TD de tutorat 9 : oscillateur harmonique quantique

Exercice 1 : oscillateur harmonique quantique et parité

1. . En considérant le hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{X}^2$, les équations d'Ehrenfest donnent les même dynamiques pour $\langle \hat{X} \rangle$ et $\langle \hat{P} \rangle$, que x et p d'un oscillateur harmonique classique. Donc $\hat{H}$ est correspond bien à la version quantique de l'oscillateur harmonique.

. On définit $X_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ et $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{X}}{X_0} + i \frac{X_0}{\hbar} \hat{P} \right)$

donc $\hat{X} = \frac{X_0}{\sqrt{2}} \left(\hat{a} + \hat{a}^+ \right)$ $\qquad$ $\hat{P} = \frac{\hbar}{\sqrt{2} X_0 i} \left(\hat{a} - \hat{a}^+ \right)$

Alors $\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right)$

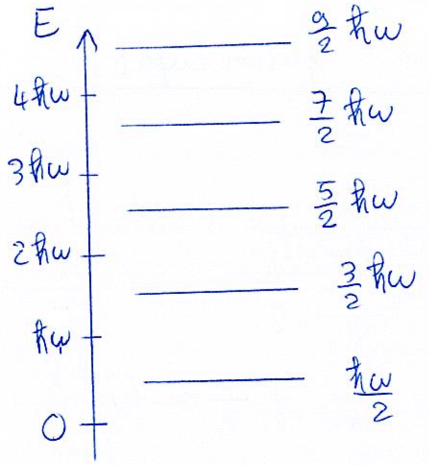
. On note les états propres de $\hat{N}$ $|n\rangle$: $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$.

On peut alors montrer que $n \in \mathbb{N}$.

. Alors $\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega \left(\hat{N}|n\rangle + \frac{1}{2}|n\rangle \right) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle$

donc le spectre de $\hat{H}$ (les valeurs propres de $\hat{H}$) sont :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad , \quad n \in \mathbb{N}$$



2. • $\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^+)$

$$[\hat{x}, \hat{a}^+] = \frac{x_0}{\sqrt{2}}[\hat{a}, \hat{a}^+] + \frac{x_0}{\sqrt{2}}[\hat{a}^+, \hat{a}^+]$$

or $[\hat{a}, \hat{a}^+] = \mathbb{1}$ et $[\hat{a}^+, \hat{a}^+] = 0$

donc $[\hat{x}, \hat{a}^+] = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\mathbb{1}$

• $$[\hat{x}^k, \hat{a}^+] = \hat{x}[\hat{x}^{k-1}, \hat{a}^+] + \underbrace{[\hat{x}, \hat{a}^+]}_{\frac{x_0}{\sqrt{2}}\mathbb{1}}\hat{x}^{k-1}$$

$$= \hat{x}^2[\hat{x}^{k-2}, a^+] + \underbrace{\hat{x}\underbrace{[x, a^+]}_{\frac{x_0}{\sqrt{2}}\mathbb{1}}x^{k-2}}_{\frac{x_0}{\sqrt{2}}x^{k-1}} + \frac{x_0}{\sqrt{2}}x^{k-1}$$

$$= x^{k-1}[x, a] + (k-1)\frac{x_0}{\sqrt{2}}x^{k-1}$$

par récurrence

$$[x^k, a^+] = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \times k\, x^{k-1}$$

3. Puisque $|0\rangle$ est paire, $\hat{\Pi}|0\rangle = |0\rangle$.
(si $|0\rangle$ était impaire, $\hat{\Pi}|0\rangle = -|0\rangle$)

En effet, l'état fondamental est une gaussienne :

$$\varphi_0(x) = \langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} = (x_0\pi)^{-1/4} e^{-x^2/(2x_0^2)} \times H_0(x)$$

$$= (x_0\pi)^{-1/4} e^{-x^2/(2x_0^2)}$$

4. Pour calculer $\hat{\Pi}^\dagger \hat{X} \hat{\Pi}$, on va l'appliquer sur une base où le calcul est facile : la base position $\{|x\rangle\}$

$$\hat{\Pi}^\dagger \hat{X} \hat{\Pi}|x\rangle = \hat{\Pi}^\dagger \hat{X}|-x\rangle$$ par définition de l'opérateur $\hat{\Pi}$: $\hat{\Pi}|x\rangle = |-x\rangle$

$$= \hat{\Pi}^\dagger(-x|-x\rangle)$$

$$= -x\,\hat{\Pi}^\dagger|-x\rangle$$

or $\hat{\Pi}^\dagger|y\rangle = (\langle y|\hat{\Pi})^\dagger$

or $\hat{\Pi}|y\rangle = |-y\rangle$

donc $\langle y|\hat{\Pi} = \langle -y|$

donc $\hat{\Pi}^\dagger|y\rangle = (\langle -y|)^\dagger = |-y\rangle \quad \forall y \in \mathbb{R}$

puis $\hat{\Pi}^\dagger \hat{X} \hat{\Pi}|x\rangle = -x|x\rangle = -\hat{X}|x\rangle$

et cela est vrai $\forall |x\rangle$ de la base position, donc pour n'importe quel vecteur de $\mathcal{H}$.

