Chapitre 2

Oscillateur Harmonique

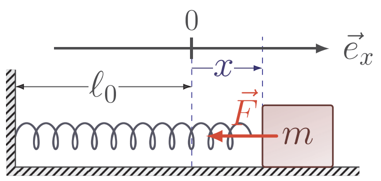
L'oscillateur harmonique est un modèle simple utilisé en physique pour décrire le comportement d'une particule massive au voisinage d'un minimum de son potentiel. L'oscillateur harmonique est l'un des rares problèmes qui possèdent des solutions exactes et il permet de comprendre le comportement de plusieurs systèmes comme la vibration des molécules autour de la position d'équilibre, les excitations vibratoires des solides (phonos) et la quantification du champ magnétique(photons).

2.1 Oscillateur harmonique classique

En mécanique classique, un oscillateur harmonique linéaire est une particule de masse m se déplaçant selon l'axe (ox) *par exp.* et soumise à une force de rappel $\vec{F} = -kx\vec{e}_x$, k est une constante positive.
La force $\vec{F}$ dérive du potentiel :

$$\boxed{V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2} \tag{2.1}$$

avec $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$



Dans le formalisme hamiltonien de la mécanique classique. La particule est décrite par les variables dynamiques $\{x, p\}$. L'évolution du système physique est régi par le hamiltonien :

$$\boxed{\mathcal{H} = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2.} \tag{2.2}$$

Les équations du mouvement de **Hamilton** sont données par :

$$\dot{x} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \frac{p}{m} \tag{2.3}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega^2 x \tag{2.4}$$

après dérivation de ces deux expressions on obtient les équation de **Newton** :

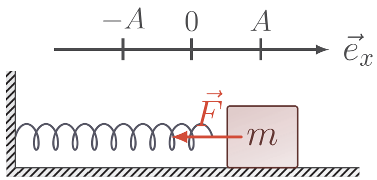
$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0, \quad \ddot{p} + \omega^2 p = 0 \tag{2.5}$$

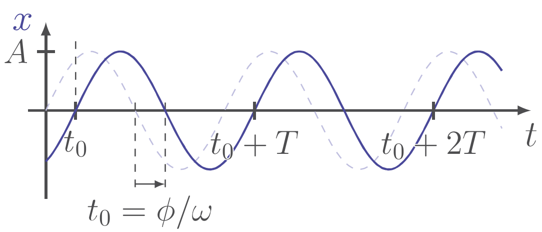
les solution des équations de Newton (2.5) s'écrivent comme suit :

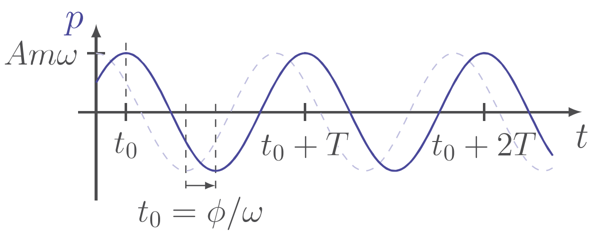
$$x(t) = A\sin(\omega t + \varphi) \tag{2.6}$$

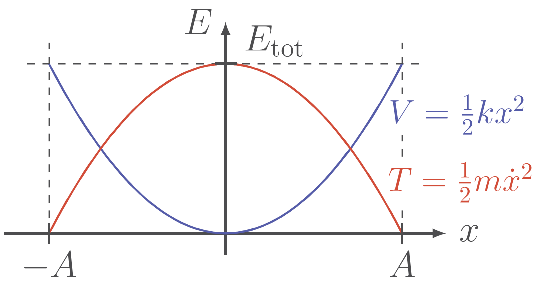
$$p(t) = Am\omega\cos(\omega t + \varphi) \tag{2.7}$$

La particule est donc animée d'un mouvement oscillatoire sinusoïdal autour du point $x = 0$ (d'amplitude A et de pulsation ω).









- toutes les valeurs de A son admises.
- puisque l'énergie totale est constante, $E = \dfrac{1}{2}m\omega^2 A^2$. On déduit que toutes les valeurs de l'énergie sont admises.
- la masse m ne peut se trouver à l'extérieur $[-A, A]$

2.2 Oscillateur harmonique quantique

Pour passer de la mécanique classique à la mécanique quantique, on utilise les règles de quantification : les variables dynamiques x et p sont remplacées par les observables X et P_x qui satisfont à la relation de commutation :

$$\boxed{[X, P_x] \;=\; i\hbar.}$$

L'évolution d'un système quantique est régie par l'opérateur Hamiltonien :

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \tag{2.8}$$

le système est conservatif car $\dfrac{\partial H}{\partial t} = 0$, donc le problème se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres :

$$H\,|\varphi\rangle = E\,|\varphi\rangle \tag{2.9}$$

Pour résoudre cette équation, on se place dans une représentation particulière, par exemple dans la représentation $\{|x\rangle\}$ où $|x\rangle$ est un état propre de l'opérateur X et $P_x = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial x}$:

$$\langle x|\, H\,|\varphi\rangle \;=\; \langle x|\, E\,|\varphi\rangle \tag{2.10}$$

qui peut s'écrire sous forme d'une équation différentielle :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2 - E\right)\varphi(x) \;=\; 0.} \tag{2.11}$$

Cette équation peut être résolue en utilisant l'une des méthodes suivantes :

— méthode des séries des puissances basée sur l'analyse asymptotique,

— méthode algébrique basée sur le formalisme de Dirac et les relations de commutations.

