Mécanique quantique

TD 6: Oscillateur harmonique quantique

1 Définitions

1. Donner des exemples physiques faisant intervenir le modèle d'oscillateur harmonique.

2. Rappeler l'énergie classique d'un oscillateur harmonique de masse m en fonction de sa pulsation propre ω. En déduire l'expression du hamiltonien quantique à une dimension.

3. On définit les opérateurs $\tilde{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X$ et $\tilde{P} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}P$. Montrer que le hamiltonien s'écrit :

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(\tilde{X}^2 + \tilde{P}^2). \tag{1}$$

4. Sachant que $[X,P] = i\hbar$, calculer le commutateur $[\tilde{X},\tilde{P}]$.

2 Opérateurs annihilation et création

On définit les opérateurs

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{X} + i\tilde{P}) \qquad \text{et} \qquad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{X} - i\tilde{P}) \tag{2}$$

appelés respectivement *opérateur annihilation* et *opérateur création*.

5. Calculer le commutateur $[a,a^\dagger]$.

6. Écrire le hamiltonien H en fonction de ces opérateurs a et $a^\dagger$.

7. On définit un dernier opérateur $N = a^\dagger a$ appelé *opérateur nombre*. Calculer les commutateurs $[N,a]$ et $[N,a^\dagger]$.

Trouver le spectre du hamiltonien revient à trouver celui de l'opérateur N. On se concentre dans la suite sur ce problème.

3 Spectre de N

Soit λ une valeur propre de N, de vecteur propre associé $|\phi\rangle$.

8. Écrire la valeur propre λ sous la forme de la norme d'un vecteur, et en déduire son signe.

9. En utilisant les commutateurs précédents, montrer que $a|\phi\rangle$ et $a^\dagger|\phi\rangle$ sont aussi des vecteurs propres de N si $\lambda \neq 0$. Donner leur valeur propre respective. Préciser le cas $\lambda = 0$.

10. En déduire que les valeurs propres de N sont des entiers positifs. Justifier les noms des trois opérateurs a, $a^\dagger$ et N.

4 Vecteurs propres de l'hamiltonien

Vus les résultats précédents, on note $n \in \mathbb{N}$ les valeurs propres de N dont on peut montrer par récurrence qu'elles sont non-dégénérées. Dans cette partie, on cherche les états propres $|\phi_n\rangle$ associés.

11. Calculer la fonction propre $\phi_0(x)$ associée à $\lambda = 0$. On pourra utiliser les résultats de la partie précédente.

12. Montrer par récurrence que les états peuvent s'écrire

$$|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n|\phi_0\rangle \tag{3}$$

5 États cohérents –superposition des états propres

Les états propres $|\phi_n\rangle$ sont des états purement quantiques, dans lesquels se trouvent un nombre déterminé d'excitations élémentaires (de *quanta d'énergie*). À l'inverse, on peut justifier que les états les plus fidèle à la mécanique classique sont les états propres de l'opérateur a. Ces états sont appelés *états cohérents*.

13. Chercher un état cohérent $|\alpha\rangle$ de valeur propre α sous la forme d'une superposition d'états propres de H.

14. Calculer les valeurs moyennes $\langle X\rangle_\alpha$, $\langle P\rangle_\alpha$, ainsi que $\langle H\rangle_\alpha$ l'énergie moyenne d'un tel état en fonction de $\hbar\omega$ et α.

15. On montre que $\langle H^2\rangle_\alpha = \hbar^2\omega^2(|\alpha|^4 + 2|\alpha|^2 + 1/4)$. En déduire l'étalement en énergie ΔH_α de l'état cohérent. L'état a-t-il une énergie bien déterminée ?

16. Donner l'évolution temporelle de l'état $|\psi(t=0)\rangle = |\alpha_0\rangle$. Montrer que celui-ci est toujours vecteur propre de a. Que remarque-t-on ?

6 Cas d'un oscillateur dans un champ électrique homogène

17. Identifier une situation physique où une particule subit à la fois un potentiel harmonique, et un champ électrique.

18. Écrire l'énergie classique associée à la particule en fonction du champ $\mathscr{E}$ constant selon l'axe Ox de l'oscillateur. En déduire le hamiltonien quantique H du problème.

