Titre : **Oscillateur harmonique : cas classique et quantique**

Présentée par : Eloïse Mestre **Rapport écrit par** : Eloïse Mestre

Correcteur : Jean Hare **Date** : 05/05/2020

Bibliographie de la leçon :			
Titre	**Auteurs**	**Éditeur**	**Année**
Physique tout-en-un PCSI	**B.Salamito, S.Cardini, D.Jurine, M-N.Sanz**	**Dunod**	2013
Mécanique quantique, cours et exercices corrigés	Christophe Texier	Dunod	2011
Mécanique quantique Tome I	Cohen-Tannoudji, Diu, Laloë	Hermann	1977

Plan détaillé

Niveau : L3
Prérequis : PFD, modélisation des forces, formalisme de Dirac, relation de commutation, Equation aux valeurs propres de l'Hamiltonien
Plan :

I. **OH classique : cas de la masselotte attachée à un ressort sur un plan horizontale**
II. **OH quantique**
III. **Application : Vibration des noyaux d'une molécule diatomique**

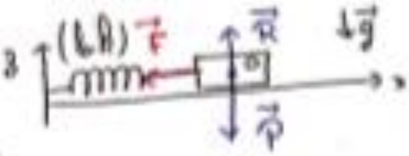
Intro : OH système important en physique car concerne tous les systèmes conservatifs évoluant autour d'une position d'équilibre comme en classique le pendule de faible amplitude ou la masselotte attachée à un ressort sur un plan horizontal, ou en quantique avec la vibration d'une molécule diatomique.
Dans toute la leçon on se limitera à l'étude des mouvements d'un oscillateur évoluant sur une seule dimension.

I- OH classiq cas de la masselotte sur un plan

1) Posi° du pb :

* Magnéto…

déf du sys : masselotte m



ref. : terrestre supposé galiléen

Bilan des forces :
$$\begin{cases} \text{Poids : } m\vec{g} = -mg\,\vec{u}_z \\ \text{réac° du support : } \vec{R} = R\,\vec{u}_z \quad R>0 \\ \text{rappel du ressort : } \vec{T} = -k(x-l_0)\,\vec{u}_x \end{cases}$$

forces de frottem^t fluide et solide négligé

PFD : $m\vec{a} = \vec{P} + \vec{R} + \vec{T}$

$\vec{u}_x$: $m\dfrac{d^2x}{dt^2} = -k(x-l_0)$

$m\ddot{x}$

2) Résolu°

changem^t de variable : écart à l'éq

$q = x - l_0 \qquad \ddot{q} = \ddot{x}$

$\Rightarrow \ddot{q}m + kq = 0$

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

$\boxed{\ddot{q} + \omega_0^2 q = 0}$ HO de pulsa° $\omega_0 = \sqrt{\dfrac{k}{m}}$

solu° de la forme $q(t) = A\sin(\omega_0 t) + B\sin(\omega_0 t)$, A et B dpdt des CI

si CI : $\begin{cases} q(t=0) = x(t=0) - l_0 = d \\ \dot{q}(t=0) = \dot{x} = v = 0 \end{cases} \Rightarrow \boxed{q(t) = d\sin(\omega_0 t)}$

3) Energie et portrait de phase

a) Energie

$$\begin{cases} E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 \\ E_p = \frac{1}{2}k(x-l_0)^2 = \frac{1}{2}kq^2 \end{cases}$$

$\boxed{E_m = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kq^2 = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 q^2}$

→ ⊙ force = 0

b) Portrait de phase

$\dot{q}\ddot{q} + \omega_0^2\dot{q}q = 0 \Rightarrow \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\dot{q}^2}{2} + \dfrac{\omega_0^2}{2}q^2\right) = 0$

$\dot{q}^2 + \omega_0^2 q^2 = C = \dot{q}(t=0) + \omega_0^2 q^2(t=0) = \omega_0^2 d^2$

$\frac{1}{2}$ cercle = conserva° de l'E totale du sys

Nous allons mtn réaborder ce pb à travers le formalisme de Dirac pour le syp quant^q, nous allons ~~montrer que~~ trouver le spectre et montrer qu'il est discret

