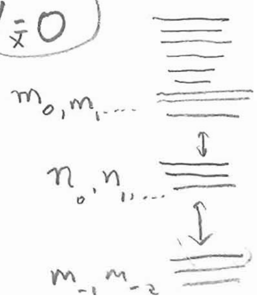
1 Perturbations stationnaires

1.a Brillouin-Wigner

Soit, $H = H_0 + \lambda V = H_0 + V_D + V_x \equiv \tilde{H}_0 + V_x$

→ Diagonal à l'intérieur du sous-espace. Mais seul H_0 diagonalisable facilement

$V_x = 0$



$V_x \neq 0$ niveaux bougeront un peu

} Presque dégénérés (ou 1 seul niveau) comparé à la séparation entre n_i et m_i

(1) $H_0 |n_i\rangle = \epsilon_{n_i} |n_i\rangle$

Laissons tomber le λ et supposons simplement V petit (nous verrons par rapport à quoi)

Equation de Schrödinger:

(2) $E_i - \tilde{H}_0 - V_x |N_i\rangle = 0$

On cherche l'effet de V sur les $|n_i\rangle$

(3) Soit $|N_i\rangle = P|N_i\rangle + Q|N_i\rangle$

Projection sur les états n_i de basse énergie

Etats d'énergie plus élevée

$$P = \sum |n_i\rangle\langle n_i|$$

$$Q = \sum_i |m_i\rangle\langle m_i|$$

(4) $Q(E_i - \tilde{H}_0)|N_i\rangle = QV_x|N_i\rangle$

Mais $\tilde{H}_0$ ne fait pas passer de $|n\rangle$ à $|m\rangle$ donc

(5) $[Q, E_i - \tilde{H}_0] = 0$

(6) Donc, $(E_i - \tilde{H}_0) Q |N_i\rangle = Q V_x |N_i\rangle$

(7) $$Q|N_i\rangle = \frac{1}{E_i - \tilde{H}_0} Q V_x |N_i\rangle$$

(8) $$|N_i\rangle = P|N_i\rangle + Q|N_i\rangle$$

(9) $$|N_i\rangle = \underbrace{P|N_i\rangle}_{|\tilde{n}_i\rangle} + \frac{1}{E_i - \tilde{H}_0} Q V_x |N_i\rangle$$

Soit $P|N_i\rangle = |\tilde{n}_i\rangle$ une combinaison linéaire orthonormale des états de basse énergie que nous verrons comment trouver.

Alors :

(10) $$\boxed{|N_i\rangle = |\tilde{n}_i\rangle + \frac{1}{E_i - \tilde{H}_0} Q V_x |\tilde{n}_i\rangle + \frac{1}{E_i - \tilde{H}_0} Q V_x \frac{1}{E_i - \tilde{H}_0} Q V_x |\tilde{n}_i\rangle + \ldots}$$

ce qui donne une série de puissance pour l'état.

Explique que mélange états virtuels d'énergie plus élevée

C'est l'approche Brillouin-Wigner

Le problème aux valeurs propres dans le sous-espace concerné devient :

Discuter dénominateur d'énergie entre autre divergence si dégénérescence

(11) $$\boxed{\langle N_j | H_0 + V | N_i\rangle = E_i \langle N_j | N_i\rangle}$$

Substituant (10), on obtient un problème aux valeurs propres effectif pour les $|\tilde{n}_i\rangle$

e.g. modèle t-J à partir de Hubbard

Difficultés :

- Les E_i aux dénominateurs doivent aussi être développés
- $\langle N_j | N_i \rangle$ doivent être orthonormalisés.

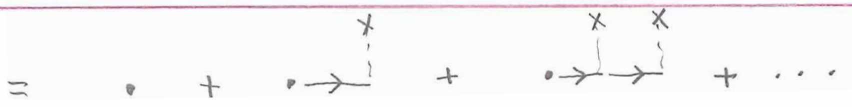
Cas particulier : 1 seul état dans le sous-espace. Alors, V_D dans H_0 et $V_X \equiv V$

(12) $$\boxed{|N\rangle} = |n\rangle + \frac{1}{E_N - H_0} QV|n\rangle + \frac{1}{E_N - H_0} QV \frac{1}{E_N - H_0} QV|n\rangle + \dots$$

$$= |n\rangle + \sum_i \frac{1}{E_N - \epsilon_{m_i}} |m_i\rangle\langle m_i|V|n\rangle$$

$$+ \sum_{i,j} \frac{1}{E_N - \epsilon_{m_i}} |m_i\rangle\langle m_i|V|m_j\rangle \frac{1}{E_N - \epsilon_{m_j}} \langle m_j|V|n\rangle$$

$$+ \dots$$



Paramètre de développement :

(13) $$\frac{\langle m_i|V|n\rangle}{E_N - \epsilon_{m_i}} \simeq \frac{\langle m_i|V|n\rangle}{\epsilon_n - \epsilon_{m_i}} \ll 1$$

$$\sim \frac{\langle V\rangle}{\Delta\epsilon} \ll 1$$

Divergence si dégénérescence

Étant donné l'état perturbé, quelle est l'énergie ?

(14) $$\langle n \mid H_0 + V \mid N \rangle = E_N \langle n \mid N \rangle$$

(15) $$E_N \langle n \mid N \rangle = \epsilon_n \langle n \mid N \rangle + \langle n \mid V \mid N \rangle$$

(16) $$\boxed{E_N = \epsilon_n + \langle n \mid V \mid N \rangle}$$

N.B. On a besoin de $|N\rangle$ à l'ordre k pour obtenir l'énergie à l'ordre $k-1$

Observable quelconque :

(17) $$\frac{\langle N \mid O \mid N \rangle}{\langle N \mid N \rangle}$$ ← Renormalisation

Rayleigh - Schrödinger

(18) Remplacer $$\frac{1}{E_N - \epsilon_{m_i}} \cong \frac{1}{\epsilon_n + \langle n \mid V \mid n \rangle + \ldots - \epsilon_{m_i}}$$

$$\cong \frac{1}{\epsilon_n - \epsilon_{m_i}} - \frac{\langle n \mid V \mid n \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{m_i})^2} + \cdots$$

Normalisation:

(19) $$\boxed{\langle N|N\rangle = \langle n|n\rangle + \sum_i \frac{|\langle n|V|m_i\rangle|^2}{(\epsilon_n - \epsilon_{m_i})^2}}$$

$\rightsquigarrow$ intervient seulement à l'ordre V^2

Exemple à l'ordre 2 pour le calcul de l'énergie

Utiliser $|N\rangle$ au premier ordre dans (16)

(20) $$\boxed{E_N = \epsilon_n + \underbrace{\langle n|V|n\rangle}_{0 \text{ ici par hypothèse}} + \sum_i \frac{|\langle n|V|m_i\rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_{m_i}}}$$

N.B. Abaisse l'énergie si n est le fondamental.