puits sphérique fini:

$$\tan \delta_\ell = \frac{(ka)^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!!(2\ell-1)!!} \left\{ \frac{\ell j_\ell(\kappa a) - \kappa a j'_\ell(\kappa a)}{(\ell+1)j_\ell(\kappa a) + \kappa a j'_\ell(\kappa a)} \right\}.$$

Nous avons dit: “à part des points spéciaux où le numérateur ou le dénominateur est zéro, l'expression $\{\dots\}$ est un nombre d'ordre 1”.

Mais qu'est-ce qui se passe aux points spéciaux?

(i) Si le numérateur de $\{\dots\}$ est nul pour une valeur donnée de ℓ , ℓ_0 , ce canal ne contribuera pas à la diffusion. Remarque: la diminution de σ_{ℓ_0} en fonction d'énergie peut être très brusque.

Le cas où $\ell_0 = 0$ est particulièrement important parce que la diffusion est dominée par $\ell = 0$ à basse énergie. Donc: si, en variant l'énergie (toujours à basse énergie), on passe par une valeur où $\sin \delta_0 = 0$, la section efficace totale chutera de façon dramatique. On appelle ceci **l'effet Ramsauer-Townsend**.

En fait, vous avez (probablement) déjà vu le même effet en une dimension. On considère une onde plane d'énergie E venant de $x = -\infty$ vers un puits fini:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a, \\ -|V| & -a < x < a, \\ 0 & a < x. \end{cases}$$

Le coefficient de transmission est

$$T = \frac{4E(E + |V|)}{4E(E + |V|) + V^2 \sin^2(2ka)}, \quad k = \sqrt{\frac{2m(E + |V|)}{\hbar^2}}.$$

Si $\sin(2ka) = 0$, i.e. si $2a = n\pi/k$, $T = 1$: il y a une transmission résonante (pas de réflexion/diffusion): l'onde incidente ne voit pas le puit.

(ii) Si le dénominateur de $\{\dots\}$ est nul $\implies \sin \delta_{\ell_0} = 1 \implies$ la section efficace pour ce canal est maximale dans le voisinage de ce point: résonance.

E.g. puits sphérique fini: pour $\ell = 0$, le dénominateur est nul quand

$$\kappa a = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}} a = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi .$$

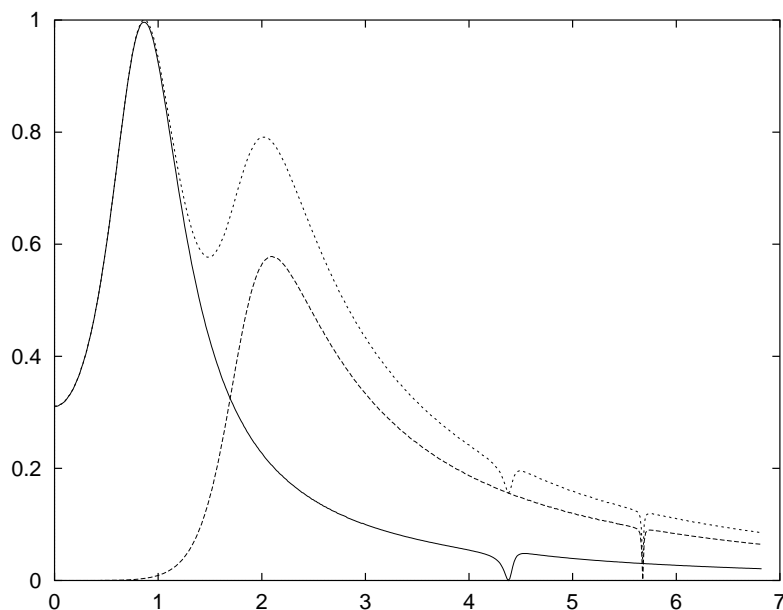
Remarque: si $E \ll V_0$, cette relation ressemble à la condition pour un état lié d'énergie $E = 0$ dans un puits sphérique fini:

$$\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} a = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi .$$

Interprétation: la résonance est due à la proximité d'un état lié. Les particules sont presque attrapées dans l'état lié, ce qui implique qu'elles sont facilement diffusées. Donc: une résonance indique la présence d'un état intermédiaire quasi-stable.

