

LP - Oscillateur harmonique en mécanique classique et quantique

Cassandra Dailedouze - Joseph Delpy

2021

Niveau : L3

Prérequis

- Equation de l'oscillateur harmonique, résolution mathématique
- Dynamique en régime libre
- Mécanique quantique : équations de Schrödinger stationnaire, puits infini

L'idée était de faire une leçon où tout les détails "techniques" sur l'OH était déjà connus, et de faire émerger le sens universel qu'à le modèle pour un très grand nombre de systèmes physiques. Pour la partie quantique : se restreindre aux formalisme des fonctions d'ondes, et discuter un maximum les points communs et différences avec la méca classique.

Introduction

Systèmes modélisables par des oscillateurs harmoniques, sous des hypothèses de "petits mouvements"

systèmes masses ressorts (faible allongement), pendule simple (mouvement à des petits angles)

Constatation : des systèmes variés peuvent être modélisés par une équation semblable sous réserve de faire des hypothèses qui se ressemblent également à chaque fois. On va essayer de généraliser, et de comprendre pourquoi on a ce caractère universel.

On va également voir comment transposer ça au monde quantique, puisque que bien souvent on doit modéliser des vibrations de particules quantiques.

1 Importance de l'oscillateur en mécanique classique

1.1 Dynamique autour de positions d'équilibre

Exemple sur slide du pendule simple avec le théorème du moment cinétique. Rappel de l'équation de l'oscillateur harmonique.

$\theta = 0$ position d'équilibre stable. On va s'en écarter modérément :

Approximation des petits angles : $\sin(\theta) = \theta$

Reformulation en terme d'énergies : $V(\theta) = V(\theta = 0) + mgl(1 - \cos(\theta))$ or $\cos(\theta) \approx 1 - \frac{\theta^2}{2}$

donc $V(\theta) = \frac{mgl\theta^2}{2}$

C'est l'approximation parabolique. Conséquence directe :

$$F = -\frac{\partial V(\theta)}{\partial \theta} = -mgl\theta$$

Force linéaire, donc équations linéaires.
Cas général : paramètre x proche de x^*

Pour un système physique quelconque, développement du potentiel autour de la position d'équilibre. On voit que le profil parabolique sort de manière tout à fait générale (d'où l'universalité).

Pérez, chapitre 10, p.138, Brasselet, chapitre 4, p.94

1.2 Aspects énergétiques, portraits de phase

Énergie conservée en faisant l'intégrale première de l'équation du mouvement. On introduit les solutions pour la position et la vitesse dans l'intégrale première. On exprime l'énergie en fonction de l'amplitude et de la fréquence.

Remarques :

- L'énergie oscille entre l'énergie potentielle et cinétique.
- L'énergie est en moyenne équirépartie entre ces deux formes.

Dicussion de l'espace des phases : la trajectoire est une ellipse, et l'équation de conservation de l'énergie est l'équation géométrique de cette ellipse.

Code python pour montrer l'ellipse qui change de taille si on augmente l'amplitude des oscillations.

Correction de l'oscillateur harmonique si l'ellipse a des "coins" qui se forment : termes **non-linéaires**.

BFR mécanique 1, chapitre 11, p.189 ; Brasselet, chapitre 4, p.97-98

1.3 Vibration d'une molécule diatomique

Énergie potentielle d'une molécule diatomique : discuter l'allure et les termes en jeu
Développement autour de la position d'équilibre : approximation parabolique comme discuté précédemment.

Raisonnement en ordre de grandeur : Energie de dissociation sur une courbe d'énergie potentielle $E_d \approx ka^2$

$$a \approx 10^{-10} \text{ m}$$

$$m \approx 10^{-25} \text{ kg}$$

$$E_d \approx 10^{-17} \text{ J/atome}$$

On trouve donc : $f_0 \approx 10^{13} \text{ Hz}$, ce qui est satisfaisant, car dans l'IR.

Brasselet, chapitre 4, p.100

Transition : spectroscopie infrarouge : on trouve en réalité des bandes d'absorption et à cause des dimensions du modèle, on se doute qu'une modélisation quantique est nécessaire.

2 Oscillateur harmonique quantique

On veut montrer la manière donc le modèle s'adapte au formalisme de la mécanique quantique : principe de correspondance : position et impulsion

2.1 Hamiltonien et états propres

A $x(t)$ on associe \hat{X} , A $p(t)$ on associe \hat{P}

Présentation du Hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{X}^2}{2}$.

P correspond à $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$: écriture de l'équation de schrodinger stationnaire.

On ne va pas obtenir ces solutions car l'étude dépasse le cadre de cette leçon mais on va les regarder pour voir la physique derrière : pour ça, on réalise une simulation numérique.

Code python G.Dewaele pour visualiser les fonctions d'ondes

Discuter les solutions : fonction d'ondes paires et impaires (parité du hamiltonien).

Donner les énergies, discuter leur écartement, l'énergie du fondamental

Les énergies sont quantifiées : $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$

Code python G.Dewaele pour visualiser les fonctions d'ondes

Propriétés : les énergies de ces fonctions sont équidistantes

Comparaison avec les états propres d'un puits infini : Probabilité de présence non nulle en dehors du potentiel harmonique ce qui n'est pas le cas avec le puits infini + niveaux pas équidistants pour le puits infini. Points communs : fonction d'onde de nombre quantique n à n noeuds.

