Chapitre 1

Oscillateur Harmonique Quantique

1.1 De l'importance de l'Oscillateur Hamonique

L'importance de l'Oscillateur Harmonique en Physique ne peut pas être sous-estimé. Des exemples d'applications sont légion ; prenont la $\mathcal{M}$écanique $\mathcal{C}$lassique pour l'exemple.

Le plus simple reste de considérer une particule de masse m se déplaçant dans un potentiel central de la forme

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \qquad \forall k \in \mathbb{R}^+ \tag{.1}$$

Dès lors, la particule effectue un mouvement oscillatoire autour du plan $x = 0$, avec une force de rappel

$$F_x = -\frac{dV}{dx} = -kx \tag{.2}$$

Cette situation est régie par l'équation d'un Oscillateur Harmonique, soit

$$m\ddot{x} = -kx \tag{.3}$$

On pose alors souvent $\omega = \sqrt{\frac{k}{x}}$; il s'agit de la pulsation du mouvement. La solution générale de cette équation est donnée par la relation

$$x(t) = Acos\left(\omega t - \varphi\right) \qquad \forall A \in \mathbb{R}^+, \forall\varphi \in [0, 2\pi] \tag{.4}$$

En particulier, nous avons que l'énergie totale de la particule s'exprime par la relation

$$E = T + V = \frac{1}{2}m\omega^2A^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \doteq H \tag{.5}$$

Remarque 1.1.1. *L'oscillateur harmonique joue un rôle fondamental en Physique ; il permet de décrire (du moins, de manière rapprochée) les mouvements d'osccilations autour d'une position d'équilibre.*

Remarque 1.1.2. *En Mécanique Quantique, l'Oscillateur Harmonique est le problème exactement soluble ayant le plus d'applications.*

1.2 L'Oscillateur Harmonique en Mécanique Quantique

Dans les discussions quantiques, nous remplacons les grandeurs classiques x et p par les observables X et P, vérifiant la relation $[X, P] = i\hbar$ (voir le chapitre **??** pour plus de détails et une preuve détaillée). L'Hamiltonien quantique est donc donné par

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{kX^2}{2}$$

Effectuons - pour facilier les notations - les transformations canoniques suivantes :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X \tag{.6a}$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}P \tag{.6b}$$

Dès lors, nous obtenons les relations suivantes.

Proposition 1.2.1. *En vertue des conventions* (.6)*, la relation de commutation est donnée par*

$$[\hat{X}, \hat{P}] = \frac{1}{\hbar}[X, P] = i \tag{.7}$$

Proposition 1.2.2. *L'Hamiltonien est donné par* $H = \hbar\omega\hat{H}$*, où*

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left(\hat{X}^2 + \hat{P}^2\right). \tag{.8}$$

Observons que :

— Puisque le potentiel est une fonction paire, les fonctions propres de H possèdent une parité définie. On peut alors rechercher les fonctions propres de H parmi les fonctions ayant une parité définie.

— Le spectre d'énergie est discret.

Nous allons à présent tenter de retrouver ces résultats.

1.2.1 Valeurs propres de l'Hamiltonien

Nous allons tenter de résoudre l'équation aux valeurs propres

$$H\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle, \tag{.9}$$

c'est à dire tenter de déterminer le spectre et les valeurs propres de l'Hamiltonien.

Si $\hat{X}$ et $\hat{P}$ étaient des nombres et non des observables, nous pourrions réécrire leur somme quadratique dans (.8) sous la forme $(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P})$: comme ce sont des opérateurs, ils ne commutent en générale pas [1]. Nous allons montrer que l'introduction d'opérateurs proportionnels à $\hat{X}$ et à $\hat{P}$ permet de simplifier la recherche des vecteurs et valeurs propres de $\hat{H}$. On pose alors

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \qquad \hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \tag{.10}$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) \qquad \hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \tag{.11}$$

Il s'agit des opérateurs d'échelle, respectivement opérateurs d'anhilihation et de création. Observons que $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \mathcal{I}$, $[\hat{a}, \hat{a}] = 0 = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]$. En introduisant le nombre $N = a^\dagger a = \frac{1}{2}\left(X^2 + P^2 - 1\right)$, nous avons donc

$$\hat{H} = N + \frac{1}{2}. \tag{.12}$$

Les vecteurs propres de $\hat{H}$ sont les vecteurs propres de N, et inversement. Avant de passer à la détermination du spectre, effectuons quelques observations :

Proposition 1.2.3. *N est hermitien :* $N^\dagger = a^\dagger\left(a^\dagger\right)^\dagger$.

