L'oscillateur harmonique

I Introduction :

Le système le plus simple de l'oscillateur harmonique est décrit par une particule de masse m se déplaçant dans un potentiel ne dépendant que de x et de la forme $V(x) = \frac{1}{2} k x^2$

Dans cette situation la particule se trouve attirée vers le centre où le potentiel est minimum par une force de rappel ne dépendant que de x et de la forme : $F = -kx$

En mécanique classique, le mouvement de la particule est décrit par une fonction sinusoïdale autour du point $x = 0$ et de pulsation $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

Ce modèle est valable à tout système en mouvement périodique autour de son point d'équilibre.

En M. Q nous avons l'exemple de la vibration moléculaire

On sait résoudre rigoureusement l'équation de Schrodinger et obtenir les fonctions propres (les fonctions d'onde) et les valeurs propres (les énergies des états du système étudié).

- L'étude classique consiste à résoudre l'équation fondamentale de la dynamique d'un système constitué par une masse accrochée à un ressort et en mouvement de va et de vient autour de son point d'équilibre.

II L'Hamiltonien quantique

1) Propriétés générale :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X) = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}kX^2 = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{1}{2}m\omega^2X^2$$

Les opérateurs X et P vérifient la relation de commutation

$$[X, P] = i\hbar$$

H étant indépendant du temps, l'étude quantique se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres :

$$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$$

En représentation $\{|x\rangle\}$:

$$\langle x|H|\varphi\rangle = E\langle x|\varphi\rangle = E\,\varphi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2\varphi(x) = E\,\varphi(x)$$

On se rappelle de ces 3 propriétés

- E est toujours positive (voir cours précédent)
- $\varphi(x)$ a une parité bien définie (voir cours précédent)
- Le spectre des états liés est discret et chaque valeur propre est non dégénérée (voir cours précédent)

2) Quantification canonique, operateurs creation et annihilation

2-a) Les operateurs $\hat{X}$ et $\hat{P}$

Nous connaissons deja les operateurs X et P; X et P sont hermitique (cours outils fondamentaux de la MQ II, bases continues).
On introduit les operateurs $\hat{X}$ et $\hat{P}$ sans dimension.

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, X \quad : \quad \sqrt{\frac{[M]\,[T^{-1}]}{[M]\,[L^2]\,[T^{-1}]}}\; X = \frac{X}{[L]} \text{ : sans dimension}$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\, P \quad : \quad \frac{P}{\sqrt{[M]\,[M]\,[L^2]\,[T^{-1}]\,[T^{-2}]}} = \frac{P}{[M]\,[L]\,[T^{-1}]} \text{ : sans dim.}$$

$$[\hat{X}, \hat{P}] = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \times \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\,[X, P] = i\hbar \times \frac{1}{\hbar} = i$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 = \frac{m\hbar\omega}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega}\hat{X}^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega\,(\hat{P}^2 + \hat{X}^2)$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\,\hat{H}$$

et $\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{P}^2 + \hat{X}^2)$

Nous allons chercher des solutions de l'équation aux valeurs propres $\hat{H}\,|\varphi_\nu\rangle = \nu\,|\varphi_\nu\rangle$ avec ν est sans dimension, c'est une valeur propre discrète ou continue.

2-b) Les operateurs a, a^+ et N

posons $\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^+ + a)$ et $\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^+ - a)$

$\hat{X}$ et $\hat{P}$ sont hermetiques au même titre que X et P

a et a^+ ne sont pas hermitiques, l'un est l'adjoint de l'autre.

avec $[a, a^+] = 1$ et $[a^+, a] = -1$ évidemment

$$a^+ a = \frac{1}{2}(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) + \frac{1}{2} i [\hat{X}, \hat{P}]$$

$$= \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) - \frac{1}{2}$$

d'où $a^+ a + \frac{1}{2} = \hat{H}$

Introduisons l'opérateur $N = a^+ a$ avec $N^+ = (a^+ a)^+ = a^+ a = N$

* Pour rappel $(AB)^+ = B^+ A^+$

Donc, N est hermétique et $H = N + \frac{1}{2}$ et les vecteurs propres de H sont aussi vecteurs propres de N.

* N ne commute pas avec a et a^+

$$[N, a] = [a^+ a, a] = a^+ \underbrace{[a, a]}_{=0} + [a^+, a] a = -a$$

$$[N, a^+] = [a^+ a, a^+] = a^+ [a, a^+] + [a^+, a^+] a = a^+$$

Par hypothèse, on modifie l'équation aux valeurs propres impliquant l'hamiltonien par une autre impliquant N.

On écrit : $N |\varphi_v\rangle = v |\varphi_v\rangle$

Après résolution de cette dernière, tenant compte que $|\varphi_v\rangle$ est vecteur propre de $\hat{H}$, nous écrivons la valeur propre de $\hat{H}$ en ajoutant $\frac{1}{2}$: la valeur propre de $\hat{H}$ est : $(v + \frac{1}{2})$.

$|\varphi_v\rangle$ est aussi vecteur propre de H et associée à la valeur propre $\hbar\omega(v + \frac{1}{2})$.