2.2.1 L'approche algébrique de l'oscillateur harmonique quantique

Dans le but de simplifier l'étude, il est commode de réécrire le Hamiltonien de l'oscillateur harmonique quantique en terme des opérateurs sans dimension.

$$\begin{aligned} H &= \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2X^2 \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}\left[\frac{P_x^2}{m\hbar\omega} + \frac{m\omega X^2}{\hbar}\right] \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{p}^2 + \hat{q}^2\right) \end{aligned}$$

$$\boxed{H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{p}^2 + \hat{q}^2\right).} \tag{2.12}$$

avec

$$\hat{p} = \frac{P_x}{\sqrt{m\hbar\omega}} \quad \text{et} \quad \hat{q} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X \tag{2.13}$$

qui représentent respectivement les opérateurs impulsion et position sans dimensions, ils vérifient la relation de commutation :

$$\boxed{[\hat{p}, \hat{q}] \;=\; i\mathbb{1}} \tag{2.14}$$

Les opérateurs $\hat{q}$ et $\hat{p}$ agissent sur la base de vecteurs propres représentés respectivement par $\{|q\rangle\}$ et $\{|p\rangle\}$, les deux représentations vérifient les relations :

$$\int dq\, |q\rangle \langle q| = \mathbb{1} \quad \text{et} \quad \int dp\, |p\rangle \langle p| = \mathbb{1} \tag{2.15}$$

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q - q') \quad \text{et} \quad \langle p|p'\rangle = \delta(p - p') \tag{2.16}$$

ainsi, tout état$|\psi\rangle$ peut être développé comme suit :

$$|\psi\rangle = \int dq \psi(q)\, |q\rangle\,, \qquad |\psi\rangle = \int dp \bar{\psi}(p)\, |p\rangle$$

le lien entre les deux représentations se fait à l'aide de l'élément suivant :

$$\boxed{\langle q|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipq}} \tag{2.17}$$

On peut montrer aussi que l'opérateur $\hat{p}$ agit comme une dérivation sur la représentation $\{|q\rangle\}$:

$$\hat{p}\psi(q) \longrightarrow -i\frac{d}{dq}\psi(q) \tag{2.18}$$

Avant de se lancer dans l'étude de l'oscillateur harmonique quantique, on propose de factoriser l'expression de le Hamiltonien (**2.12**) selon l'idée de Dirac :

$$\hat{p}^2 + \hat{q}^2 = \frac{1}{2}\left[(\hat{q} + i\hat{p})\ \ (\hat{q} - i\hat{p})\ \ +\ \ (\hat{q} - i\hat{p})\,(\hat{q} + i\hat{p})\right]. \tag{2.19}$$

On introduit à ce niveau les opérateurs a et a^+ :

$$a = \frac{(\hat{q} + i\hat{p})}{\sqrt{2}} \quad \text{et} \quad a^+ = \frac{(\hat{q} - i\hat{p})}{\sqrt{2}} \tag{2.20}$$

les opérateurs $\hat{q}$ et $\hat{p}$ peuvent s'écrire :

$$\hat{q} = \frac{(a^+ + a)}{\sqrt{2}} \quad \text{et} \quad \hat{p} = \frac{i\,(a^+ - a)}{\sqrt{2}} \tag{2.21}$$

En utilisant l'équation (2.14) on montre que :

$$\boxed{\left[a, a^+\right] \;=\; \mathbb{1}.} \tag{2.22}$$

on peut en déduire facilement :

$$\hat{p}^2 + \hat{q}^2 \;=\; aa^+ + a^+a \;= 2a^+a + 1. \tag{2.23}$$

ce qui permet d'écrire le Hamiltonien de l'oscillateur harmonique (**2.12**) sous la forme :

$$\boxed{H \;=\; \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{p}^2 + \hat{q}^2\right) \;=\; \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right).} \tag{2.24}$$

pour simplifier la notation, on introduit un nouveau opérateur $N = a^+a$ appelé opérateur nombre. Le hamiltonien devient :

$$\boxed{H \;=\; \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right).} \tag{2.25}$$

Pour déterminer les valeurs et les vecteurs propres de H, il suffit de le faire pour l'opérateur N.