II- Oscillat° harmonique quantique

1) Hamiltonien du système

gd^r classiq x, p $\xrightarrow[HQ]{}$ opérateurs $\hat{X}, \hat{P}$ tq $[\hat{X},\hat{P}] = i\hbar$

Connaissant l'Ⓔ classiq il est facile d'écrire l'Hamiltonien du syp :

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

on adimensionne le syp car rendu° plus simple

$$\tilde{H} = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} \; ; \; \underbrace{\tilde{P}^2 = \frac{\hat{P}^2}{\hbar\omega m} \; ; \; \tilde{X}^2 = \frac{m\omega}{\hbar}\hat{X}^2}_{[\tilde{X},\tilde{P}] = i}$$

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}(\tilde{P}^2 + \tilde{X}^2) = \frac{1}{2}\left((\tilde{X} - i\tilde{P})(\tilde{X} + i\tilde{P}) - i[\tilde{X},\tilde{P}]\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left((\tilde{X} - i\tilde{P})(\tilde{X} + i\tilde{P}) + 1\right) = \frac{(\tilde{X} - i\tilde{P})}{\sqrt{2}}\frac{(\tilde{X} + i\tilde{P})}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2}$$

on défini les opérat^{rs} : • d'annihila° : $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{X} + i\tilde{P})$

• de créa° : $\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{X} - i\tilde{P})$

et on peut écrire $\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\tilde{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)}$ où $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$ est l'opérat^{r} nombre

on peut montrer que $[\hat{a},\hat{a}^+] = 1$; $(\hat{a}^+\hat{a})^+ = \hat{a}^+\hat{a}$ et $[\hat{H}, \hat{a}^+\hat{a}] = 0$

2) Spectre du Hamiltonien

En choisissant c̄ base propre commune à $\hat{H}$ et $\hat{N}$ $\{|n\rangle\}$ base orthonormée des état propres de l'Hamiltonien, il faut alors résoudre l'eq. aux vap :

$$\boxed{\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(\hat{N} + \tfrac{1}{2}\right)|n\rangle = E_n|n\rangle}$$

l'eq° au vap de $\hat{N}$ est $\hat{N}|n\rangle = N_n|n\rangle$ ce qui permet de justifier que

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(N_n + \tfrac{1}{2}\right)}$$

On va démontrer que N_n est un entier naturel et que le spectre de l'OH est discret. Voyons l'effet des op annihilation et création sur les états propres de $\hat{H}$ et de $\hat{N}$: $|n\rangle$:

- $\hat{N}(\hat{a}^+|n\rangle) = (a^+a)(\hat{a}^+|n\rangle) = \hat{a}^+\underbrace{(\hat{a}\hat{a}^+)}_{\hat{a}^+\hat{a}+1\!\!1 = \hat{N}+1}|n\rangle = \hat{a}^+(\hat{N}+1\!\!1)|n\rangle = (N_n+1)\,a^+|n\rangle$

Donc $\hat{a}^+|n\rangle$ est $\vec{v}p$ de $\hat{N}$ associé à la vap (N_n+1).

- $\hat{N}(\hat{a}|n\rangle) = a^+aa|n\rangle = \underbrace{(\hat{a}^+\hat{a})}_{\hat{a}\hat{a}^+-1\!\!1}\hat{a}|n\rangle = \hat{a}\underbrace{(\hat{a}^+\hat{a})}_{\hat{N}}|n\rangle + 1\!\!1\,\hat{a}|n\rangle$
  $= \hat{a}\hat{N}|n\rangle + 1\!\!1\,\hat{a}|n\rangle = (N_n+1)\hat{a}|n\rangle$

Donc $\hat{a}|n\rangle$ est $\vec{v}p$ de $\hat{N}$ associé à la vap (N_n-1).