Proposition 1.2.4. *Les valeurs propres de N sont positives.*

Démonstration. Soit $|\varphi\rangle$ une valeur propre de N. Dès lors,

$$\langle\varphi|a^\dagger a|\varphi\rangle = \|a\,|\varphi\rangle\|^2 \geqslant 0$$

■

1.2.2 Analyse des valeurs et vecteurs propres de N

Proposition 1.2.5. $[N, a] = -a$ *et* $[N, a^\dagger] = a^\dagger$

Démonstration.

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = [a^\dagger, a]a + a^\dagger[a, a] = -a$$
$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger, a^\dagger]a + a^\dagger[a, a^\dagger] = a^\dagger$$

Ce qui prouve l'assertion. ■

1. C'est bien le cas ici ; voir la valeur du commutateur de X et de P.

Proposition 1.2.6. *Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur propre de N de valeur propre ν : $N|\varphi\rangle = \nu|\varphi\rangle$. Alors,*

— *$a|\varphi\rangle$ est vecteur propre de N de valeur propre $\nu - 1$.*
— *Si $\nu = 0$, alors $a|\varphi\rangle = 0$.*

Démonstration.

$$\begin{aligned} Na|\varphi\rangle &= (aN - a)|\varphi\rangle = (a\nu - a)|\varphi\rangle = (\nu - 1)a|\varphi\rangle \\ \|a|\varphi\rangle\| &= \langle\varphi|a^\dagger a|\varphi\rangle = \nu\langle\varphi|\varphi\rangle = 0 \iff \nu = 0 \end{aligned}$$

■

Remarque 1.2.7. *Cela justifie le nom que porte l'opérateur $\hat{a}$: l'opérateur destruction.*

Proposition 1.2.8. *Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur propre de N de valeur propre ν : $N|\varphi\rangle = \nu|\varphi\rangle$. Alors,*

— *$a^\dagger|\varphi\rangle$ est non nul.*
— *$a^\dagger|\varphi\rangle$ est un vecteur propre de valeur propre $\nu + 1$.*

Démonstration.

$$\begin{aligned} N\left(a^\dagger|\varphi\rangle\right) &= \left(a^\dagger N + a^\dagger\right)|\varphi\rangle = (\nu+1)\,a^\dagger|\varphi\rangle \\ \|a|\varphi\rangle\|^2 &= \langle\varphi|a^\dagger a|\varphi\rangle = \langle\varphi|a^\dagger a + 1|\varphi\rangle \\ &= \langle\varphi|N + 1|\varphi\rangle = (\nu+1)\langle\varphi|\varphi\rangle \geqslant 0 \end{aligned}$$

■

Remarque 1.2.9. *Cela justifie le nom que porte l'opérateur $\hat{a}^\dagger$: l'opérateur création.*

Proposition 1.2.10. *Soit $N = aa^\dagger$. Alors, le spectre de $N \subseteq \mathbb{N}$.*

Démonstration. Supposons par l'absurde que $N|\varphi\rangle = \nu|\varphi\rangle$ et que $n < \nu < n+1$. En vertue de la propriété 1.2.6, $a^{n+1}|\varphi\rangle$ est non nul et est vecteur propre de N de valeur propre $\nu - n - 1 < 0$: cela constitue une contradiction avec la propriété 1.2.4. La conclusion s'ensuit. ■

Corollaire 1.2.11. *Si il existe un vecteur propre $|\varphi\rangle$ de valeur propre $\nu \in \mathbb{N}$, alors le spectre de N est $\mathbb{N}$.*