Donc: en variant l'énergie d'un faisceau, on passe par des zéros et des résonances. En général, ceci nous donne de l'information sur le potentiel de diffusion.

E.g. pour un puits sphérique fini, on peut tracer les sections efficaces partielles pour $\ell = 0$ et $\ell = 1$. On voit des résonances et des zéros dans chaque canal:



Résonances et zéros de la section efficace partielle d'un puits sphérique fini. Les sections efficaces partielles (normées par $4\pi a^2$) des canaux $\ell = 0$ (ligne solide), $\ell = 1$ (tirets longs) et la somme des deux (tirets courts) sont tracées en fonction de ka . Le paramètre $2mV_0a^2/\hbar^2 = 1.0$.

Diffusion: Particules Identiques

Pour la diffusion de particules non-identiques, nous avons trouvé que la fonction d'onde asymptotique s'écrit

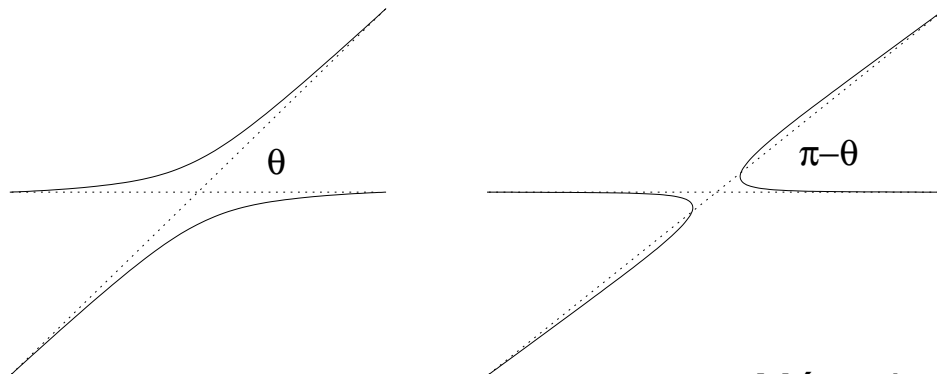
$$\psi(r) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} .$$

Notation: $\psi(r) \rightarrow |\text{espace}\rangle \equiv |\vec{k}\rangle$.

Lors de la diffusion à un angle θ , la section efficace est

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |\langle \theta | \vec{k} \rangle|^2 = |f(\theta)|^2 .$$

Maintenant, on considère la probabilité de trouver une particule (faisceau ou cible) à l'angle θ . Il y a deux diagrammes:



Pour des particules non-identiques, on a

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{non-identiques}} = \left|\langle\theta|\vec{k}\rangle\right|^2 + \left|\langle\pi - \theta|\vec{k}\rangle\right|^2 = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 .$$

Qu'est-ce qui se passe si le faisceau et la cible sont composés de particules identiques? E.g. bosons de spin 0. Dans ce cas, on ne peut pas distinguer les deux situations, i.e. la fonction d'onde doit être symétrique sous l'échange des deux particules:

$$\left|\vec{k}\right\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} + e^{-ikz} + f(\pi - \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right]$$

La section efficace est donc

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{bosons, spin 0}} &= |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2 \operatorname{Re} (f(\theta)^* f(\pi - \theta)) . \end{aligned}$$

On a interférence des deux diagrammes.

À 90° ,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{bosons, spin } 0} \Big|_{90^\circ} = 4 \left| f\left(\frac{\pi}{2}\right) \right|^2 = 2 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{non-identiques}} \Big|_{90^\circ} .$$

Ceci a été vérifié plusieurs fois.

