Première partie

Oscillateur Harmonique Quantique

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Remarque 1.1. *L'oscillateur harmonique joue un rôle fondamental en Physique ; il permet de décrire les mouvements d'osccilations autour d'une position d'équilibre.*

Remarque 1.2. *En Mécanique Quantique, l'Oscillateur Harmonique est le problème exactement soluble ayant le plus d'applications.*

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 :

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

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

En particulier, nous avons alors que $[\hat{X}, \hat{X}] = i$, et que $H = \hbar\omega\hat{H}$, où

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left(\hat{X}^2 + \hat{P}^2\right). \tag{I.7}$$

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.

2.1 Valeurs propres de l'Hamiltonien

Nous allons tenter de résoudre l'équation aux valeurs propres

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle\,, \tag{I.8}$$

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 (I.7) 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

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP) \qquad\qquad X = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \tag{I.9}$$

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

Observons que $[a, a^\dagger] = 1$. En introduisant le nombre $N = a^\dagger a = \frac{1}{2}\left(X^2 + P^2 - 1\right)$, nous avons donc

$$\hat{H} = N + \frac{1}{2}. \tag{I.11}$$

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 :

— N est hermitien : $N^\dagger = a^\dagger\left(a^\dagger\right)^\dagger = a^\dagger a = N$.

— N est positif : $\forall\,|\varphi\rangle$,

$$\begin{aligned}\langle\varphi|N|\varphi\rangle &= \langle\varphi|a^\dagger a|\varphi\rangle\\ &= \left\|a|\varphi\rangle\right\|^2\\ &\geq 0\end{aligned}$$

Les valeurs propres de N sont également positives.

2.2 Analyse des valeurs et vecteurs propres de N

Proposition 2.1 (Coucou)**.** $[N, a] = -a$ *et* $[N, a^\dagger] = a^\dagger$

Démonstration.

$$\begin{aligned}[N,a] &= [a^\dagger a, a] = [a^\dagger, a]a + a^\dagger[a,a] = -a\\ [N,a^\dagger] &= [a^\dagger, a^\dagger]a + a^\dagger[a,a^\dagger] = a^\dagger\end{aligned}$$

Ce qui prouve l'assertion. ■

Proposition 2.2. *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.

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

■

Proposition 2.3. *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.

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

■

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