$\bar{c}$ $\hat{H}$ commute avec $\hat{N}$ ils sont aussi $\vec{v}ap$ de $\hat{H}$ associé aux vap $\begin{cases} \hbar\omega(N_n+\frac{3}{2}) \\ \hbar\omega(N_n-\frac{1}{2}) \end{cases}$

On peut se demander le signe des N_n :

norme de $\hat{a}|n\rangle$: $\|\hat{a}|n\rangle\|^2 = \langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \langle n|N|n\rangle = N_n\langle n|n\rangle = N_n \geq 0$

donc on note $N_n = n \geq 0$ et $\boxed{E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})}$

Avec $\left.\begin{array}{l}\hat{N}(\hat{a}^+|n\rangle) = (n+1)\,a^+|n\rangle \\ \text{et } \hat{N}(\hat{a}|n\rangle) = (n-1)\hat{a}|n\rangle\end{array}\right\}$ on montre que $\begin{cases}\hat{a}^+|n\rangle = C\,|n+1\rangle \\ \hat{a}|n\rangle = C'\,|n-1\rangle\end{cases}$

on sait que $\|\hat{a}|n\rangle\|^2 = n = C'^2\langle n-1|n-1\rangle = C'^2$ donc $\boxed{\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle}$

$\|\hat{a}^+|n\rangle\|^2 = \langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = \langle n|a^+\hat{a}+1\!\!1|n\rangle = \langle n|\hat{N}+1\!\!1|n\rangle$
$= n+1 = C^2\langle n+1|n+1\rangle$

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

3) Etats propres de OHQ.

$n \geq 0$ car $\hat{a}|0\rangle = \Theta |-1\rangle = 0$ donc l'état fondamental est $|0\rangle$

et son énergie est $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Il est donc non dégénéré

On peut montrer par récurrence que ~~montrer~~ le spectre de Θ est complètement non dégénéré et on va chercher à exprimer les différents états $|n\rangle$ à partir de l'état fonda $|0\rangle$.

On sait que ~~[illegible]~~

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

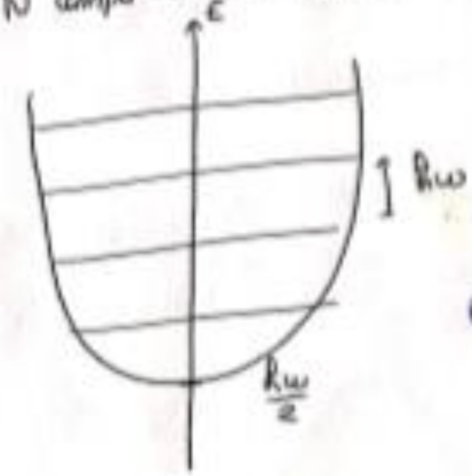
donc $a^+|0\rangle = |1\rangle$

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

$$(a^+)^n|0\rangle = a^+|n-1\rangle = \sqrt{n!}\,|n\rangle \quad \text{donc} \quad \boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle}$$

Rq : L'op $\hat{a}^+$ ($\hat{a}$) change l'état d'énergie E_n à l'état E_{n+1} (E_{n-1}).

Autrement dit $\hat{a}^+$ crée une excitation (photon, phonon...) pr le syst et $\hat{a}$ annihile cette excitation. $\hat{N}$ compte les états d'excitation.

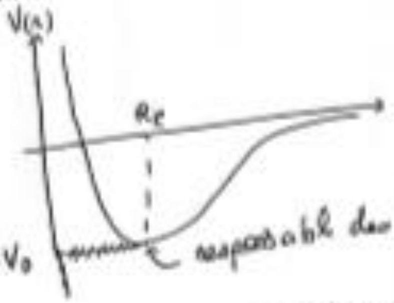


Θ du fonda $\neq 0$

III - Applica° : Vibra° des noyaux d'une molécule diatomiq

a) ⊕ d'interac°

Forma° d'une molécule à partir de 2 atomes ssi car le potentiel d'interac° présente un minimum :



responsable de la liaison chimiq

$V(r) \xrightarrow[r\to+\infty]{} 0$ car pas d'interac°

$V(r) \xrightarrow[r\to 0]{-1/r^6}$ car force de V.d.W interac° attractive

qd r très petite, force d'ordre ⊕ électroniq se reconvre, et V décroit plus vite, pour passer un min en R_e puis ↗ et devient très gd (pas d'interpénétra°)

dans l'approx de Born - Oppenheimer $\longrightarrow V(r) = C_4(r) + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$ où $e^2 = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}$ et $C_4(r)$

C_4 V⊕ électroniq fonda → ⊕ qd on considère la dynamique des ⊕

(mvt des e⁻ bcp plus rapide que celui des noyaux → on peut étudier séparément les (mvt))

b) mvt des noyaux et nv de vibra°

PR vibra° de faible amplitude, le mvt de vibra° et de rota° son découplé

Nous on s'intéresse à la vibra° qui revient à étudier le mvt d'une particule fictive de masse m tq $m = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$ masse réduite ds un potentiel V(r).