Fermions, spin $\frac{1}{2}$: la fonction d'onde totale doit être antisymétrique. Deux possibilités pour le spin total: $S_{tot} = 0, 1$. D'abord, prenons $S_{tot} = 0$ (antisymétrique). Alors,

$$\psi = \left| \vec{k} \right\rangle_S |0\ 0\rangle .$$

Comme l'interaction est indépendante du spin, l'état final est aussi dans l'état de spin $|0\ 0\rangle$. L'amplitude est

$$A = (\langle \theta |_S \langle 0\ 0|) \left(\left| \vec{k} \right\rangle_S |0\ 0\rangle \right) = \langle \theta | \vec{k} \rangle_S .$$

Donc, la section efficace est la même que pour des bosons:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{singulet}} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 .$$

Par contre, si $S_{tot} = 1$ (symétrique), l'état spatial est antisymétrique:

$$|\vec{k}\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} - e^{-ikz} - f(\pi - \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right] .$$

L'amplitude est

$$A = (\langle \theta |_A \langle 1 m |) \left(|\vec{k}\rangle_A |1 m\rangle \right) = \langle \theta | \vec{k}\rangle_A .$$

Donc

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{triplet}} = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 .$$

À 90° , la section efficace est nulle!

Expérience: souvent le faisceau et la cible sont tous les deux polarisés. 4 possibilités: faisceau: $|+\rangle$ ou $|-\rangle$, cible: $|+\rangle$ ou $|-\rangle$.

(i) même polarisation, e.g. faisceau: $|+\rangle$ et cible: $|+\rangle$. Dans ce cas, l'état total est $|1\ 1\rangle$. Nous avons déjà fait ceci: l'état est $|\vec{k}\rangle_A |1\ 1\rangle$; la section efficace est

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{triplet}} = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 .$$

(ii) Plus intéressant: polarisation opposée, e.g. faisceau: $|+\rangle$ et cible: $|-\rangle$. Dans ce cas l'état initial n'est pas une combinaison d'états $|\vec{k}\rangle$ et spin qui sont symétriques/antisymétriques. L'état initial est

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\vec{k}\rangle |+\ -\rangle - |-\vec{k}\rangle |-\ +\rangle \right) .$$

(1) Diffusion à l'état singulet. L'amplitude est

$$\begin{aligned} A &= \langle \theta |_s \langle 0 0 | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle \theta | + \langle \pi - \theta |] \langle 0 0 | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{2} \{ [f(\theta) + f(\pi - \theta)] \langle 0 0 | + - \rangle - [f(\pi - \theta) + f(\theta)] \langle 0 0 | - + \rangle \} . \end{aligned}$$

Mais

$$|0 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle] .$$

Donc l'amplitude est

$$A = \frac{1}{2} [f(\theta) + f(\pi - \theta)] \frac{1}{\sqrt{2}} [1 - (-1)] = \frac{1}{\sqrt{2}} [f(\theta) + f(\pi - \theta)] .$$

La section efficace est

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{+- \rightarrow \text{singulet}} = \frac{1}{2} |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 .$$

(2) Diffusion à l'état triplet. L'amplitude est

$$\begin{aligned} A &= \langle \theta |_{\mathcal{A}} \langle 1 0 | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle \theta | - \langle \pi - \theta |] \langle 1 0 | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{2} \{ [f(\theta) - f(\pi - \theta)] \langle 1 0 | + - \rangle - [f(\pi - \theta) - f(\theta)] \langle 1 0 | - + \rangle \} . \end{aligned}$$

Mais

$$|1 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle] .$$

Donc l'amplitude est

$$A = \frac{1}{2} [f(\theta) - f(\pi - \theta)] \frac{1}{\sqrt{2}} [1 + 1] = \frac{1}{\sqrt{2}} [f(\theta) - f(\pi - \theta)] .$$

La section efficace est

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{+- \rightarrow \text{triplet}} = \frac{1}{2} |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 .$$

La section efficace totale pour la diffusion d'une particule à un angle θ est

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{tot} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{singulet}} + \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{triplet}} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 .$$

On obtient le même résultat que pour des particules non-identiques: il n'y a pas de terme d'interférence.