19. Expliciter l'équation aux valeurs propres que vérifie une fonction propre ψ.

20. Montrer que le problème se ramène à celui d'un oscillateur harmonique, et donner l'expression des énergies propres du problème.

MQ TD6

MQ TD6

Oscillateur harmonique quantique

I Définitions

1) Exemples de l'oscillateur harmonique :

- en mécanique classique l'oscillateur harmonique est toujours une approximation.
  ↳ petites oscillations d'un pendule à l'ordre 1
  ↳ puit de potentiel près de l'équilibre
  ↳ particule dans puit de potentiel près de l'équilibre

- En quantique oscillateur harmonique exact :

  - EM → on compte les photons et on associe un hamiltonien à cette méthode → OH.

2) Pour un oscillateur selon un axe on a :

$\vec{F} = -k(x - x_0)\vec{u}$

$E_p = \frac{kx^2}{2}$ avec $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

donc $E_p = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ $\qquad H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

3) on factorise par $\hbar\omega$ H :

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{p^2}{\hbar\omega m} + \frac{m\omega x^2}{\hbar\omega}\right)$$

on pose $\tilde{p}^2 = \frac{1}{\hbar\omega m} p^2$ et $\tilde{x}^2 = \frac{m\omega}{\hbar} x^2$

alors $\boxed{H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\tilde{p}^2 + \tilde{x}^2\right)}$

en quantique : $\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2}$ avec $\vec{p} \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

4) $[\tilde{X}, \tilde{P}] = \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega m}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \underbrace{[X, P]}_{i\hbar} = \boxed{i}$

Q bonus (il faut l'appliquer direct!)

$$[X, P]\,\psi(x) = -i x \hbar \frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial(\psi x)}{\partial x}$$

$$= \cancel{-i x \hbar \frac{\partial\psi}{\partial x}} + \cancel{i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial x} \cdot x} + i\hbar\psi$$

$[X, P]\,\psi(x) = i\hbar\psi(x)$ donc $[X, P] = i\hbar$

donc on a P et X normalisés et interchangeables!

2 Opérateurs annihilation et création

5) $[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a$

$$= \frac{1}{2}\left[(\tilde{x}+i\tilde{p})(\tilde{x}-i\tilde{p}) - (\tilde{x}-i\tilde{p})(\tilde{x}+i\tilde{p})\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left(\tilde{x}^2+\tilde{p}^2-i\tilde{x}\tilde{p}+i\tilde{p}\tilde{x}-\tilde{x}^2-\tilde{p}^2-i\tilde{x}\tilde{p}+i\tilde{p}\tilde{x}\right)$$

$$= \frac{1}{2}\, i\, 2\,[\tilde{p}, \tilde{x}]$$

$$= i\left(-[\tilde{x}, \tilde{p}]\right) = 1$$

6) On constate que $\tilde{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)$

$$\tilde{p} = -\frac{i}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger)$$

donc $\boxed{\tilde{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(aa^\dagger + a^\dagger a)}$

7) On introduit l'opérateur $N = a^\dagger a$, opérateur nombre

$$\boxed{\begin{aligned}[N, a] &= a^\dagger a a - a a^\dagger a = [a^\dagger, a]a = -a \\ [N, a^\dagger] &= a^\dagger a a^\dagger - a^\dagger a^\dagger a = a^\dagger[a, a^\dagger] = a^\dagger\end{aligned}}$$

on peut exprimer $\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(a a^+ + a^+ a + \underbrace{a^+ a - a^+ a}\right)$

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(1 + 2\tilde{N}\right)} = \hbar\omega\left(\tilde{N} + \frac{1}{2}\right)$$

3) Spéctre de N

Soit λ vp de N de vp associé $|\phi\rangle$

8) $\Rightarrow N|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$ si

$\Rightarrow \langle\phi|N|\phi\rangle = \langle\phi|\lambda|\phi\rangle = \lambda$ en prenant $|\phi\rangle$ normalisée

$\Rightarrow \langle\phi|\hat{a}^+\hat{a}|\phi\rangle = \lambda$ on pose $a|\phi\rangle$ un vecteur ($\mathcal{H}$?)