Donc $\hat{\Pi}^\dagger \hat{X} \hat{\Pi} = -\hat{X}$

(on peut aussi montrer que $\hat{\Pi}^\dagger \hat{P} \hat{\Pi} = -\hat{P}$, en appliquant sur la base impulsion $\{|p\rangle\}$, et en utilisant que $\hat{\Pi}|p\rangle = |-p\rangle$)

5. • D'abord, $\langle \Pi^\dagger X^k \Pi \rangle_0 = \underbrace{\langle 0| \Pi^\dagger}_{= \langle 0|} X^k \underbrace{\Pi |0\rangle}_{= |0\rangle}$ d'après Q3.

$$= \langle 0| X^k |0\rangle$$

• D'autre part $\Pi^\dagger \Pi |x\rangle = \Pi^\dagger |-x\rangle = |x\rangle$,

donc $\Pi^\dagger \Pi = \mathbb{1}$

alors $\Pi^\dagger X^k \Pi = \Pi^\dagger X \, \mathbb{1} \, X^{k-1} \Pi$

$$= \Pi^\dagger X \Pi^\dagger \Pi X^{k-1} \Pi$$

$$\underset{(\dots)}{=} \Pi^\dagger X \Pi . \Pi^\dagger X \Pi \underbrace{\dots\dots}_{k \text{ fois}} \Pi^\dagger X \Pi$$

$$= (\Pi^\dagger X \Pi)^k$$

$$= (-X)^k \quad \text{d'après Q4.}$$

donc $\langle \Pi^\dagger X^k \Pi \rangle = \langle 0| (-1)^k X^k |0\rangle = (-1)^k \langle 0| X^k |0\rangle$

. alors, en regroupant les 2 expressions :

$\langle X^k \rangle_0 = (-1)^k \langle X^k \rangle_0 = -\langle X^k \rangle_0$ pour k impair

donc $\langle X^k \rangle_0 = 0$

. Dans le cours, on l'a démontré en utilisant l'argument que $X^k = \left(\frac{x_0}{\sqrt{2}}\right)^k (a + a^+)^k$ qui comporte des termes en

$(a^+)^i a^{k-i}$ en développant le binôme de Newton

Or si k impair, on aura toujours un nombre différent de a^+ et de a. En appliquant sur n'importe quel $|n\rangle$, on obtiendra $|n-(k-i)+i\rangle$

$= |n-k+2i\rangle$

En calculant $\langle n|X^k|n\rangle$, on obtiendra donc des terme en $\langle n|n-k+2i\rangle = 0 \quad \forall i$ car k impair

donc $\langle X^k\rangle_n = 0$ si k impair

6. $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \qquad \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$

(on en déduit d'ailleurs que $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle$)

. alors $\hat{a}|0\rangle = 0$ (ça c'est la définition de l'état $|0\rangle$)

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

et, en prenant l'hermitien conjugué :

$\langle 0|\hat{a}^+ = (\hat{a}|0\rangle)^+ = 0$

et $\langle 0|\hat{a} = (\hat{a}^+|0\rangle)^+ = |1\rangle^+ = \langle 1|$

$$\langle X^{k+1}\rangle_0 = \langle X^k X\rangle_0 = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\langle 0|X^k(a+a^+)|0\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\langle 0|X^k a^+|0\rangle$$

or, d'après Q.2. $[X^k, a^+] = X^k a^+ - a^+ X^k = \frac{x_0}{\sqrt{2}} k X^{k-1}$

donc $X^k a^+ = a^+ X^k + \frac{x_0}{\sqrt{2}} k X^{k-1}$

alors $$\langle X^{k+1}\rangle_0 = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \underbrace{\langle 0|a^+ X^k|0\rangle}_{=0} + \frac{x_0^2}{2} k \langle 0|X^{k-1}|0\rangle$$

