

Titre : Oscillateur harmonique

Présentée par :

Rapport écrit par :

Correcteur :

Date : 05/05/2020

Bibliographie de la leçon :

Titre	Auteurs	Éditeur	Année
MQ texier			
Cohen Tanudji			
Cours MQ magistère Orsay sur drive			

Plan détaillée

Niveau choisi pour la leçon : L3

Prérequis :

- PFD
- modélisation des forces
- fonction de Dirac
- relation de commutation
- Equation aux valeurs propres d'un Hamiltonien

Plan:

I – Oscillateur harmonique classique : cas de la masselotte sur un plan horizontal

II – OH (oscillateur Harmonique) quantique

III – Application : Vibration des noyaux d'une molécule diatomique

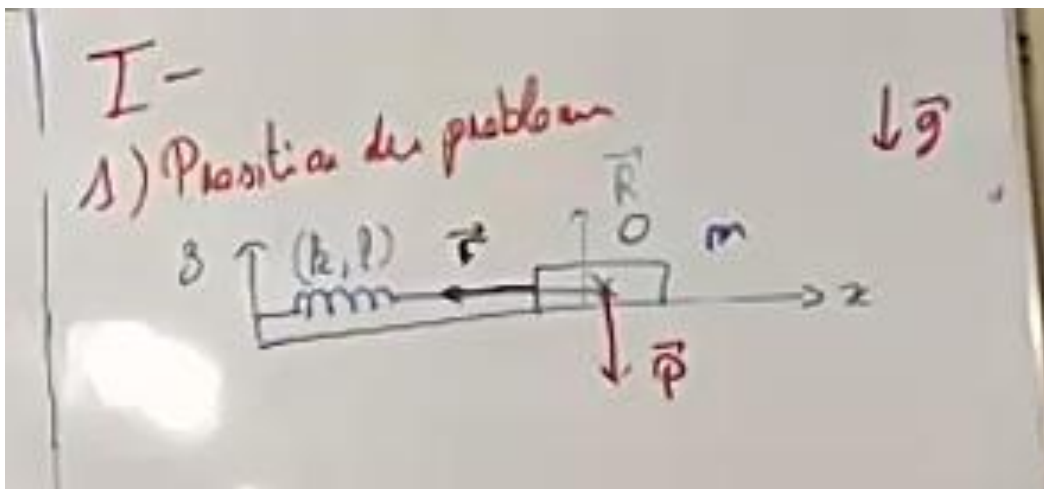
Introduction :

On retrouve oscillateur harmonique dans système conservatifs qui évoluent autour d'une position d'équilibre (ex I et pendule). On verra ce qui se passe dans le mode quantique et lors de la vibration de molécules diatomiques.

I)

1) position du problème

Dessiner le système. Pas de frottements, énumérer les forces + Ref galilees.

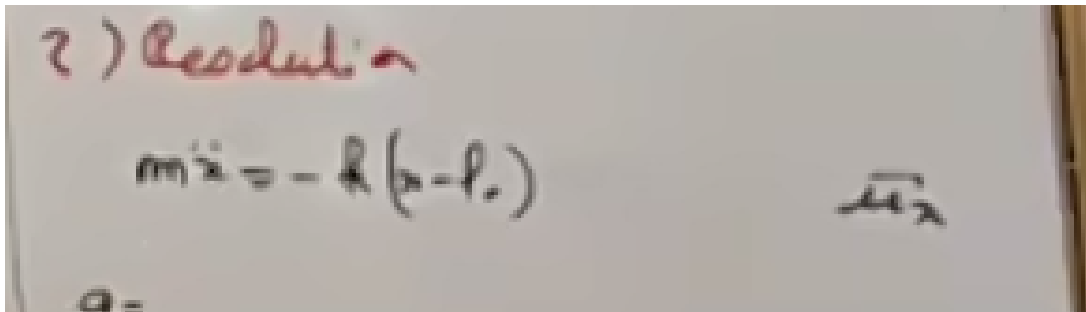


Écrire le PFD :

$$Ma = P + F + R \text{ (en vecteurs)}$$

2) résolution

On projette sur x.



2) Résolution

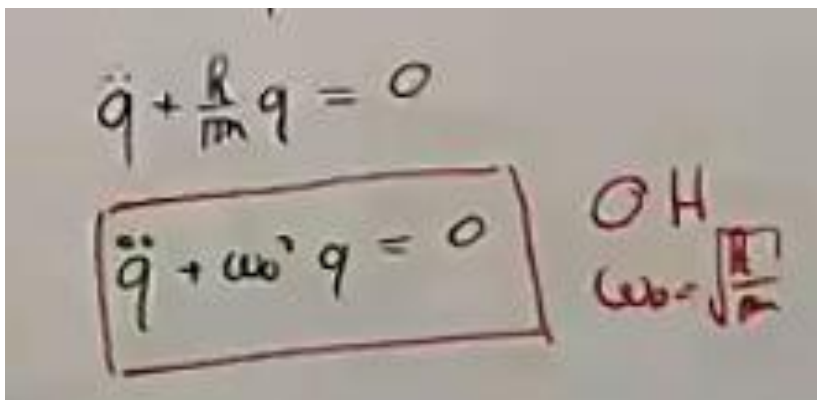
$$m\ddot{x} = -k(x-l_0)$$

\vec{x}

l_0 position d'équilibre de la masselote

On fait un changement de variable pour résoudre le système, $q = x - l_0$.