il faut résoudre $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V(r)\right)\varphi(r) = E\,\varphi(r)$

si on se limite aux faible vibra° ⟹ DL autour de $r = R_e$.

$$V(r) = V(R_e) + (r-R_e)\underbrace{\frac{dV}{dr}\Big|_{R_e}}_{=0} + \frac{1}{2}(r-R_e)^2\frac{d^2V}{dr^2}\Big|_{R_e}$$

$$= -V_0 + \frac{1}{2}(r-R_e)^2\underbrace{\frac{d^2V}{dr^2}\Big|_{R_e}}_{V''(R_e)}$$

⟹ OH de pulsa° $\omega = \sqrt{\frac{V''(R_e)}{m}}$

∃ donc des nv de vibra° discret d'⊕

$E_n = (n+1/2)\hbar\omega - V_0$ et les nv $|\varphi_n\rangle$ sont

Questions posées par l'enseignant

Question 1 : Vous avez dit en intro : « tout système conservatif pouvait se mettre sous la forme d'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 : Pour le portrait de phase vous avez obtenu un cercle plutôt qu'une ellipse. Pourquoi ?
Question 4 : En supposant que vous ne faites pas d'adimensionnement comme ce que vous venez de montrer, comment interpréter l'aire de l'ellipse ?
Réponse 3&4 : L'aire du cycle c'est l'intégrale de p dq. C'est donc l'action réduite.
action = intégrale du lagrangien = intégrale de $\mathcal{L}= p(\mathrm{d}q/\mathrm{d}t) - \mathfrak{H}$. H. Pour un système conservatif, on peut séparer $\mathfrak{H}$ et on obtient l'action réduite S^* . Du coup $S=\int p\ (\mathrm{d}q/\mathrm{d}t) * \mathrm{d}t$ = aire du cycle
Théorie semi-classique : l'action réduite est un multiple entier de h. Donc l'aire du cycle donne le numéro n de l'état de l'OH.
Question 5 : Est- ce qu'on peut toujours passer du problème classique au problème quantique en passant par les coordonnées généralisées ?
Réponse 5 : Oui, mais seulement 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 : La constante $\hbar$ intervient nécessairement dans les échelles d'énergie en quantique.
Question 7 : Peut-on faire le même adimensionnement en classique qu'en quantique (avec $\hbar$?
Réponse 7 : Ce qu'on peut faire c'est adimensionner par une action quelconque. En classique, on a enlevé toutes les échelles, à part une échelle de temps quand on considère l'OH.
Question 8 : Vous nous avez dit qu'une fois qu'on avait introduit X tilde et P tilde vous avez fait une factorisation avec le commutateur de X tilde et P tilde. C'est un peu parachuté. Heuristique ?
Réponse 8 : Symétrisation : $X^2+P^2 = ½[(X+iP)(X-iP) + (X-iP)(X+iP)]= ½(a^+a+aa^+)= a^+a+ ½$
Question 9 : Vous nous avez affirmé que N_n était un entier naturel. Comment on le démontre ?
Réponse 9 : En appliquant itérativement l'opérateur annihilation au ket $|N\rangle$ (où N estla vp de N) on obtient les états$\sqrt{N}\ |N\text{-}1\rangle$, $\sqrt{N(N\text{-}1)}\ |N\text{-}2\rangle$ etc, donc des état d'énergie arbitrairement basse, alors que par construction E>0. La contradiction est résolue si la récurrence s'arrête parce que à un certain point N-n=0, ce qui implique un état $|0\rangle$ tel que a $|0\rangle$=0 (qui est donc l'état fondamental) et que N est l'entier naturel n.
En appliquant itérativement a^+, on obtient les états $|n\rangle=(a^+)^n\ |n\rangle\sqrt{n!}$ pour tout entier naturel n.
Question 10 : Vous avez écrit : $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega/2$. Lapsus ? Réponse 10 : Oui c'est $\hbar\omega$
Question 11 : Peut-on dire des choses intéressantes sur $\langle X\rangle$ $\langle P\rangle$, ΔX et ΔP (tildes) dans l'état $|n\rangle$?
Réponse 11 : oui, et il faut les dire : $\langle X\rangle = \langle P\rangle = 0$ et $\Delta X = \Delta P = \sqrt{n+\frac{1}{2}}$.
Donc l'état fondamental $|0\rangle$ est minimal $\Delta X=\Delta P=1/2$, mais pas les autres.
Question 12 : Comment comparer le mouvement classique et le mouvement quantique ?
Réponse 12 : L'état fondamental a une énergie non nulle. Mais ce n'est pas suffisant.
Question 13 : Est ce que le fait que l'état fondamental n'ait pas une énergie nulle, c'est commun en mécanique quantique ?
Réponse 13 : C'est toujours le cas lorsqu'il y a confinement.
Question 14 : Vis à vis de la séparatoion des modes de rotation et vibration, je m'interroge.
Réponse 14 : En fait la rotation et la vibration sont en fait couplées lorsque les vibrations sont trop importantes.
Question 15 : C'est quoi l'ordre de grandeur des fréquences pour ces vibrations ?
Réponse 15 : IR moyen. *Exemple* Laser CO_2 λ~10 µm
Question 16 : Vous avez dit que V comprend $_{E1}$ et un potentiel de répulsion électrostatique. Mais pourquoi le potentiel électrostatique n'est pas dans E_1. C'est quoi E_1 ?