$$= k\frac{x_0^2}{2}\langle X^{k-1}\rangle_0$$

7. $$\langle X^k\rangle_0 = (k-1)\frac{x_0^2}{2}\langle X^{k-2}\rangle_0$$

par récurrence, $$\langle X^k\rangle_0 = (k-1)(k-3)\dots(k-(k-3))\left(\frac{x_0^2}{2}\right)^{\frac{k}{2}-2}\langle X^2\rangle_0$$

$$= (k-1)(k-3)\dots 3\times 1\left(\frac{x_0^2}{2}\right)^{\frac{k}{2}}\underbrace{\langle X^0\rangle_0}_{=\langle \mathbb{1}\rangle_0 = 1}$$

$$= \left(\frac{x_0^2}{2}\right)^{\frac{k}{2}}(k-1)(k-3)\times\dots\times 3\times 1$$

or $$(k-1)(k-3)\times\dots\times 3\times 1 = \frac{k\times(k-1)\times(k-2)(k-3)\dots\times 3\times 2\times 1}{k\times(k-2)\times\dots\times 2}$$

$$= \frac{k!}{2^{k/2}(k/2)\left(\frac{k}{2}-1\right)\dots\times 1} = \frac{k!}{2^{k/2}\left(\frac{k}{2}\right)!} \quad \text{pour } k \text{ pair}$$

donc $$\langle X^k\rangle_0 = \frac{x_0^k}{2^{k/2}}\frac{k!}{2^{k/2}\left(\frac{k}{2}\right)!} = \frac{k!}{2^k\left(\frac{k}{2}\right)!}x_0^k$$

. D'après le cours $\langle X^2\rangle_0 = \frac{\hbar}{2m\omega}(2\times 0+1) = \frac{X_0^2}{2}$

or notre formule donne $\langle X^2\rangle_0 = \frac{2!}{2^2(\frac{2}{2})!}X_0^2 = \frac{2}{4}X_0^2 = \frac{X_0^2}{2}$

$\Rightarrow$ OK

. D'après le cours $\langle X^4\rangle_0 = \frac{3\hbar^2}{4m^2\omega^2}(2\times 0^2+2\times 0+1) = \frac{3}{4}X_0^4$

notre formule donne $\langle X^4\rangle_0 = \frac{4!}{2^4(2)!}X_0^4 = \frac{4\times 3\times 2}{4\times 4\times 2}X_0^4 = \frac{3}{4}X_0^4$

$\Rightarrow$ OK

8. On a $a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{X}{X_0} + i\frac{X_0}{\hbar}P\right)$

donc $\Pi^+ a^+ \Pi = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{X_0}\Pi^+ X\Pi + \frac{i}{\sqrt{2}}\frac{X_0}{\hbar}\Pi^+ P\Pi$

$= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{X_0}(-X) + \frac{i}{\sqrt{2}}\frac{X_0}{\hbar}(-P)$

$\Pi^+ a^+ \Pi = -a^+$

. puis en multipliant à gauche par Π et à droite par Π^+ :

$\underbrace{\Pi\ \Pi^+}_{=\mathbb{1}} a^+ \underbrace{\Pi\ .\ \Pi^+}_{=\mathbb{1}} = \Pi(-a^+)\Pi^+$

donc $\Pi a^+ \Pi^+ = -a^+$

9. Pour savoir si $|n\rangle$ a une parité définie (pair ou impair), on calcul $\Pi|n\rangle$ et on regarde si cela donc $\pm|n\rangle$.

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

or $\Pi^+\Pi|0\rangle = \Pi^+|0\rangle$

et $\Pi^+\Pi|0\rangle = \mathbb{1}|0\rangle$

donc $\Pi^+|0\rangle = |0\rangle = \Pi|0\rangle$

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

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

. Donc si n est pair, $|n\rangle$ est pair et si n est impair, $|n\rangle$ est impair.

10. Un état cohérent est défini comme $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$.

Et d'après le cours, on démontre que $|\alpha\rangle = \sum_{n\geq 0} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$

$$= \sum_n \frac{\alpha^n}{n!} (a^+)^n |0\rangle.$$

. Alors $\Pi|\alpha\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \Pi|n\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} (-1)^n |n\rangle$

$$= \sum_n \frac{(-\alpha)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = |-\alpha\rangle$$

Alors, si $\alpha \neq 0$, $|-\alpha\rangle \neq |\alpha\rangle$ ou $-|\alpha\rangle$, donc $|\alpha\rangle$ n'est pas un état propre de Π : il n'est ni pair ni impair.

. Si $\alpha = 0$, $|\alpha\rangle = |0\rangle$, qui est pair, comme vu précédemment.