On arrive à :



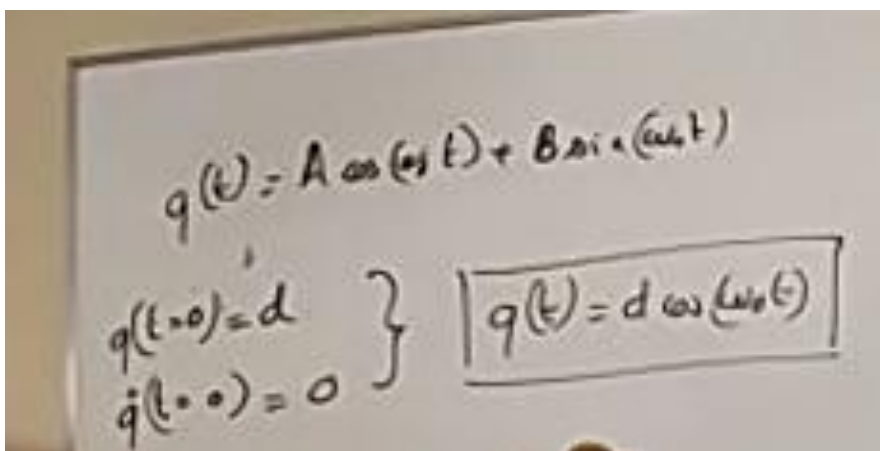
$$\ddot{q} + \frac{k}{m}q = 0$$

$$\boxed{\ddot{q} + \omega^2 q = 0}$$

OH
 $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

La solution dépend des conditions initiales. Théorème de Cauchy ? (à vérifier).

Donner solution générale et fixer conditions initiales pour donner la solution



$$q(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t)$$

$$\left. \begin{array}{l} q(0) = d \\ \dot{q}(0) = 0 \end{array} \right\} \boxed{q(t) = d \cos(\omega t)}$$

6 :15

3) Énergie et portrait de phase

Pour avoir énergie on multiplie par vitesse l'équation de l'OH.

Déroules les calculs pour arriver à l'énergie. Identifier E_p et E_c

Handwritten notes on a whiteboard:

$$\left. \begin{array}{l} q(0) = d \\ \dot{q}(0) = 0 \end{array} \right\} \quad | \quad q(t) = d \cos(\omega t)$$

3) Énergie de point de phase

$$q\ddot{q} + \omega^2 q^2 = 0$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\dot{q}^2}{2} + \frac{\omega^2}{2} q^2 \right) = 0$$

$$\frac{d}{dt} \left(\underbrace{\frac{1}{2} m \dot{q}^2}_{E_c} + \underbrace{\frac{\omega^2}{2} m q^2}_{E_p} \right) = 0$$

$E_c + E_p = E_m$, conservation de l'énergie mécanique.

Le montrer avec le portrait de phase en intégrant une fois l'équation de l'OH

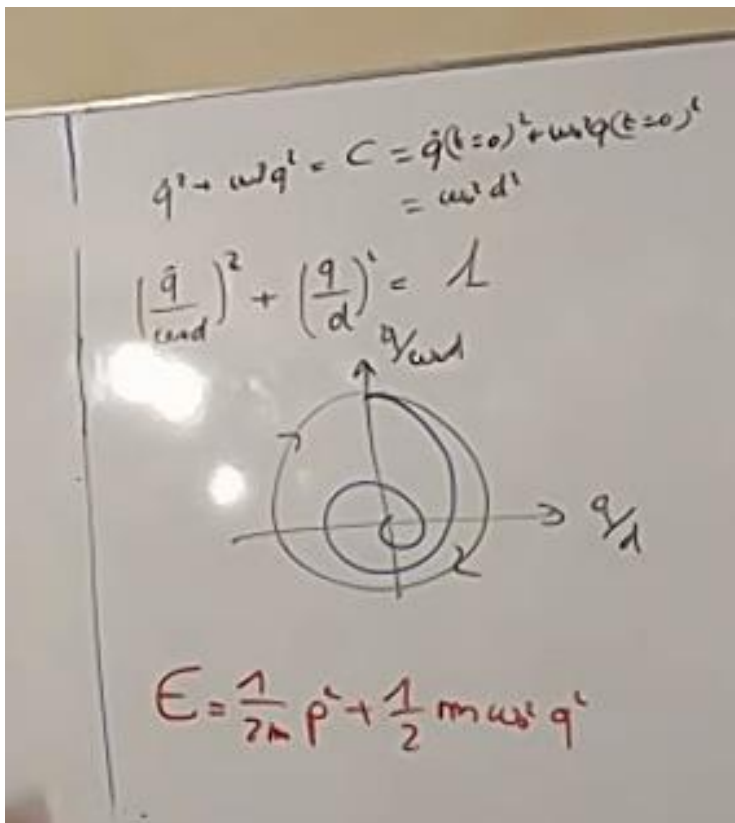
Handwritten notes on a whiteboard:

$$\dot{q}^2 + \omega^2 q^2 = C = \dot{q}(t=0)^2 + \omega^2 q(t=0)^2 = \omega^2 d^2$$

$$\left(\frac{\dot{q}}{\omega d} \right)^2 + \left(\frac{q}{d} \right)^2 = 1$$

On reconnaît l'équation d'un cercle, dessiner le cercle on peut montrer ce qui se passe si amortissement.

Changer les variables pour E_m pour faire la transition entre monde quantique et classique



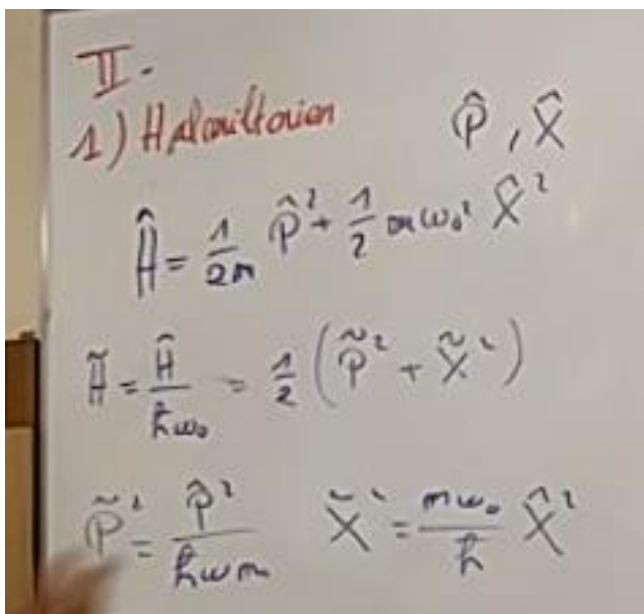
Coordonnées généralisées p et q en classique.

10 :00

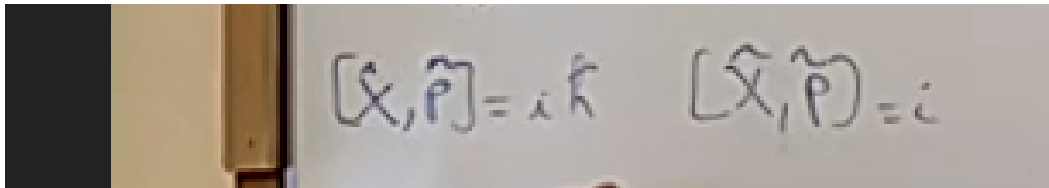
II

1) Hamiltonien

Les coordonnées généralisées deviennent des opérateurs. On vas travailler avec des variables adimensionnées pour alléger les calculs.