En fait, ceci a du sens: comme les particules ont une polarisation différente, elles **sont** distinguables. Si on mesure la polarisation à un angle θ , on peut savoir si la particule vient du faisceau ou de la cible. Dans ce cas, les particules identiques dans un état différent de spin peuvent être traitées comme des particules non-identiques.

Problème: on considère la diffusion de deux particules identiques de spin $\frac{1}{2}$. On calculera $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ de deux façons différentes: (i) on suppose que chaque état de spin, $|+\rangle$ ou $|-\rangle$, est également probable pour chaque particule, (ii) on suppose que chaque état de spin total, $|1\ m\rangle$, $|0\ 0\rangle$, est également probable.

(i) Il y a 4 possibilités pour les spins des deux particules: $|+\ +\rangle$, $|+\ -\rangle$, $|-\ +\rangle$, $|-\ -\rangle$.

Dans deux cas — $|+\ -\rangle$ et $|-\ +\rangle$ — les spins sont différents. Donc, on peut traiter les deux particules comme étant distinguables:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 .$$

Dans deux cas — $|+\ +\rangle$ et $|-\ -\rangle$ — les spins sont les mêmes. Dans ces cas,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 .$$

Donc

$$\begin{aligned}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{tot} &= \frac{1}{4} \{2 [|f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2] + 2 [|f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2]\} \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \operatorname{Re}(f(\theta)^* f(\pi - \theta)) .\end{aligned}$$

(ii) Pour le singulet, $|0\ 0\rangle$, il y a un état (antisymétrique):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 .$$

Le triplet, $|1\ m\rangle$, a trois états (symétriques):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 .$$

Donc

$$\begin{aligned}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{tot} &= \frac{1}{4} \{|f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + 3 |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2\} \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \operatorname{Re}(f(\theta)^* f(\pi - \theta)) .\end{aligned}$$

Même réponse. Voici deux façons différentes de calculer la même chose.

Théorème Optique

J'ai menti.

Nous avons trouvé

$$\vec{j} = \frac{\hbar k}{m} \hat{z} + \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \hat{r} .$$

Mais: si on calcule le flux radial des particules, on constate que l'onde plane donne zéro et l'onde diffusée donne un flux net. Comme on a une situation statique – la fonction d'onde ne change pas dans le temps, à part le facteur $\exp(-iEt/\hbar)$ – ceci viole l'équation de continuité (conservation de charge). Contradiction.

Résolution: termes d'interférence. Ces termes sont proportionnels à $\exp \pm [ikr(1 - \cos \theta)]$. Ces termes oscillent très rapidement, dû au fait que l'onde plane se propage dans la direction \hat{z} , tandis que l'onde diffusée se propage dans la direction \hat{r} . Alors, la phase relative change rapidement selon la position et nous avons donc négligé ce terme. Mais: la phase relative ne change pas le long de l'axe \hat{z} et c'est dans cette direction que les termes d'interférence pourraient être importants.

Le flux total = 0 (il y a autant des particules entrantes que sortantes).
Alors,

$$\int r^2 d\Omega (j_{\text{onde plane},r} + j_{\text{onde diff},r} + j_{\text{int},r}) = 0$$

$$\implies 0 + \frac{\hbar k}{m} \sigma + \Phi_{\text{int}} = 0 .$$

Le courant dû aux termes d'interférence est

$$\vec{j}_{\text{int}} = \frac{\hbar}{2mi} \left\{ e^{-ikr \cos \theta} \vec{\nabla} \left(f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right) + f(\theta)^* \frac{e^{-ikr}}{r} \vec{\nabla} e^{ikr \cos \theta} - c.c. \right\} .$$

Alors, la composante radiale est

$$j_{\text{int},r} = \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \frac{f(\theta) e^{ikr(1-\cos \theta)} - f(\theta)^* e^{-ikr(1-\cos \theta)}}{r^2} + \frac{ik(1 + \cos \theta)}{r} \left(f(\theta) e^{ikr(1-\cos \theta)} + f(\theta)^* e^{-ikr(1-\cos \theta)} \right) \right\} .$$

À r grand, le premier terme est beaucoup plus petit que le deuxième
 \implies on peut le négliger.