Propriétés de l'opérateur N

a. $N \;=\; N^+$.

b. $[N, a^+] \ = \ a^+.$

c. $[N, a] \ = \ -a.$

d. $[N, H] \ = \ 0$

<u>En effet :</u>

a.

b. $[N, a] \ = -a\,?$

c. $[N, a] \ = -a\,?$

$$\begin{aligned} [N, a] &= \left[a^+ a, a\right] \\ &= a^+ \underbrace{[a, a]}_{0} + \underbrace{\left[a^+, a\right]}_{-1} a \\ &= -a \end{aligned}$$

d.

2.2.2 Spectre et vecteurs propres de l'opérateur N

D'après les propriétés de l'opérateur N, on constate que les vecteurs propres de N sont aussi vecteurs propres de l'Hamiltonien H, ils seront notés par $|\varphi_\nu\rangle$:

$$N|\varphi_\nu\rangle = \nu|\varphi_\nu\rangle, H|\varphi_\nu\rangle = E_\nu|\varphi_\nu\rangle \tag{2.26}$$

$$E_\nu = \hbar\omega(\nu + 1/2) \tag{2.27}$$

1. ***Les valeurs propres de N sont définies positives.***

Si $|\varphi_\nu\rangle$ est un vecteur propre non nul de N associé à la valeur propre ν, alors $\nu \geq 0$.

Preuve : On a $N|\varphi_\nu\rangle = \nu|\varphi_\nu\rangle$, alors

$$\begin{aligned} \langle\varphi_\nu|N|\,|\varphi_\nu\rangle &= \nu\langle\varphi_\nu\|\varphi_\nu\rangle && (2.28) \\ &= && (2.29) \\ &= && (2.30) \end{aligned}$$

c'est à dire :

$$\nu = \frac{\|a\,|\varphi_\nu\rangle\|^2}{\||\varphi_\nu\rangle\|^2} \geq 0. \tag{2.31}$$

2. ***Action de a^+ sur les vecteurs propres de N*** :

Soit $|\varphi_\nu\rangle$ un vecteur propre de l'opérateur N associé à la valeur propre ν, alors $a^+|\varphi_\nu\rangle$ est un vecteur propre de N avec la valeur propre $\nu+1$:

$$N\left(a^+|\varphi_\nu\rangle\right) = (\nu+1)\left(a^+|\varphi_\nu\rangle\right) \tag{2.32}$$

Preuve : On utilise la relation de commutation $[N, a^+] = a^+$ pour écrire que $Na^+ = a^+N + a^+ = a^+(N+\mathbb{1})$ ce qui implique que :

puisque $\nu \geq 0, \nu+1 \neq 0$ par conséquent $N\left(a^+|\varphi_\nu\rangle\right) \neq 0$.

3. ***Action de a sur les vecteurs propres de N*** :

Soit $|\varphi_\nu\rangle$ un vecteur propre de l'opérateur N associé à la valeur propre ν, alors :

i. si $\nu = 0$ alors on a $a|\varphi_\nu\rangle = 0$.

ii. si $\nu > 0$, alors $a|\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre non nul de N associé à la valeur propre $\nu-1$:

$$N\left(a|\varphi_\nu\rangle\right) = (\nu-1)\left(a|\varphi_\nu\rangle\right). \tag{2.33}$$

Preuve :

i. D'après (2.30), $\|a|\varphi_\nu\rangle\|^2 =$,

. Par conséquent, $|\varphi_{\nu=0}\rangle := |\varphi_0\rangle$, vecteur propre de N est aussi vecteur propre de a :

$$a\,|\varphi_0\rangle = 0.$$

ii. Si $\nu > 0$, alors On utilise la relation de commutation $[N, a] = -a$ pour écrire que $Na = aN - a = a(N - \mathbb{1})$ ce qui implique que :

$$N\,(a\,|\varphi_\nu\rangle) = \tag{2.34}$$

$$= \tag{2.35}$$

$$= \tag{2.36}$$

4. <u>Le spectre de l'opérateur N est formé par des entiers positifs.</u>
L'ensemble $\left\{a\,|\varphi_\nu\rangle\,, a^2\,|\varphi_\nu\rangle\,, \ldots, a^k\,|\varphi_\nu\rangle\,, \ldots\right\}$ sont des vecteurs propres de l'opérateur N associés aux valeurs propres $\{(\nu-1), (\nu-2), \ldots, (\nu-k), \ldots\}$.

$$\begin{aligned} N\,(a\,|\varphi_\nu\rangle) &= \\ N\left(a^2\,|\varphi_\nu\rangle\right) &= \\ &\vdots \\ N\left(a^k\,|\varphi_\nu\rangle\right) &= \\ &\vdots \end{aligned}$$

pour k suffisamment grand, $(\nu - k)$ devient négative et comme nous avons montré dans (**2.31**) que ces valeurs propres doivent toutes être positives, la série des valeurs propres doit être tronquée, c'est à dire, il doit exister un entier $n \in \mathbb{N}$ tel que :

$$\boxed{a^n\,|\varphi_\nu\rangle \neq 0 \quad \text{et} \quad N(a^n\,|\varphi_\nu\rangle) \;=\; 0.}$$