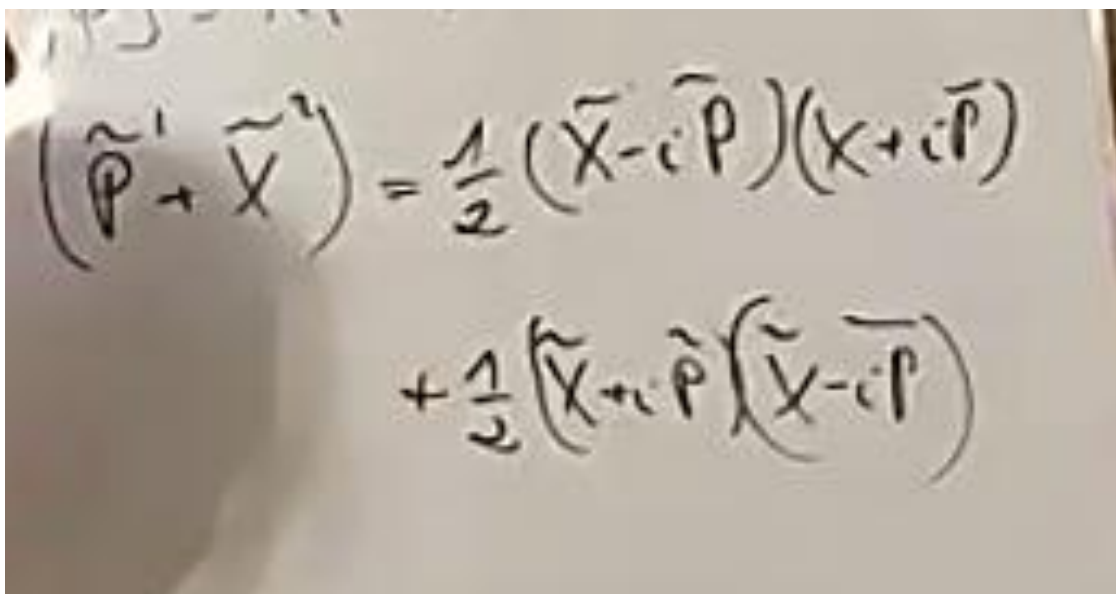


On montre ce que vaut la commutation de nos nouveaux opérateurs. Les opérateurs X et P ne sont pas hermitiques (X différent de X^\dagger),



$$[X, P] = i\hbar \quad [\tilde{X}, \tilde{P}] = i$$

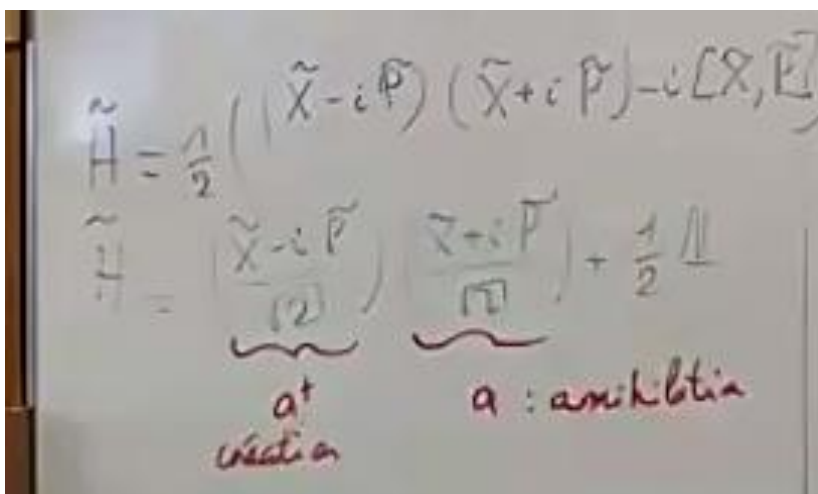
Par contre les opérateurs $(X - iP)$ et $(X + iP)$ le sont. Il faut symétriser le problème quand on a pas des opérateurs Hermitiques. En effet :



$$(\tilde{P}^\dagger + \tilde{X}) = \frac{1}{2} (\tilde{X} - i\tilde{P})(X + iP) + \frac{1}{2} (X + iP)(\tilde{X} - i\tilde{P})$$

On utilisem alors ces opérateurs.

On définit opérateurs Annihilation et création.



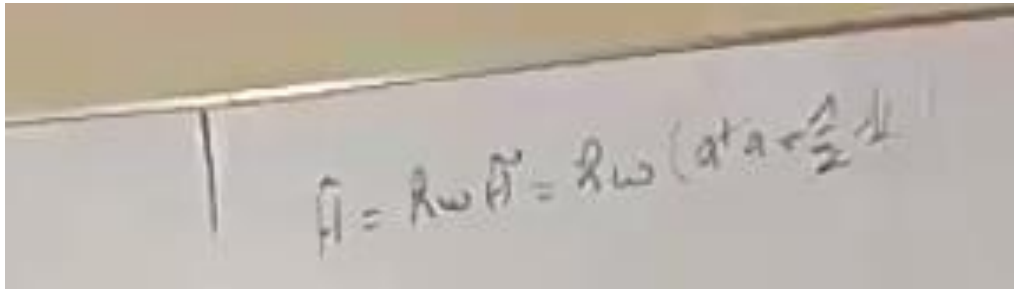
$$\tilde{a}^\dagger = \frac{1}{2} (\tilde{X} - i\tilde{P})$$

$$\tilde{a} = \frac{1}{2} (\tilde{X} + i\tilde{P}) + \frac{1}{2} \mathbb{1}$$

\tilde{a}^\dagger : création

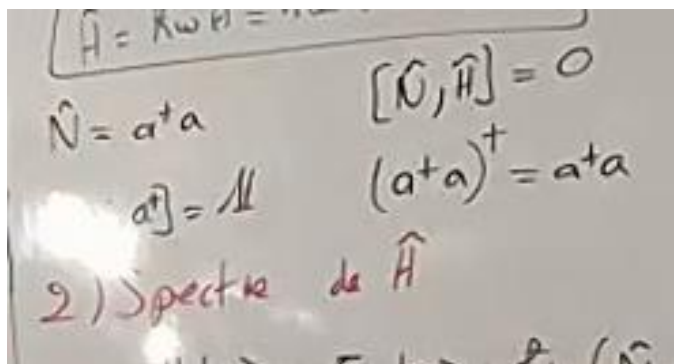
\tilde{a} : annihilation

Alors on réécrit le hamiltonien comme :