Donc, le courant radial est

$$j_{\text{int},r} = \frac{\hbar k}{2mi} 2i \operatorname{Im} \left\{ i f(\theta) (1 + \cos \theta) \frac{e^{ikr(1-\cos \theta)}}{r} \right\} .$$

Le flux est

$$\Phi_{\text{int}} = \frac{2\pi r \hbar k}{m} \operatorname{Im} \left\{ i \int_{-1}^1 d\mu f(\theta) (1 + \mu) e^{ikr(1-\mu)} \right\} ,$$

où $\mu \equiv \cos \theta$. Mais le dernier terme oscille très rapidement sauf vers en avant ($\theta = 0$) \implies l'intégrale est dominée par la contribution à $\mu = 1$.

On peut donc remplacer $f(\theta)(1 + \mu) \rightarrow 2f(0)$:

$$\Phi_{\text{int}} = \frac{4\pi r \hbar k}{m} \operatorname{Im} \left\{ i f(0) \int_{-1}^1 d\mu e^{ikr(1-\mu)} \right\} .$$

Dans l'intégrale, on néglige le terme venant de $\mu = -1$ qui oscille rapidement:

$$\Phi_{\text{int}} = \frac{4\pi r \hbar k}{m} \operatorname{Im} \left\{ i f(0) \frac{1}{-ikr} \right\} = -4\pi \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} f(0) .$$

Mais nous avons

$$\frac{\hbar k}{m} \sigma + \Phi_{\text{int}} = 0 \implies \sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}f(0) .$$

Donc, on relie la section efficace totale à l'amplitude de diffusion dans la direction avant. Ceci est le théorème optique.

Approximation de Born

On commence avec l'équation de Schroedinger. On réarrange cette équation pour écrire

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = \frac{2mV(\vec{r})}{\hbar^2}\psi(\vec{r}) ,$$

où $k^2 = 2mE/\hbar^2$. On traite le terme à droite comme étant une “source” ajouté à l'équation homogène. Remarque: la “source” dépend de la fonction qu'on essaie d'évaluer \implies on obtiendra une équation intégrale pour $\psi(\vec{r})$.

Pour écrire une solution, on suit quelques étapes. On définit *la fonction de Green* à partir de l'équation homogène:

$$(\vec{\nabla}_{(r)}^2 + k^2)G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') .$$

Remarque: la dérivée est prise par rapport à \vec{r} . L'idée sous-jacente de cette approche est que, pour une équation linéaire à laquelle on ajoute une source, la linéarité implique que la solution pour une somme de sources est la somme des solutions pour chaque source individuellement.

Ensuite on définit une solution de l'équation homogène:

$$(\vec{\nabla}_{(r)}^2 + k^2)\psi_h(\vec{r}) = 0 .$$

Finalement, la solution à l'équation de Schroedinger s'écrit

$$\psi(\vec{r}) = \psi_h(\vec{r}) + \int d^3r' G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{2mV(\vec{r}')}{\hbar^2} \psi(\vec{r}') .$$

Remarque: on a écrit ψ sous forme d'une intégrale qui contient ψ .
Donc, ce n'est pas une vraie **solution**: on a tout simplement transformé une équation différentielle en équation intégrale. Cette équation n'est pas plus facile à résoudre que l'équation de Schroedinger, mais il est plus facile de trouver une solution perturbative.

On peut trouver la fonction de Green pour l'équation de Schroedinger:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} .$$

Remarque: cette solution n'est pas unique (e.g. on peut remplacer $k \rightarrow -k$), mais la forme est appropriée pour l'approximation de Born.

On prend comme solution homogène une onde plane:

$\psi_h(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$. Donc

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \int d^3 r' G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{2mV(\vec{r}')}{\hbar^2} \psi(\vec{r}') .$$

Sous cette forme, la solution ressemble à

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} .$$

Cependant, on ne peut pas évaluer l'intégrale car l'intégrand contient ψ . L'approximation de Born est une solution itérative de cette équation.