Proposition 1.2.12. *L'état fondamental d'un oscillateur harmonique est non dégénéré.*

Démonstration. En vertue de 1.2.6, la valeur propre associée à l'état fondamental est 0, de sorte que tout vecteur propre fondamental doive respecter

$$a|\varphi\rangle = 0 \tag{.13}$$

En rappelant les défintions (.10) et (.11),

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\hat{P}\right)|\varphi\rangle &= 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x\varphi(x) + \hbar\partial_x\varphi(x)\right) &= 0 \end{aligned}$$

L'unique solution de ce système est donné par

$$\varphi(x) = ce^{-\frac{x^2}{\hbar}} \tag{.14}$$

où c est une constante d'intégration. ■

Proposition 1.2.13. *Tous les niveaux d'un oscillateur harmonique sont non dégénérés.*

Démonstration. Supposons par l'absurde qu'il existe un niveau $n \in \mathbb{N}$ tel que $|\varphi\rangle, |\varphi'\rangle$ sont des vecteurs propres de N, c'est à dire tel que

$$N|\varphi\rangle = n|\varphi\rangle \tag{.15}$$
$$N|\varphi'\rangle = n|\varphi'\rangle \tag{.16}$$
$$\langle\varphi|\varphi'\rangle = 0 \tag{.17}$$

Il s'ensuit que $a|\varphi\rangle$ et $a|\varphi'\rangle$ sont des vecteurs propres de N de valeur propre $n - 1$, orthogonaux.

$$\left(\langle\varphi'|\,a^\dagger\right)\left(a|\varphi\rangle\right) = \langle\varphi'|N|\varphi\rangle = n\langle\varphi'|\varphi\rangle = 0$$

Par récurrence, on voit que $a^n|\varphi\rangle$ et $a^n|\varphi'\rangle$ sont des vecteurs propres de N de valeur propre 0, orthogonaux. Cela constitue une contradiction avec 1.2.12. ■

Nous pouvons constuire une base orthonormée de vecteurs propres selon

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \tag{.18}$$

Cela est la construction d'une base orthonormée dans l'espace de $\mathcal{H}$ilbert : cette base porte le nom de Base de $\mathcal{F}$ock. Nous avons dès lors la relation de fermeture

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \mathbb{I} \tag{.19}$$

De plus, le spectre de l'oscillateur harmonique est donné par

$$\hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right) \tag{.20}$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$. L'énergie de point zéro, comme nous le montrons en **??**, est alors donné par

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{.21}$$

1.2.3 Evolution temporelle

Effectuons à présent une directe application du **??** de la mécanique quantique. Considérons un oscillateur harmonique dont l'état est donné à l'instant $t = 0$ par

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \tag{.22}$$

En vertue du postulat d'évolution des états, nous avons alors que l'état du système à un temps t sera donné par

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t} |n\rangle \tag{.23}$$

La valeur moyenne au cours du temps d'une grandeur physique A est alors donnée par

$$\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \sum_m \sum_n c_m^*(0) c_n(0) A_{mn} e^{i(m-n)\omega t} \tag{.24}$$

Je ne comprend pas la suite des notes de cette section.

1.2.4 Fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique

Une démonstration par récurrence exploitant l'opérateur de création $\hat{a}^\dagger$ montre que les états propre de l'opérateur nombre $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ s'écrivent

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \tag{.25}$$

Dans la représentation position, il suffit de substituer l'expression de $\hat{a}$ et de $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$ pour obtenir l'expression de la fonction d'onde $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$, soit

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} (x - \partial_x)^n \psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2^n n!}} H_n(x) \tag{.26}$$

où $H_n(x)$ est le polynôme d'Hermite, définie par $H_n(x) = \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n$. D'où vient le facteur $\frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}$?

1.2.5 Résolution de l'équation aux valeurs propres par la méthode polynômiale

Forme asymptotique de $\psi(x)$

Nous voulons résoudre l'équation de l'oscillateur harmonique analytiquement : nous n'allons pas utiliser les opérateurs de création et de destruction.