$$\hat{H} = \hbar\omega \hat{H} = \hbar\omega (a^\dagger a + \frac{1}{2})$$

On définit N qui a des propriétés particulières



$$\hat{H} = \hbar\omega \hat{H}$$

$$\hat{N} = a^\dagger a$$

$$[N, \hat{H}] = 0$$

$$a^\dagger a = 1$$

$$(a^\dagger a)^\dagger = a^\dagger a$$

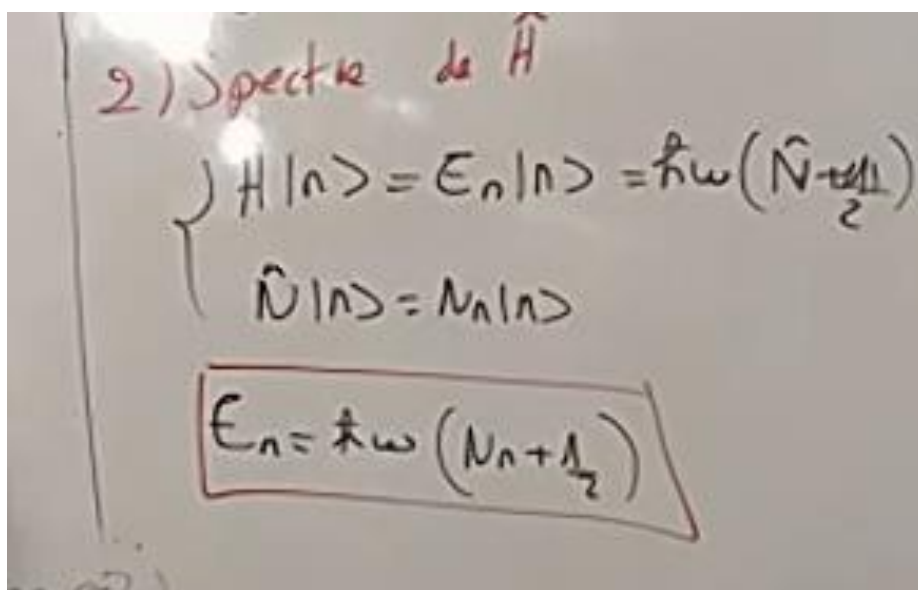
2) Spectre de \hat{H}

N, H a et a^\dagger sont un ECOC ?, le définir et passer au 2

17 :20

2) Spectre de H

On cherche les valeurs propres de H



2) Spectre de \hat{H}

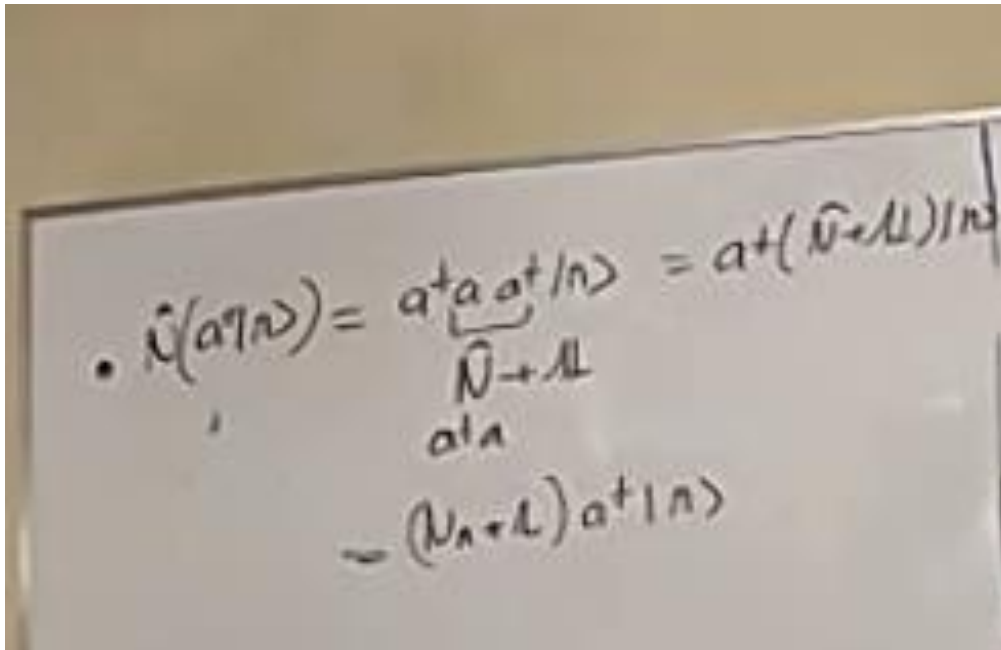
$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2})|n\rangle$$