or

$$N(a^n\,|\varphi_\nu\rangle) = (\nu - n)a^n\,|\varphi_\nu\rangle = 0$$

ce qui implique que $(\nu - n) = 0$, c'est à dire $\nu = n \in \mathbb{N}$. De plus :

$$N(a^{n+1}|\varphi_\nu\rangle) = (\nu - n - 1)(a^{n+1}|\varphi_\nu\rangle)$$

comme $\nu - n - 1 < 0$, ce qui contredit la positivité des valeurs propres de l'opérateur N, donc le terme $a^{n+1}|\varphi_\nu\rangle$ doit s'annuler :

$$\begin{aligned}
N\left(a|\varphi_\nu\rangle\right) &= (\nu-1)a|\varphi_\nu\rangle \\
N\left(a^2|\varphi_\nu\rangle\right) &= (\nu-2)a^2|\varphi_\nu\rangle \\
&\vdots \\
N\left(a^n|\varphi_\nu\rangle\right) &= (\nu-n)a^k|\varphi_\nu\rangle \\
N\left(a^{n+1}|\varphi_\nu\rangle\right) &= 0.
\end{aligned}$$

Par la suite les valeurs propres de l'opérateur N seront désignées par les entier positifs $0, 1, 2, \ldots$ et les vecteurs propres associés seront notés par $\{|0\rangle, |1\rangle, \ldots\}$. N sera appelé **opérateur nombre.** L'équation aux valeurs propres de l'opérateur N s'écrit alors :

$$\boxed{N|n\rangle = n|n\rangle\,, \quad n = 0, 1, 2, \ldots}\ . \tag{2.37}$$

2.3 Spectre et états propre de l'hamiltonien H

2.3.1 Spectre de H

L'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien $H = \hbar\omega\left(N + \dfrac{1}{2}\right)$ est donnée par

$$\boxed{H|n\rangle = E_n|n\rangle\,, \quad n = 0, 1, 2, \ldots.} \tag{2.38}$$

avec

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

Nous constatons que l'énergie de l'oscillateur harmonique linéaire est quantifiée avec $E_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2}$ est l'énergie minimale, appelée aussi énergie de l'état fondamental ou **énergie du point zéro**. Dans le cas de l'oscillateur harmonique classique l'énergie est continue et sa valeur minimale est nulle au repos.

Remarques

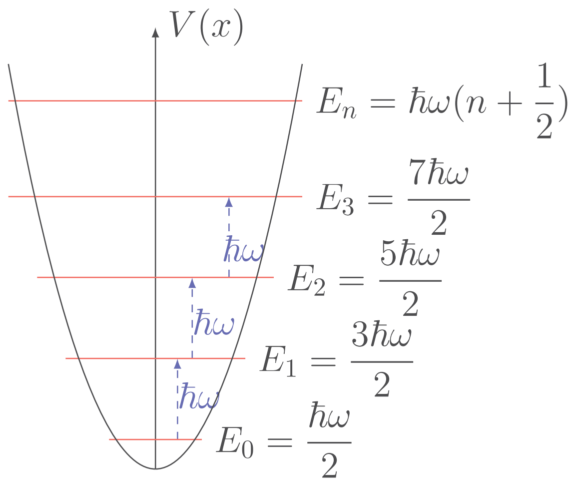
— $a|n\rangle$ est un vecteur propre de l'hamiltonien associé à la valeur propre :

$$\boxed{E_{n-1} = \hbar\omega(n - 1 + \frac{1}{2}) = E_n - \hbar\omega}$$

— $a^+|n\rangle$ est un vecteur propre de l'hamiltonien associé à la valeur propre :

$$\boxed{E_{n+1} = \hbar\omega(n + 1 + \frac{1}{2}) = E_n + \hbar\omega}$$

— $\hbar\omega$ est l'énergie de transition entre deux niveaux successives.



on remarque que les énergies propres sont uniformément espacées, c'est exactement la quantification de l'énergie proposée par Max Plank en 1900 pour expliquer le spectre du rayonnement des corps noirs.

L'action de a sur un vecteur propre de H, fait diminuer la valeur de l'énergie d'un quantum égale à $\hbar\omega$. L'action de a^+ sur un vecteur propre de H, fait augmenter la valeur de l'énergie d'un quantum égale à $\hbar\omega$. On appelle ainsi, a l'opérateur d'annihilation et a^+ est l'opérateur de création. Les opérateurs a et a^+ sont appelés aussi **opérateurs d'échelle**.

2.3.2 Etats propres de l'hamiltonien H

Les états propres de H sont ceux de l'opérateur nombre N, ils sont notés par :

$$\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \ldots\} \tag{2.39}$$

associés aux valeurs propres*

$$\{E_0, E_1, E_2, \ldots\} \tag{2.40}$$

avec

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

2.3.2.1 Niveau fondamental

L'énergie de l'état fondamental(ou énergie du point zéro) $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ correspond à l'état $|0\rangle$ qui vérifie :

$$\boxed{a|0\rangle = 0} \tag{2.41}$$

L'énergie de l'état fondamental est non dégénérée.