Question 17 : La répulsion à courte distance :principe de Pauli ou répulsion coulombienne ?
Réponse 17 : Cela dépend a priori si on considère deux protons et un électron (H_2^+, molécule la plus simple) ou qu'il y a aussi un cortège électronique d'électrons non liants. Mais dans tous les cas, le principe d'exclusion de Pauli n'est pas une (5è) interaction. Le principe d'antisymétrisation pour les fermions modifie simplement les termes d'interaction électrostatique.
Question 18 : Vous avez une idée de comment appliquer tout cela aux photons ?

Partie réservée au correcteur

Avis général sur la leçon (plan, contenu, etc.)
Globalement c'était bien !
Pas grand-chose à dire, à part qu'il aurait fallu être au clair sur comment redémontrer le caractère entier des valeurs propre. (cf réponse 9 détaillée dans les questions).
On ne peut pas faire l'impasse sur les valeurs moyennes et dispersions de X et de P (cf réponse 11 détaillee).
Il serait aussi utile de monter la « tête » des fonctions d'onde, même si il n'est pas question de faire des calculs sur les polynômes de Herrmite.

Notions fondamentales à aborder, secondaires, délicates
La méthode reposant sur les opérateurs d'annihilation et de création est une bonne illustration d l'application des postulats et du formalisme et évite tous les calculs compliqués, et c'est donc la méthode à privilégier.
Il convient de justifier au moins de façon heuristique l'utilisation de ces opérateurs, comme permettant de factoriser le hamiltonien.

Dans une leçon comme celle-là, un point de bonus important serait de justifier les analogies entre classique et quantiques. Dans ce point de vue, le message *fondamental* est que, si on calcule la valeur moyenne de X dans u état stationnaire, la seule fréquence qui apparaît est ω (isochronisme).

Pour aller plus loin, différentes approches complémentaires (faire un choix) :
* Quantification semi-classique des variables d'action (cf réponse 3&4)
* Adimensionner dans le cas classique par l'action réduite (réponse 7), puis écrire les équations de Hamilton/Ehrenfest : $\dot{X} = \omega P$ et $\dot{P} = -\omega X$, qui conduisent à introduire le variables normales classiques $\alpha = (X + i\,P)/\sqrt{2}$, analogue de a, et idem pour α^* et a^{+}. La différence est alors la non-commutation de a et a+, donnant lieu à l'énergie de confinement ou « l'énergie de point zéro »
* *Plus avancé* : Introduire les états cohérents, vecteurs propre de a, dont les valeurs moyennes de X et de P se comportent comme les équivalents classiques, et qui sont, à tout instant, minimaux.

Expériences possibles (en particulier pour l'agrégation docteur)
Néant

Bibliographie conseillée

Cohen (maintenant chez EDPsciences) ou Aslangul très bien.
Texier OK.
Éviter le Tout-en-un pour la Meca Q.