Oscillateur Harmonique

Cohen-Tannoudji Chapitre V

En mécanique Classique

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx$$

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

Solutions $x(t) = A\cos(\omega t - \varphi)$ $\quad A \in \mathbb{R}^+ \quad \varphi \in [0, 2\pi]$

Energie $E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$

Hamiltonien $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$

Importance de l'oscillateur harmonique :

décrit les mouvements autour d'une position d'équilibre.

L'oscillateur harmonique est le problème exactement soluble en mécanique quantique ayant le plus d'applications !!!

En mécanique quantique

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{kX^2}{2} \quad \text{avec} \quad [X, P] = i\hbar$$

Transformation canonique : $\begin{cases} X' = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}\, X \\ P' = \dfrac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\, P \end{cases}$

$$[X', P'] = i$$

$$H = \hbar\omega \left(\frac{P'^2}{2} + \frac{X'^2}{2} \right)$$

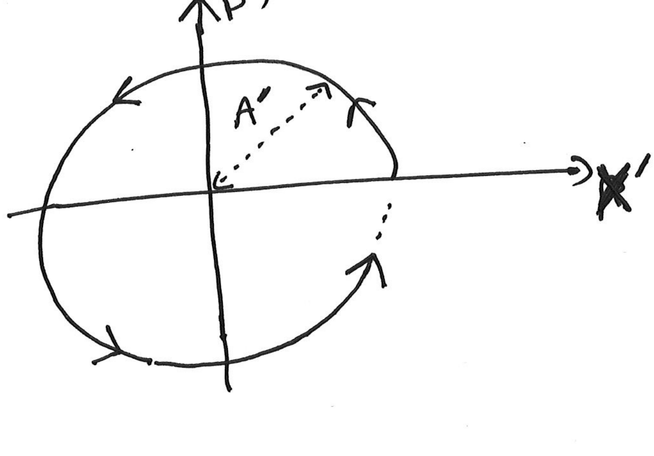
Note sur les solutions classiques :

$$X' = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, X = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, A \cos(\omega t - \varphi) = A' \cos(\omega t - \varphi)$$

$$A' = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, A$$

$$P' = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\, P = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\, m\dot{X} = \frac{\sqrt{m\omega}}{\sqrt{\hbar}}\, A \sin(\omega t - \varphi) = A' \sin(\omega t - \varphi)$$

$\longrightarrow$ dans le plan X', P' les orbites sont des cercles de rayon A'.



Problème à résoudre:

$$H = \hbar\omega\left(\frac{P^2}{2} + \frac{X^2}{2}\right) \qquad [X, P] = i$$

$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ trouver $|\psi\rangle$ et E

$$\begin{cases} a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP) \\ a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP) \end{cases} \iff \begin{cases} X = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+) \\ P = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^+ - a) \end{cases}$$

$$\boxed{[a, a^+] = 1}$$

Preuve : $[a, a^+] = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP), \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP)\right] = \frac{i}{2}[P, X] - \frac{i}{2}[X, P]$
$= 1.$

$$a^+a = \frac{1}{2}(X - iP)(X + iP) = \frac{1}{2}(X^2 + iXP - iPX + P^2) = \frac{1}{2}(X^2 + P^2 - 1)$$

$$\boxed{N = a^+a}$$

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

Nouveau problème

$[a, a^+] = 1 \qquad N = a^+ a$

Spectre de N ?
Vecteurs propres de N ?

1°) N est hermitien $N^+ = N$

2°) N est positif : $\forall |\varphi\rangle$, $\langle\varphi|N|\varphi\rangle = \langle\varphi|a^+ a|\varphi\rangle$

$$= \| a|\varphi\rangle\|^2 \geq 0$$

$\longrightarrow$ les valeurs propres de N sont positives.