3) Determination du spectre:

leme 1 : Les valeurs propres ν de l'operateur N sont positives ou nulles.

dem : soit $|\varphi_\nu\rangle$ vecteur propre de N

Calculons la norme de $a|\varphi_\nu\rangle$

$$\| a|\varphi_\nu\rangle \|^2 = \langle \varphi_\nu | a^\dagger a | \varphi_\nu \rangle = \langle \varphi_\nu | N | \varphi \rangle = \nu$$

la norme est toujours positive ou nulle

lemme 2 : Soit $|\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre de N associé à ν

1) si $\nu = 0$ alors le ket $a|\varphi_{\nu=0}\rangle = 0$

2) si $\nu > 0$ le ket $a|\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre de N associé à la valeur propre $(\nu - 1)$

Dem : On sait que ν est la norme du vecteur $a|\varphi_{\nu=0}\rangle$ alors si la norme est nulle, le vecteur l'est aussi

soit $a|\varphi_\nu\rangle = 0$, $a^\dagger a|\varphi_\nu\rangle = N|\varphi_\nu\rangle = 0$

Cette equation est vraie pour tout vecteur nul, ils sont des vecteurs propres de N avec la valeurs propre $\nu = 0$

Soit $\nu > 0$ et $a|\varphi_\nu\rangle$ est non nul.
Montrons que $a|\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre de N et calculons sa valeur propre :

$$[N, a]|\varphi_\nu\rangle = Na|\varphi_\nu\rangle - aN|\varphi_\nu\rangle = -a|\varphi_\nu\rangle$$

d'où
$$Na|\varphi_\nu\rangle = aN|\varphi_\nu\rangle - a|\varphi_\nu\rangle = a\nu|\varphi_\nu\rangle - a|\varphi_\nu\rangle$$
$$= (\nu - 1)\, a|\varphi_\nu\rangle$$

$$Na|\varphi_\nu\rangle = (\nu - 1)\, a|\varphi_\nu\rangle$$

Lemme III : soit $|\varphi_\nu\rangle$ un vecteur propre de N, non nul

1) $a^+|\varphi_\nu\rangle$ est toujours non nul

2) $a^+|\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre de N associé à la valeur propre $\nu+1$

Dem :

1) $\| a^+|\varphi_\nu\rangle \|^2 = \langle\varphi_\nu| a a^+ |\varphi_\nu\rangle = \langle\varphi_\nu| a^+a + 1 |\varphi_\nu\rangle$

$= \langle\varphi_\nu| N+1 |\varphi_\nu\rangle = \nu + 1$

Pour rappel $[a^+, a] = a^+a - aa^+ = -1$

d'où $aa^+ = a^+a + 1$

ou $[a, a^+] = 1 = aa^+ - a^+a = 1$ et $aa^+ = a^+a + 1 = N+1$

D'après lemme 1, ν est toujours $\geqslant 0$, ainsi, on peut dire que $\nu + 1$ est toujours positif, d'où le vecteur $a^+|\varphi_\nu\rangle$ est toujours non nul quelque soit ν (la valeur propre de N).

2) $[N\, a^+]|\varphi_\nu\rangle = a^+|\varphi_\nu\rangle$

$N a^+|\varphi_\nu\rangle - a^+ N|\varphi_\nu\rangle = a^+|\varphi_\nu\rangle$

$N a^+|\varphi_\nu\rangle = a^+ N|\varphi_\nu\rangle + a^+|\varphi_\nu\rangle = a^+ \nu|\varphi_\nu\rangle + a^+|\varphi_\nu\rangle$

$= (\nu+1)\, a^+|\varphi_\nu\rangle$

d'où $N\, a^+|\varphi_\nu\rangle = (\nu+1)\, a^+|\varphi_\nu\rangle$

$a^+|\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $\nu+1$.

4) Le spectre de N est constitué d'entiers positifs

Considerons ν est demi-entier est ν est une valeur propre de N associé au vecteur propre $|\varphi_\nu\rangle$

d'où $n < \nu < n+1$ et n est entier $n \in \mathbb{N}$

Ainsi, si $|\varphi_\nu\rangle$ est un vecteur propre de N associé à ν

$a|\varphi_\nu\rangle$ " " " " " $\nu - 1$

$a^n|\varphi_\nu\rangle$ " " " " " $\nu - n$

D'après Lemme II

Faisons maintenant agir a sur le ket $a^n|\varphi_\nu\rangle$.

$\nu - n > 0$ d'après l'hypothèse initiale, d'après lemme II, l'action de a sur $a^n|\varphi_\nu\rangle$ donne un vecteur propre de N non nul et de valeur propre $\nu - n - 1$.

Or $\nu - n - 1$ est negative par hypothèse. $(n < \nu < n+1)$

On constate que si ν est demi-entier, on construit un ket propre de N de valeur propre negative (ce ket est non nul).

D'après lemme I, les valeurs propre de N sont ≥ 0. Ainsi, on rejette l'hypothese de ν non-entier !!

En conclusion : ν est toujours un entier positif ou nul. $(\nu \in \mathbb{N})$

si on prend $\nu = n$

$a^n|\varphi_n\rangle$ est vecteur propre non nul de N associé à la valeur propre $n - n = 0$ et $a^{n+1}|\varphi_n\rangle = 0$

Ainsi, l'action repetee de l'operateur a sur le vecteur $|\varphi_n\rangle$ est limitee quand n est un entier, sans pour autant obtenir un vecteur propre de N associé à une valeur propre negative.

Si $a^n|\varphi_n\rangle$ est un vecteur propre de N associé à la valeur propre nulle.