$$\hat{N}|n\rangle = N_n|n\rangle$$

$$E_n = \hbar\omega(N_n + \frac{1}{2})$$

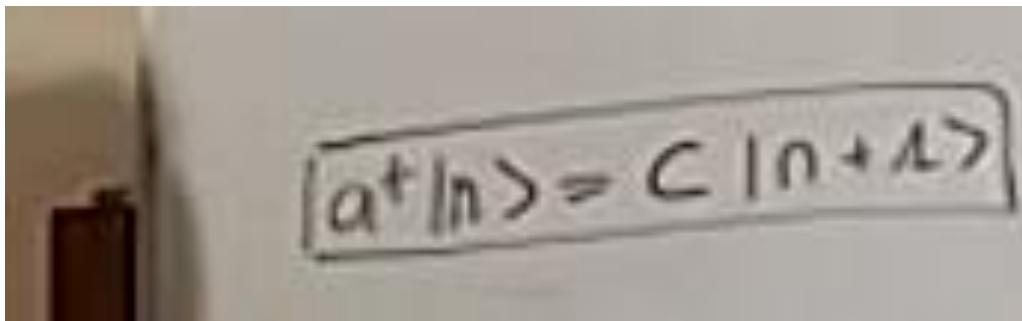
Or on ne connaît pas le spectre de N !

On va alors chercher les valeurs propres de N sur un vecteur appliqué à a :



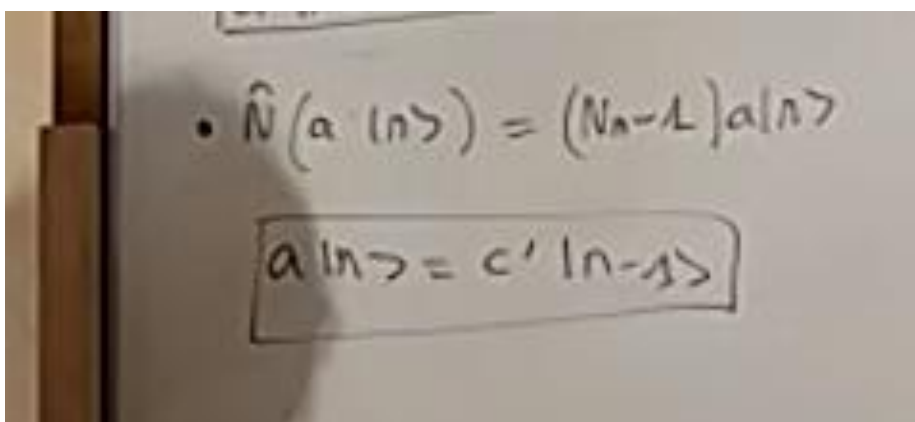
$$\bullet \hat{N}(a^\dagger |n\rangle) = \underbrace{a^\dagger a}_{\hat{N}+1} a^\dagger |n\rangle = a^\dagger (\hat{N}+1) |n\rangle = (N_n+1) a^\dagger |n\rangle$$

Alors on déduit que



$$|a^\dagger |n\rangle = C |n+1\rangle$$

Le même raisonnement avec a nous montre que :



$$\bullet \hat{N}(a |n\rangle) = (N_n-1) a |n\rangle$$

$$a |n\rangle = C' |n-1\rangle$$

On associe alors $a |n\rangle \rightarrow \hbar \omega (N_n + \frac{1}{2})$

On associe alors $a^\dagger |n\rangle \rightarrow \hbar \omega (N_n + \frac{1}{2})$

En utilisant Cauchy Schwartz :

$$\|a|n\rangle\|^2 = \langle n| \underbrace{a^+a}_N |n\rangle = N_n \underbrace{\langle n|1|n\rangle}_{=1}$$

$$N_n = n$$

N_n est un nombre positif ou nul.

On admet que N_n est un entier naturel, la démonstration peut se faire avec une récurrence et on ne peut la faire par manque de temps.

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n \geq 0$$

$$n \in \mathbb{N}$$

On voit que :

- on a une énergie non nul pour l'état fondamental
- on monte ou baisse en énergie quand on applique l'opérateur créateur ou annihilation.

État fondamental pour $n = 0$ (le plus petit).

Comment exprimer les états d'énergie en fonction de l'état fondamental ?