Si l'effet du potentiel est petit, le deuxième terme est plus petit que le premier \implies on peut approximer $\psi(\vec{r}') \simeq e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'}$ dans ce terme:

$$\psi(\vec{r}) \simeq e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'} .$$

Remarque: contrairement à l'approximation qu'on a faite à basse énergie (de ne considérer que des petites valeurs de ℓ dans la décomposition de σ en fonction d'ondes partielles) on n'a pas à supposer que le potentiel est invariant sous rotations.

On s'intéresse à la fonction d'onde dans la région asymptotique $r \rightarrow \infty$. Donc on met $|\vec{r} - \vec{r}'| \simeq r$ dans le dénominateur. De plus, on utilise une série de Taylor pour écrire $|\vec{r} - \vec{r}'| \simeq r - \vec{r} \cdot \vec{r}'$ dans l'exponentiel. (Il faut garder le deuxième terme, sinon on perd un facteur de phase indépendant de r dans la limite $r \rightarrow \infty$.) Donc

$$\psi(\vec{r}) \simeq e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{1}{r} \int d^3r' e^{ik(r - \vec{r} \cdot \vec{r}')} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \equiv e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f_B(\theta, \phi),$$

où $f_B(\theta, \phi)$ est l'amplitude de diffusion dans l'approximation de Born.

On définit le vecteur $\vec{k}_{\vec{\Omega}} \equiv k\hat{r}$ (c'est le vecteur d'onde des particules diffusées en direction \hat{r}), on a

$$f_B(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i(\vec{k}_{\vec{\Omega}} - \vec{k}) \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}').$$

Finalement, on définit le changement de vecteur d'onde $\vec{\Delta} \equiv \vec{k}_{\vec{\Omega}} - \vec{k}$:

$$f_B(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\vec{\Delta} \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\vec{\Delta}),$$

où $\tilde{V}(\vec{\Delta})$ est la transformée de Fourier de $V(\vec{r})$.

Exemple: le potentiel de Yukawa:

$$V(\vec{r}) = V(r) = -e^2 \frac{e^{-r/a}}{r} .$$

Ce potentiel décrit une force dont les porteurs sont massifs avec une longueur d'onde de Compton $= a$. Remarque: lorsque $a \rightarrow \infty$, on retrouve le potentiel électromagnétique.

Transformée de Fourier: $V(r)$ et $\tilde{V}(\vec{\Delta})$ ne dépendent pas d'angles \implies on choisit $\vec{\Delta}$ en direction \hat{z} (simplification des intégrales):

$$\begin{aligned} \tilde{V}(\Delta) &= -2\pi e^2 \int_0^\infty dr r^2 \int_{-1}^1 d\mu e^{-i\Delta r\mu} \frac{e^{-r/a}}{r} \\ &= -4\pi e^2 \frac{1}{\Delta^2 + (1/a)^2} . \end{aligned}$$

Alors,

$$f_B(\theta) = \frac{2me^2}{\hbar^2} \frac{1}{\Delta^2 + (1/a)^2} .$$

Dans l'approximation de Born, la section efficace différentielle est

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_B(\theta)|^2 = \frac{4m^2 e^4}{\hbar^4} \frac{1}{(\Delta^2 + (1/a)^2)^2} .$$

Or, $\vec{\Delta} \equiv \vec{k}_{\vec{\Omega}} - \vec{k} \implies \Delta^2 = 4k^2 \sin^2(\theta/2)$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m^2 e^4}{\hbar^4} \frac{1}{(4k^2 \sin^2(\theta/2) + (1/a)^2)^2} .$$

Dans la limite $a \rightarrow \infty$, on obtient le potentiel de Coulomb $V(r) = -e^2/r$. Dans cette limite (on écrit $E = \hbar^2 k^2 / 2m$):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{e^2}{4E \sin^2(\theta/2)} \right)^2 ,$$

ce qui est le résultat exact pour la section efficace différentielle de Coulomb en mécanique classique et en mécanique quantique.
(L'égalité est un accident car nous avons utilisé une approximation.)