Dans la représentation position, l'équation aux valeurs propres de H s'écrit

$$\frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dx^2}+x^2\right)\psi = E\psi \tag{.27}$$

Observons que le potentiel est paire : dès lors, les solutions sont soit paires soit impaires.

Nous pouvons réécrire l'équation (.27) sous la forme

$$\{\frac{d^2}{dx^2}-\left(x^2-2E\right)\}\psi = 0 \tag{.28}$$

Recherchons des solutions intuitives de cette équation pour des x très grands. Observons que les fonctions

$$G_{\pm}(x) = e^{\pm\frac{x^2}{2}} \tag{.29}$$

sont solutions des équations différentielles

$$\{\frac{d^2}{dx^2}-(x^2\pm 1)\}G_{\pm}(x) = 0 \tag{.30}$$

Remarque 1.2.14. *Observons que lorsque x tend vers l'infini,*

$$x^2\pm 1 \sim x^2 \sim x^2-2E$$

Dès lors, les solutions des équations (.28) et (.30) ont la même forme pour des grands x. On s'attend donc que, sous cette hypothèse, que les solutions de (.28) soient de la forme

$$\varphi_-(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \qquad \underbrace{\varphi_+(x) = e^{\frac{x^2}{2}}}_{\text{A exclure !}} \tag{.31}$$

En comparant (.31) et (.28), nous obtenons le résultat

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_-(x) - 2x\frac{d}{dx}\varphi_-(x) + (2E-1)\,\varphi_-(x) = 0 \tag{.32}$$

Nous allons à présent montrer une technique de résolution de cette équation différentielle consistant à développer en série $\psi(x) \doteq \varphi_-(x)$.

Calcul de $\psi(x)$ sous forme d'un développement en série entière

Nous avons vu que les solutions de (.28) sont soit paires, soit impaires. $\psi(x)$ étant paire, nous recherchons une solution de la forme

$$\psi(x) = \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m}x^{2m+p} \tag{.33}$$

Observons alors que

$$\psi' = \sum_{m=0}^{\infty}(2m+p)\,a_{2m}x^{2m+p-1} \qquad \psi'' = \sum_{m=0}^{\infty}(2m+p)\,(2m+p-1)\,a_{2m}x^{2m+p-2} \tag{.34}$$

Pour que (.32) soit satisfaite en vertue de nos résultats, il faut que le développement en série du premier membre soit nul terme à terme, c'est à dire qui vérifie

$$p(p-1)a_0x^{p-2} = 0 \tag{.35}$$

comme $a_0 \neq 0$, on a soit $p = 0$, soit $p = 1$.Les autres termes donnent alors la récurrence

$$(2m+p+2)\,(2m+p+1)\,a_{2m+2} = (4m+2p+1-2E)\,a_{2m} \tag{.36}$$

$$a_{2m+2} = \frac{(4m+2p+1-2E)}{(2m+p+2)\,(2m+p+1)}a_{2m} \tag{.37}$$

Pour de grands m, nous aurons la relation $a_{2m+2} \approx \frac{1}{m}a_{2m}$. Cela correspond au développement en série de e^{x^2} :

$$e^{x^2} = \sum_m \frac{x^{2m}}{m!} = \sum_m c_{2m}x^{2m} \qquad \frac{c_{2m+2}}{c_{2m}} = \frac{1}{m} \tag{.38}$$

Il s'agit d'un comportement asymptotique $e^{-\frac{x^2}{2}}e^{x^2} = e^{\frac{x^2}{2}}$: cela n'est pas acceptable physiquement. La série n'a pas de forme asymptotique si et seulement si la récurrence (.37) se termine après un nombre fini de termes. On considère alors une énergie E_m tel que $4m + 2p + 1 - 2E_m = 0$ où $p = 0, 1$. Dès lors, nous déduisons la quantification de l'énergie de l'oscillateur harmonique quantique :

$$E_n = n + \frac{1}{2} \qquad\qquad n = 2m + p \tag{.39}$$

Remarque 1.2.15. *Le coefficient a_0 n'est pas déterminé par la recurrence : nous le choisissons de sorte à normaliser la solution.*