26 :15

3) État propre de OH quantique

On ne connaît pas ni C ni C' , c'est un problème

Faire les calculs au tableau :

3) El. x propre OHQ

$$\|a|n\rangle\|^2 = C'^2 \langle n-1|n-1\rangle = n$$

$$C' = \sqrt{n} \quad \boxed{a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle}$$

$$\|a^+|n\rangle\|^2 = C'^2 \langle n+1|n+1\rangle = \langle n|n+1\rangle = n+1$$

$$\boxed{a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle}$$

On les trouve ainsi.

Alors ensuite On applique l'opérateur création sur l'état fondamental.

$$a^+|0\rangle = \sqrt{1}|1\rangle$$

$$(a^+)^2|0\rangle = \sqrt{2}\sqrt{1}|2\rangle$$

$$(a^+)^n|0\rangle = \frac{\sqrt{n}\sqrt{n-1}\dots\sqrt{1}}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle$$

Ce sont les états fondamentales dans le formalisme de Dirac. Montrer les fonctions d'onde du livre sur slide. Les trouver est un peu fastidieux donc ne pas le faire.

31 :00

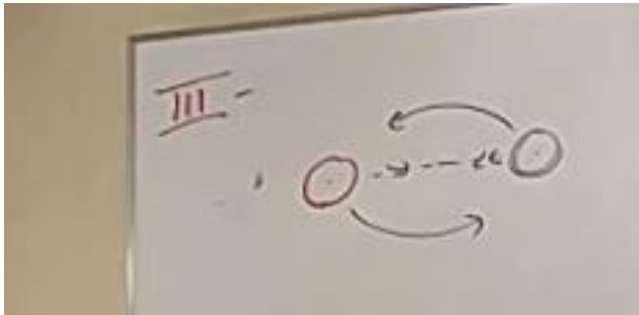
III –

La liaison moléculaire montre que le potentiel d'interaction possède un minima.

Modéliser les deux atomes, Noyaux électronique de l'état fondamental est une sphère.
Approximation de Born Oppenheimer, si un noyau bouge leur nuage électronique leur suit instantanément.

On ne regardera que les noyaux.

La molécule elle peut soit tourner



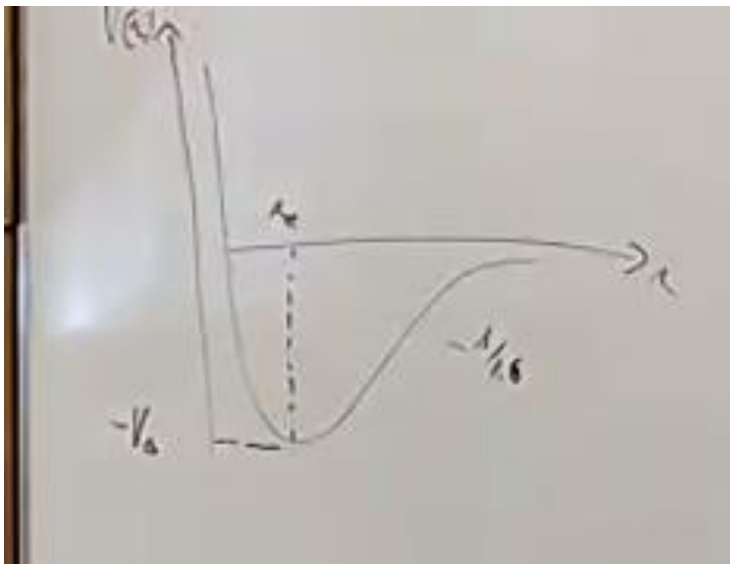
Soit vibrer. Si les vibrations sont pas trop importantes on peut découpler la vibration et la rotation. On se place dans ce cas.

Donner la formule du potentiel :

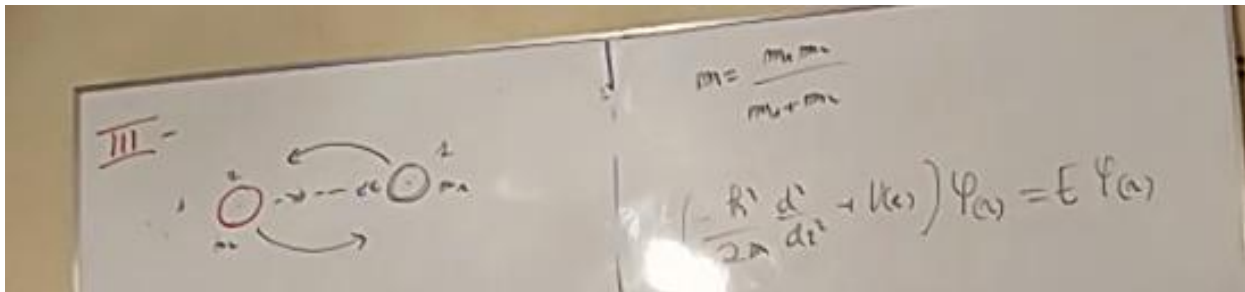
Handwritten formulas on a piece of paper. The first formula is $V(r) = E_2(r) + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$. The second formula is $e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$.