donc $\boxed{\lambda = \|\hat{a}|\phi\rangle\|^2 = \||\psi\rangle\|^2 \geqslant 0}$

donc $\boxed{\lambda \geqslant 0 \quad \forall \lambda \text{ vp de } N!}$

9) On suppose que $N \neq 0$

en utilisant Q.7!

alors $N\hat{a}|\phi\rangle = \left(a\hat{N} + [\hat{N}, \hat{a}]\right)|\phi\rangle$

$$= a\lambda|\phi\rangle - \hat{a}|\phi\rangle$$

$$= a|\phi\rangle(\lambda - 1)$$

de même $N\hat{a}^+|\phi\rangle = (\lambda+1)a^+|\phi\rangle$ (à calculer).

3

MQ TD6

Donc en conclusion,

$a|\phi\rangle$ est vecteur propre de $\hat{N}$ avec une valeur propre $\lambda-1$, alors $\lambda \geq 1$ car $\lambda-1 \geq 0$ d'après la q. 8!

$a^+|\phi\rangle$ est vecteur propre de $\hat{N}$ avec une valeur propre $\lambda+1$

Si $\lambda = 0$

alors $\underbrace{\| a|\psi\rangle \|^2}_{\text{norme nulle!}} = 0 \Rightarrow a|\phi\rangle = 0$, vecteur nul

10) Pour le moment on a montré que une valeur propre de N est :

- positive ou nul
- si λ est valeur propre, alors $\lambda+1$ et $\lambda-1$ sont aussi valeurs propres.

Raisonons par l'absurde, si $\exists \lambda$ valeur propre de valeur non entière.

Si je crée une échelle descendante en appliquant a, alors à un moment j'obtiendrai $\lambda < 0 \Rightarrow$ impossible.

Si λ est entier, à un moment j'arriverai à $\lambda = 0$

alors le vecteur propre associé sera forcement 0! le vecteur nul.

et réappliquer a donnera toujours 0!

Donc λ forcement $\in \mathbb{N}$

$$\hat{H}|\phi\rangle = \hbar\omega\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)|\phi\rangle$$

$$\boxed{\begin{cases} \tilde{N} \rightarrow \text{nombre d'excitations élémentaires dans l'état } |\phi\rangle \\ a^{+} \rightarrow \text{crée une excitation} \quad \lambda \rightarrow \lambda+1 \\ a \rightarrow \text{détruit une excitation} \quad \lambda \rightarrow \lambda-1 \end{cases}}$$

On peut pas retirer indéfiniment de l'énergie en desexcitant!

rq: $a|\psi\rangle = 0$ n'est pas un état "physique" car il est non normalisable.

4) Vecteurs propres

1) $\psi_0(x)$ pour $\lambda = 0$

on sait que pour $\psi_0(x)$; $a|\psi_0(x)\rangle = 0$

donc on a l'équation: $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\tilde{X}\psi_0(x) + i\tilde{P}\psi_0(x)\right) = 0$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\,\psi_0(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega\hbar}}\frac{\partial\psi_0(x)}{\partial x}\right) = 0$$

4

MQTD6

$$\Leftrightarrow \frac{m\omega}{\hbar} x \varphi_0(x) + \frac{\partial \varphi_0(x)}{\partial x} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\varphi(x) = \varphi_0 \, e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}$$

Si on normalise on trouve $\varphi(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$

recurrence:

12) initialisation $n=0$ vérifiée à Q 11

on suppose $|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |\phi_0\rangle$

or $a^+|\phi_n\rangle = \alpha(n) \, |\phi_{n+1}\rangle$ et ϕ_{n+1} est normé

$$\underbrace{\langle \phi_n | a a^+ | \phi_n \rangle}_{\substack{n+1 \\ n+1}} = \alpha(n)\alpha^*(n) \langle \phi_{n+1} | \phi_{n+1} \rangle$$

$$\langle \phi_{n+1} | \phi_{n+1} \rangle = \frac{n+1}{|\alpha(n)|^2} \Rightarrow \alpha(n) = \sqrt{n+1}$$

$$|\phi_{n+1}\rangle = \frac{a^+ |\phi_n\rangle}{\alpha(n)}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}} (a^+)^{n+1} |\phi_0\rangle$$

d'où recurrence!