En effet :

Remplaçons l'opérateur a par son expression donnée par (2.20) :

$$a = \frac{(\hat{q} + i\hat{p})}{\sqrt{2}}$$

$$a|0\rangle = \frac{(\hat{q} + i\hat{p})}{\sqrt{2}}|0\rangle = 0.$$

Dans la représentation $\{|q\rangle\}$

$$\langle q|a|0\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle q|\hat{q}|0\rangle| + \frac{i}{\sqrt{2}}\langle q|\hat{p}|0\rangle|.$$

or on utilise la correspondance $ip \longleftrightarrow \frac{d}{dq}$, on peut écrire :

$$\langle q|a|0\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q\langle q|0\rangle| + \frac{d}{dq}\langle q|0\rangle|\right) = 0 \tag{2.42}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q\phi_0(q) + \frac{d}{dq}\phi_0(q)\right) = 0. \tag{2.43}$$

on obtient une équation différentielle de premier ordre dans la solution générale est donnée par :

$$\phi_0(q) = C_0 e^{-\frac{q^2}{2}}. \tag{2.44}$$

On voit donc que toutes les solutions sont proportionnelles entre elles, par conséquent, le niveau fondamental est donc non dégénéré.

2.3.2.2 Les niveaux excités de l'oscillateur harmonique quantique à une seule dimension

Tous les états excités sont construits en appliquant successivement l'opération de création a^+ sur l'état fondamental $|0\rangle$. D'abords il faut montrer que les niveaux d'énergies $(n \neq 0)$ sont tous non dégénérés.

Démonstration :

on va procéder par récurrence, on suppose que E_n est non dégénéré et montre que E_{n+1} le sera aussi.

D'après (2.3.2.1), le niveau fondamental $|0\rangle$ est non dégénéré.

On suppose que E_n est non dégénérée, ceci implique s'il existe deux états $|n\rangle$ et $|n'\rangle$ associés au niveau d'énergie E_n alors ils sont proportionnels

$$|n\rangle = \lambda|n'\rangle\,,\ \ \lambda \in \mathbb{C}\mathbb{C}$$

. Supposons que le niveau d'énergie E_{n+1} est dégénéré, c'est à dire il existe deux états propre $|n+1\rangle$ et $|n'+1\rangle$ tels que :

$$H|n+1\rangle = E_{n+1}|n+1\rangle \ \text{ et } \ H|n'+1\rangle = E_{n+1}|n'+1\rangle$$

or $a|n+1\rangle$ est un état propre de H associé à la valeur propre E_n, par conséquent $a|n+1\rangle$ est proportionnel $|n\rangle$:

$$a|n+1\rangle = \alpha|n\rangle \tag{2.45}$$

De même, $a|n'+1\rangle$ est un état propre de H associé à la valeur propre $E_{n'} = E_n$, par conséquent $a|n'+1\rangle$ est proportionnel $|n'\rangle$:

$$a|n'+1\rangle = \alpha'|n\rangle \tag{2.46}$$

En appliquant l'opérateur création a^+ sur les expressions (2.45) et (2.46, on obtient :

$$(n+1)|n+1\rangle = \alpha a^+|n\rangle \quad \text{et} \quad (n'+1)|n'+1\rangle = \alpha' a^+|n'\rangle \tag{2.47}$$

puisque $a^+|n\rangle = \lambda a^+|n'\rangle$, on en déduit que

$$|n+1\rangle = c|n'+1\rangle$$

Ainsi, **tous les niveaux d'énergie de l'hamiltonien sont non dégénérés**.

2.3.3 Action des opérateurs d'échelle sur les états propres de H.

2.3.3.1 Action de l'opérateur d'annihilation a.

Puisque $a|n\rangle$ et $|n-1\rangle$ sont deux vecteurs propres de H associés à la même valeur propre non dégénérée E_n, ils sont proportionnels, c'est à dire :

$$\boxed{a|n\rangle = \alpha_-|n-1\rangle}$$

. avec α_- est un coefficient à déterminer.

Les états propres de H (donc de N) sont normés :

$$\langle n|n\rangle = 1$$

par conséquent

$$\begin{aligned} \| a|n\rangle \|^2 &= \| \alpha_-|n-1\rangle \|^2 && (2.48) \\ \langle n|a^+a|n\rangle &= |\alpha_-|^2 && (2.49) \\ & && (2.50) \end{aligned}$$

on sait que $a^+a = N$, donc

$$|\alpha_-|^2 = n \qquad (2.51)$$

$$\boxed{a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle} \qquad (2.52)$$

ainsi l'opérateur annihilation a fait passer l'oscillateur harmonique d'un niveau d'énergie supérieur à un niveau inférieur. **Il détruit une excitation**.