$E_1(r)$ cache beaucoup de choses, movt des électrons loins des atomes, interactions électron-noyau, ... etc.

Déssiner le potentiel. Discuter du minima, rayon r_0 , augmentaton represente la repulsion électronique (recouvremnet des nuages électroniques, pp de Pauli).



La dynamique des vibrations revient à étudier une masse réduite avec l'équation de Schrödinger.



On peut alors faire un DL autour de la position d'équilibre pour étudier les vibrations.

$$V(x) = V(x_e) + (x - x_e) \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_e} + \frac{1}{2} (x - x_e)^2 \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x_e}$$

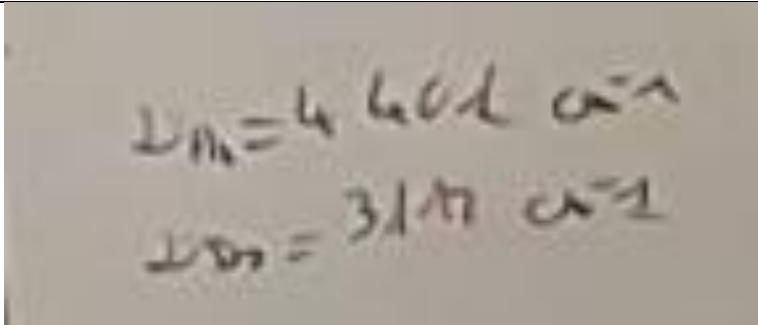
Position d'équilibre donc dérivée première = 0. On trouve :

$$V(x) = -V_0 + \frac{1}{2} (x - x_e)^2 V''(x_e)$$

On reconnaît un oscillateur harmonique, avec une solution constante la solution est donc :

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - V_0$$

L'énergie associée est donc pour l'hydrogène et le deutérium :



Handwritten equations on a piece of paper:

$$E_{v=4} = 4401 \text{ cm}^{-1}$$
$$E_{v=3} = 3177 \text{ cm}^{-1}$$

Conclusion

On montre que l'OH quantique explique le spectre discret des vibrations atomiques.

Questions posées par l'enseignant

question 1 : Vous avez dit en intro : « tout système conservatif pouvait se mettre sous la forme d'un OH » ?

Rép : Non, c'est seulement si on tourne autour d'une position d'équilibre on peut l'approcher par un OH.

Question 2 : Vous avez écrit la solution pour l'OH classique en prenant la vitesse initiale nulle. Pourriez vous écrire la solution générale à vitesse initiale non nulle.

*?

Question 3 : Quand vous avez tracé le portrait de phase vous avez obtenu un cercle plutôt qu'une ellipse. Pourquoi ?

Question 4 : En supposant que vous ne faites pas d'addimensionnement comme ce que vous venez de montrer, comment interpréter l'aire de l'ellipse ?

Question 5 : Est ce qu'on peut toujours passer du problème classique au problème quantique en passant par les coordonnées généralisées ?

Réponse 5 : Oui en coordonnées cartésiennes

Question 6 : Vous avez fait un adimensionnement pour X et P en quantique qui n'est pas le même que celui que vous avez fait en classique. Pourquoi ?

Réponse 6 : \hbar intervient nécessairement dans les échelles d'énergie en quantique.

Question 7 : Pourrions nous faire le même adimensionnement en classique qu'en quantique en utilisant \hbar ?

Question 8 : Vous nous avez dit qu'une fois qu'on avait introduit \tilde{X} et \tilde{P} vous avez fait une factorisation avec le commutateur de \tilde{X} et \tilde{P} . Ça a l'air complètement parachuté. Ça vient d'où plus heuristiquement ?

Question 9 : Vous nous avez affirmé que N_n était un entier naturel. Pourriez-vous nous expliquer comment on le démontre ?

Question 10 : Vous avez écrit : $E_{n+1} - E_n = \hbar \omega / 2$. Lapsus ?

Réponse 10 : Oui c'est $\hbar \omega$

Question 12 : Comment comparer le mouvement classique et le mouvement quantique ?

Question 13 : Est ce que le fait que l'état fonda n'ait pas une énergie nulle, c'est commun en mécanique quantique ?

Réponse 13 : C'est toujours le cas lorsqu'il y a confinement.

Réponse 12 : L'état fondamental a une énergie non nulle. Mais c'est pas suffisant.

Commentaires donnés par l'enseignant

Partie réservée au correcteur

Avis général sur la leçon (plan, contenu, etc.)

Notions fondamentales à aborder, secondaires, délicates

Expériences possibles (en particulier pour l'agrégation docteur)

Bibliographie conseillée