3°) $[N, a] = -a$ ①

$[N, a^+] = a^+$ ②

utiliser $[AB, C] = [A, C]B + A[B, C]$

Preuve : $[N, a] = [a^+ a, a] = \underbrace{[a^+, a]}_{=-1} a + a^+ \underbrace{[a, a]}_{=0}$

$= -a$

4°) Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur propre de N de valeur propre ν

$N|\varphi\rangle = \nu|\varphi\rangle$

(4A) Alors • $a|\varphi\rangle$ est vecteur propre de N de valeur propre $\nu - 1$ (sauf si $\nu \neq 0$)

- si $\nu = 0$ alors $a|\varphi\rangle = 0$

Preuve : • $N(a|\varphi\rangle) \overset{①}{=} (aN - a)|\varphi\rangle = (a\nu - a)|\varphi\rangle$

$= (\nu - 1)(a|\varphi\rangle)$

• $\|a|\varphi\rangle\|^2 = \langle\varphi|a^+ a|\varphi\rangle = \nu\langle\varphi|\varphi\rangle = 0$ si $\nu = 0$.

(4B) Alors : - $a^+|\varphi\rangle$ est non nul

- $a^+|\varphi\rangle$ est un vecteur propre de N de valeur propre $\nu+1$.

Preuve : - $N(a^+|\varphi\rangle) \overset{②}{=} (a^+N + a^+)|\varphi\rangle = (a^+\nu + a^+)|\varphi\rangle$

$$= (\nu+1)\, a^+|\varphi\rangle$$

- $\|a^+|\varphi\rangle\|^2 = \langle\varphi|\, a a^+ |\varphi\rangle \underset{\text{car } [a,a^+]=1}{=} \langle\varphi|\, a^+a + 1 |\varphi\rangle$

$$= \langle\varphi|(N+1)|\varphi\rangle = (\nu+1)\langle\varphi|\varphi\rangle = \nu+1 \geq 0$$

car $\nu \geq 0$

5°) spectre de $N \subseteq \mathbb{N}$.

par l'absurde : supposons $N|\varphi\rangle = \nu|\varphi\rangle$ et $n < \nu < n+1$

alors $a^{n+1}|\varphi\rangle$ est non nul (voir (4A)).

et est vecteur propre de N de valeur propre $\nu - n - 1 < 0$ (voir (4A)).

$\longrightarrow$ contradiction voir ②

6°) Si il existe un vecteur propre $|\varphi\rangle$ de valeur propre $\nu = n \in \mathbb{N}$, alors le spectre de N est $\mathbb{N}$.

Preuve : action répétée de a et a^+ sur $|\varphi\rangle$ (voir 4A et 4B).

7°) Etat fondamental est non dégénéré.

résolvons l'équation $a|\varphi\rangle = 0$

$$\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP)|\varphi\rangle = 0$$

$$\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x\,\varphi(x) + \partial_x \varphi(x)\right) = 0$$

Solution : $\varphi(x) = C\, e^{-\frac{x^2}{2}}$ $\quad C =$ constante.
unique

8°) Tous les niveaux sont non dégénérés.

Par l'absurde. Supposons $\exists\, n \in \mathbb{N}$, $|\varphi\rangle, |\varphi'\rangle$ tels que

$$N|\varphi\rangle = n|\varphi\rangle$$
$$N|\varphi'\rangle = n|\varphi'\rangle$$
$$\langle\varphi|\varphi'\rangle = 0$$

Alors $a|\varphi\rangle$ et $a|\varphi'\rangle$ sont vecteurs propres de N de valeurs propres $n-1$.

$a|\varphi\rangle$ et $a|\varphi'\rangle$ sont orthogonaux :

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

Par récurrence : $a^n|\varphi\rangle$ et $a^n|\varphi'\rangle$ sont des vecteurs propres de N, de valeur propre 0, orthogonaux.

$\longrightarrow$ contradiction avec 7°)

Résumé et Notations

a = opérateur de destruction
a^+ = opérateur de création
$N = a^+a$ = opérateur nombre ("Number Operator")

Spectre et vecteurs propres de N :
$n \in \mathbb{N}$ $(n = 0, 1, 2, \dots)$
états propre $|n\rangle$ de valeurs propre n : $N|n\rangle = n|n\rangle$

$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ (voir 4A et 4B)
$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$

état fondamental $|0\rangle$

$$a|0\rangle = 0$$

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

$|n\rangle$ = base orthonormée de l'espace de Hilbert : $\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \mathbb{I}$

Spectre de l'oscillateur Harmonique
$H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}) \longrightarrow$ spectre $= \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$
$n = 0, 1, 2, \dots$

Energie de point zéro (zero-point energy) $= \frac{\hbar\omega}{2}$
(voir chapitre 1).