2.3.3.2 Action de l'opérateur de création a^+

Puisque $a^+|n\rangle$ et $|n+1\rangle$ sont deux vecteurs propres de H associés à la même valeur propre non dégénérée E_{n+1}, ils sont proportionnels, c'est à dire :

$$\boxed{a^+|n\rangle = \alpha_+|n+1\rangle}$$

. avec α_+ est un coefficient à déterminer.

$$\begin{aligned} \left\| a^+|n\rangle \right\|^2 &= \left\| \alpha_+|n+1\rangle \right\|^2 \quad (2.53) \\ \langle n|aa^+|n\rangle &= |\alpha_+|^2 \quad (2.54) \\ & \quad (2.55) \end{aligned}$$

on sait que $aa^+ = N + \mathbb{1}$, donc

$$|\alpha_+|^2 = n+1 \quad (2.56)$$

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (2.57)$$

ainsi l'opérateur création a^+ fait passer l'oscillateur harmonique d'un niveau d'énergie inférieure à un niveau supérieur. **Il crée une excitation**.

On peut en déduire que

$$\begin{aligned} |n\rangle &= \frac{a^+|n-1\rangle}{\sqrt{n}} \quad (2.58) \\ &= \frac{(a^+)^2|n-2\rangle}{\sqrt{n}\sqrt{n-1}} \quad (2.59) \\ &\vdots \quad (2.60) \\ &= \frac{(a^+)^n|0\rangle}{\sqrt{n!}} \quad (2.61) \end{aligned}$$

$$\boxed{(a^+)^n|0\rangle = \sqrt{n!}|n\rangle} \tag{2.62}$$

Cette relation montre que tout état excité $|n\rangle$ peut être généré à partir de l'état fondamental $|0\rangle$ par application successive de l'opérateur création a^+.

Exercice

1. Montrer que les opérateurs d'annihilation et de création sont donnés par :
$$a = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n}|n-1\rangle \langle n| \text{ et } a^+ = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1}|n+1\rangle \langle n| \,.$$
2. En déduire que $a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$.

2.4 Contenu physique

2.4.1 Représentation matricielle

Opérateur nombre N

L'action de l'opérateur N sur la base $\{|n\rangle\,, n = 0, 1, \ldots\}$:

$$N|n\rangle = n|n\rangle \tag{2.63}$$

les éléments de la matrice représentant l'opérateur N sont donnés par

$$\langle n'|N|n\rangle = n\,\langle n'|n\rangle = n\delta_{n,n'} \tag{2.64}$$

$$N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{2.65}$$

Opérateur Hamiltonien H

l'action de l'hamiltonien H sur la base $\{|n\rangle, n = 0, 1, \dots\}$:

$$H|n\rangle = (n + 1/2)\hbar\omega|n\rangle \tag{2.66}$$

les éléments de la matrice représentant l'opérateur N sont donnés par

$$\langle n'|H|n\rangle = (n + 1/2)\hbar\omega \langle n'|n\rangle = (n + 1/2)\hbar\omega\delta_{n,n'} \tag{2.67}$$

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 5 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 7 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{2.68}$$

Opérateur des opérateurs d'échelle $a^{\pm}$

l'action de l'opérateur création $a^{\pm}$ sur la base $\{|n\rangle, n = 0, 1, \dots\}$:

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \qquad a^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \tag{2.69}$$

les éléments de la matrice représentant les opérateurs $a^{\pm}$ sont donnés par

$$\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1}, \qquad \langle n'|a^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} \tag{2.70}$$

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad a^{\dagger} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Opérateur position sans dimension $\hat{q}$

Comme il a été déjà vu, l'opérateur $\hat{q} = \dfrac{a^{+} + a}{\sqrt{2}}$ l'action de l'opérateur $\hat{q}$ sur la base $\{|n\rangle, n = 0, 1, \dots\}$:

$$\hat{q}|n\rangle = \frac{a^{+} + a}{\sqrt{2}}|n\rangle = \frac{\sqrt{n+1}|n+1\rangle + \sqrt{n}|n-1\rangle}{\sqrt{2}} \tag{2.71}$$

les éléments de la matrice représentant l'opérateur $a\hat{q}$ sont donnés par

$$\langle n'|\hat{q}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1}\right) \tag{2.72}$$

$$\hat{q} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.73}$$

Opérateur moment sans dimension $\hat{p}$

De même pour l'opérateur $\hat{p} = i(\frac{a^+ - a}{\sqrt{2}})$ l'action de l'opérateur $\hat{p}$ sur la base $\{|n\rangle, n = 0, 1, \ldots\}$: les éléments de la matrice représentant l'opérateur a^+ sont donnés par

$$\langle n'|\hat{p}|n\rangle = i\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} - \sqrt{n}\delta_{n',n-1}\right) \tag{2.74}$$

$$\hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \ldots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \ldots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ldots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.75}$$

2.4.2 Principe d'incertitude de Heisenberg

Pour vérifier le principe d'incertitude de Heisenberg, nous devrons calculer les valeurs moyennes de $q, p, q^2 et p^2$.