Basdevant/Dalibard, cours de l'X, chapitre 4-2, p.80 ; Cohen, chapitre V, p.499 ; cours de Patrice Hello de L3

2.2 Etude des positions et impulsions pour le fondamental

Cohen, chapitre V-C, p.499 Cohen, chapitre V-D, p.501 Le fondamental de l'oscillateur classique est juste la position de repos (pas de mouvement = pas d'énergie). C'est différent en méca Q ! Mais il y a aussi pas mal de points communs.

Le fondamental est très intéressant car c'est à la fois le plus étonnant et le plus "étudiable" : $\varphi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$

Montrer que les moyennes de X et P sont nulles. Calculer les variances (racine de la moyenne de l'observable au carré puisque les observables sont à moyenne nulle).

On retrouve avec ça le principe d'incertitude de Heisenberg, qui est ici une égalité (**la gaussienne sature l'inégalité de Heisenberg**) On insiste sur le fait que le fondamental n'est pas à énergie nulle. Discuter les valeurs moyennes ainsi que les écarts-types. Boucler sur l'équipartition de l'énergie comme en classique.

Basdevant/Dalibard, cours de l'X, chapitre 4-2, p.80 ; Cohen, chapitre V, p.501 ; Messiah, tome 1, chapitre XII

3 Conclusion

Parler de la modélisation de l'oscillation de molécules diatomiques autour de la distance moyenne, Discussion du spectre infrarouge de la molécule de CO₂, qui présente des pics correspondant aux transitions entre niveaux vibrationnels.

4 Bibliographie

- Pérez, Mécanique, chapitre 10
- Brasselet, Mécanique PCSI/MPSI, chapitre IV
- BFR, Mécanique 1, chapitre 11/12
- Cohen, Mécanique quantique, tomes I
- Messiah, Mécanique quantique, chapitre XII

5 Questions :

- Quels effets sont à prendre en compte lorsque l'on fait de la spectroscopie ? Quelle approximation fait-on ? On fait l'approximation que les absorptions se font un photon par un photon Couplage auquel il faut faire attention ? Les niveaux rotationnels et vibrationnels sont découplés.
- Comment obtenir dans un état pas fondamental la moyenne de x ? On peut utiliser le théorème d'Ehrenfest. Pour les valeurs moyennes, en appliquant ce théorème à l'impulsion on retrouve le pfd.
- Est ce que c'est surprenant que le fondamental sature Heisenberg ? C'est normal si on regarde la forme de la fonction d'onde : la gaussienne minimise les fluctuations.
- Etat cohérent se décompose sur la base des fonctions d'ondes propres de l'oscillateur harmonique : état semi-classique. On peut les avoir en travaillant avec des lasers (états de Glauber) : on peut les obtenir expérimentalement et faire des expériences. Définition ? état propre de l'opérateur annihilation. Du point de vue des fluctuations, leur particularité ? l'étendue des fluctuations dans l'espace des phases $\Delta X \Delta P$ vaut aussi $\hbar/2$. ils contiennent plus d'énergie que le fondamental et ont des fluctuations qui sont très faibles.
- Systèmes proches de l'équilibre que l'on décrit dans cette leçon, est ce qu'il existe des systèmes qui sont exactement des oscillateurs harmoniques ? par exemple la lumière quantification de A jauge de Coulomb etc. Champs électromagnétique (isolé) : oscillateur harmonique exact
- Y-a-t-il des cas où on ne peut pas s'en tirer avec des approximations d'oscillateurs harmoniques ? Dès qu'il y a des non linéarités, par exemple des bifurcations. Supraconductivité contre exemple introduit en quantique. En gros dès qu'il y a du couplage non-linéaire (transitions de phase par ex) Spectre de l'atome d'hydrogène effets non linéaires (lesquels ?..)
- Potentiel d'une molécule diatomique : Pourquoi cette allure ? Partie répulsive peut venir d'un moment cinétique orbital : énergie de rotation des deux corps autour de leur centre de masse ou électrostatique : interpénétration des nuages électroniques empêché ; principe d'exclusion de Pauli : quand on approche les nuages on va forcer les électrons à occuper les mêmes niveaux mais ils n'aiment pas ça... A grande distance, attraction dipôle instantanée dipôle instantanée en $1/r^6$.
- Que représente l'aire du portrait de phase ? Action du système en mécanique hamiltonienne. A une dimension près, quantité d'énergie dans le système.
- qu'est ce que ça fait quand on excite trop fort le pendule ? sur le portrait de phase ? déformations points anguleux, termes supplémentaires à ajouter dans l'expression de l'énergie. Séparatrice et mouvement de fronde sur les bords du portrait de phase

- approximation des petits angles valides jusqu'à environ 30° (c'est beaucoup en vrai)
- Couplage des oscillateurs : vibrations des atomes autour des positions d'équilibre, toute la matière condensée...

Ca marche bien comme ça, tout est à conserver.