$$\langle q\rangle_n = \langle n|\hat{q}|n\rangle = 0 \tag{2.76}$$

$$\langle p\rangle_n = \left\langle n\hat{|}p|n\right\rangle = 0 \tag{2.77}$$

$$\left\langle q^2\right\rangle_n = \left\langle n|\hat{q}^2|n\right\rangle = n + 1/2 \tag{2.78}$$

$$\left\langle p^2\right\rangle_n = \left\langle n|\hat{p}^2|n\right\rangle = n + 1/2 \tag{2.79}$$

$$\tag{2.80}$$

On peut en déduire les écarts quadratiques moyens pour q et p :

$$\Delta(q) = \sqrt{\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2} = \sqrt{n + 1/2} \quad (2.81)$$

$$\Delta(p) = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{n + 1/2} \quad (2.82)$$

$$(2.83)$$

en utilisant les variables x et p_x on peut facilement trouver que :

$$\Delta(x) = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}(n + 1/2)} \quad (2.84)$$

$$\Delta(p_x) = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2} = \sqrt{m\hbar\omega(n + 1/2)} \quad (2.85)$$

Principe d'incertitude de Heisenberg

Le produit des écarts quadratiques moyens de x et p_x obéit bien à la relation de Heisenberg :

$$\Delta(x)\Delta(p_x) = \hbar(n + 1/2) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.86)$$

Remarques

1. $\Delta(x)\Delta(p_x) \geq \frac{1}{2}[x, p_x] = \frac{\hbar}{2}$.
2. $E = \langle H \rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \geq \frac{\hbar\omega}{2} = E_0$.
3. Pour l'état fondamental $n = 0$, l'inégalité de Heisenberg (2.86) est saturée.

2.5 Oscillateurs harmoniques quantiques et fonctions d'ondes associées

2.5.1 Fonctions d'ondes dans la représentation $|q\rangle$

Dans cette section nous allons écrire les fonctions d'ondes qui représentent les états propres de l'hamiltonien H dans la représentation $|q\rangle$. Pour ce faire, on projette dans un premier temps l'état propre$|n\rangle$ sur cette base :

$$\phi_n(q) = \langle q|n\rangle = \frac{\langle q|(a^+)^n|0\rangle}{\sqrt{n!}} \tag{2.87}$$

si $n = 0$, on obtient l'expression $\varphi_0(q)$ exprimée par l'équation (2.44) :

$$\phi_0(q) = C_0 e^{-\frac{q^2}{2}} \tag{2.88}$$

où la constante C_0 est déterminée en utilisant la condition de normalisation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dq\, |\phi_0(q)|^2 \;= 1 \tag{2.89}$$

$$|C_0|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{-q^2}}_{=\sqrt{\pi}} \;= 1 \tag{2.90}$$

donc $C_0 = \pi^{-1/4}$, anis on a :

$$\phi_0(q) = \pi^{-1/4} e^{-\frac{q^2}{2}} \tag{2.91}$$

il est possible d'exprimer cette expression en terme de la variable réelle qui représente la position :

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \tag{2.92}$$

Dans la représentation $|q\rangle$, on a :

$$a^+ \to q - \frac{d}{dq} \tag{2.93}$$

En utilisant les propriétés de l'opérateur création a^+, on peut trouver des relations récurrentes entre les fonctions d'onde de deux niveaux consécutifs :

$$\phi_{n+1}(q) = \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{n+1}}\left(q - \frac{d}{dq}\right)\phi_n(q) \tag{2.94}$$

Pour les autres niveaux $n > 0$, les fonctions d'ondes sont déterminées à partir de $\phi_0(q)$ par application répétitive de l'opérateur création a^+ :

$$\phi_n(q) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}}\left(q - \frac{d}{dq}\right)^n \phi_0(q) \tag{2.95}$$

Exercice

1. Montrer que
$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \tag{2.96}$$
2.

2.5.2 Relations avec les polynômes d'Hermite

Proposition 1. *Les fonctions d'ondes données par la relation (**??**) s'écrivent comme suit :*

$$\boxed{\phi_n(q) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}} H_n(q) e^{-\frac{q^2}{2}}} \tag{2.97}$$

avec $H_n(q)$ est un polynôme d'Hermite de degré n et de parité $(-1)^n$ (voir Annexe). Les premiers éléments de $H_n(q)$ sont donnés par :

<u>En effet :</u>

Etapes de la démonstration :

— Montrer que

$$\left(q - \frac{d}{dq}\right)\left(e^{\frac{q^2}{2}} u(q)\right) = -e^{\frac{q^2}{2}} \frac{d}{dq} u(q)$$

.

— En déduire par déduction que

$$\left(q - \frac{d}{dq}\right)^n e^{-\frac{q^2}{2}} = (-1)^n e^{\frac{q^2}{2}} \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2}$$

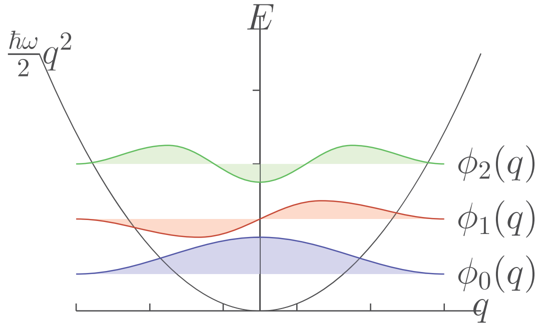
.

— On remarque que :

$$H_n(q) = (-1)^n e^{\frac{q^2}{2}} \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2}$$

Exemples :

1. pour $n = 0$, on a $\phi_0(q) = \pi^{-1/4} e^{-\frac{q^2}{2}}$
2. pour $n = 1$, on a $\phi_1(q) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2}} 2q e^{-\frac{q^2}{2}}$.
3. pour $n = 2$, $\phi_2(q) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2}} (2q^2 - 1) e^{-\frac{q^2}{2}}$.



Exercice.

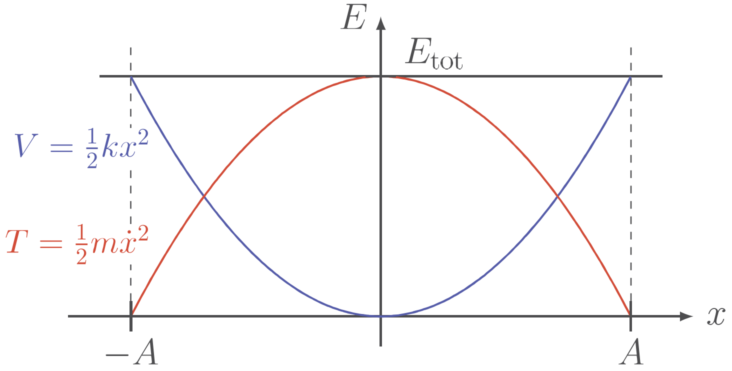
Montrer que les fonctions d'onde $\phi_n(q)$ données par l'expression (**??**) s'expriment dans la représentation $|x\rangle$ comme suit :

$$\phi_n(x) = \frac{1}{(2^n n! \sqrt{\pi})^{1/2}} \frac{H_n\left(\frac{x}{x_e}\right) e^{-\frac{x^2}{2x_e^2}}}{x_e^{1/2}}, \; x_e = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \tag{2.98}$$

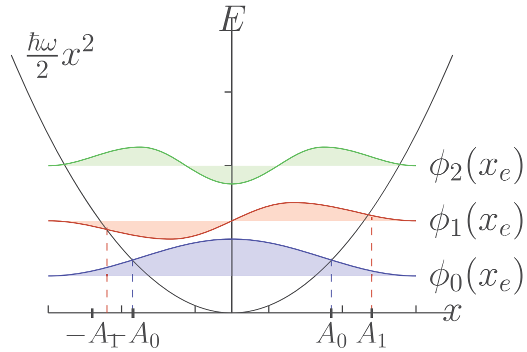
2.6 Comparaison avec l'oscillateur harmonique classique

$$
\begin{aligned}
E &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x-x_0)^2 \\
x(t) &= x_0 \sin(\omega t + \varphi)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
E_n &= \hbar\omega(n+\frac{1}{2}) \\
\phi_n(x) &= \frac{1}{(2^n n!\sqrt{\pi})^{1/2}} \frac{H_n\left(\frac{x}{x_e}\right) e^{-\frac{x^2}{2x_e^2}}}{x_e^{1/2}}
\end{aligned}
$$



Oscillateur classique



Oscillateur quantique

1. **Dans le cas de l'oscillateur classique :**
   — l'énergie est continue et ne dépend que de l'amplitude A.
   — l'oscillateur ne peut se trouver au delà de l'intervalle $[-A, A]$.
   — l'énergie totale peut être égale zéro quand l'oscillateur se trouve au repos à sa position d'équilibre (Etat fondamentale).

2. **Dans le cas de l'oscillateur quantique :**
   — L'énergie est discontinue $E = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$.
   — à l'état fondamentale, $(n=0)$, l'énergie de l'OSHQ est différente de zéro : $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$.

— La probabilité de trouver l'oscillateur quantique au delà de l'intervalle $[-A_n, A_n]$ n'est pas nulle, ce qu'on appelle effet tunnel de l'oscillateur harmonique quantique.

D'après les figures ci-dessous la densité de probabilité classique de trouver l'OSH est maximale aux points $x = -A$ et $x = A$, par contre la densité de probabilité quantique est maximale autour du point $x_0 = 0$ pour $n = 0$ et aux devient plus importante aux extrémités d'oscillations. Lorsque n devient assez grand c'est à dire pour énergies plus élevées, la densité de probabilité quantique se rapproche de celle classique. Contrairement au cas classique, certains points à l'intérieur sont interdites (la probabilité s'annule). Aussi, il est important de souligner que les figures montrent que la probabilité de trouver la particule à l'extérieur de l'intervalle est non nulle, c'est l'effet tunnel de l'oscillateur harmonique quantique.