Evolution temporelle

Soit l'état à l'instant $t=0$

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

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

Que vaut $\langle\psi(t)| X |\psi(t)\rangle = ?$

$\langle\psi(t)| P |\psi(t)\rangle = ?$

Calculons $$\langle\psi(t)| a |\psi(t)\rangle = \left(\sum_{n'=0}^{\infty} \overline{c_{n'}} e^{i(n'+\frac{1}{2})\omega t} \langle n'|\right)\left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} \times \sqrt{n}\, |n-1\rangle\right)$$

$$= \sum_{n'=0}^{\infty} \overline{c_{n'}}\, c_{n+1} \sqrt{n+1}\, e^{-i\omega t}$$

$$= e^{-i\omega t} \alpha \qquad \alpha \in \mathbb{C}$$

$$\boxed{\alpha = \frac{A}{\sqrt{2}} e^{i\phi}}$$

$$\langle\psi(t)| X |\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)| \frac{a+a^+}{\sqrt{2}} |\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha e^{-i\omega t} + \bar{\alpha} e^{i\omega t}\right)$$

$$= \frac{A}{2}\left(e^{-i\omega t} e^{i\phi} + e^{i\omega t} e^{-i\phi}\right)$$

$$= A \cos(\omega t - \phi)$$

$$\langle\psi(t)| P |\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)| \frac{i}{\sqrt{2}}(a^+ - a) |\psi(t)\rangle = -A \sin(\omega t - \phi)$$

$\longrightarrow$ $\langle X\rangle$ et $\langle P\rangle$ décrivent les orbites classiques.

Fonctions d'Onde de l'Oscillateur harmonique

$$|0\rangle \longrightarrow \varphi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2}$$ est normalisé $\int dx |\varphi_0(x)|^2 = 1$

$$|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = \frac{(x-ip)^n}{\sqrt{2^n n!}}|0\rangle$$

$$\rightarrow \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}(x-\partial_x)^n \varphi_0(x) = (\text{Polynome d'ordre } n) \times e^{-\frac{x^2}{2}}$$

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x)$$

↳ Polynomes d'Hermite

$$\varphi_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2}$$

$$\varphi_1 = \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{2}} e^{-x^2/2} \cdot (2x)$$

$$\varphi_2 = \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{4 \cdot 2}} e^{-x^2/2}(4x^2-2)$$

$$\varphi_3 = \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{8 \cdot 6}} e^{-x^2/2}(8x^3-12x)$$

etc...

Méthode Polynomiale Cohen Tannoudji Complement C_V

Nous allons résoudre l'équation pour l'oscillateur harmonique sans passer par les opérateurs de création /destruction.

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

1°) Remarque : si $\psi(x)$ est solution, $\psi(-x)$ est solution

$\rightarrow \psi(x) \pm \psi(-x)$ sont solution

$\rightarrow$ on peut prendre les solutions paires ou impaires.

2°) Comportement pour grand x (voir approximation WKB)

si on écrit $\psi(x) = e^{\alpha(x)}$

alors on a $(-\alpha'' - \alpha'^2 + x^2)\psi = E\psi$

$\rightarrow$ pour grand x : $\alpha'^2 \simeq x^2 \rightarrow \alpha \simeq \pm \frac{x^2}{2}$

$\rightarrow \psi(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$ ou $\underbrace{\psi(x) = e^{+x^2/2}}_{\text{à rejeter}}$

3°) On pose $\psi(x) = h(x)\, e^{-x^2/2}$

(1) devient : $h''(x) - 2x\, h'(x) + (2E-1)h = 0 \qquad (2)$

4°) On cherche une solution de la forme

$$h(x) = x^p \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m}\, x^{2m}$$

on a $$h' = \sum_{m=0}^{\infty} (2m+p)\, a_{2m}\, x^{2m+p-1}$$

$$h'' = \sum_{m=0}^{\infty} (2m+p)(2m+p-1)\, a_{2m}\, x^{2m+p-2}$$

② devient $$\sum_{m=0}^{\infty} \Big[(2m+p)(2m+p-1)\, a_{2m}\Big] x^{2m+p-2}$$

$$+ \sum_{m=0}^{\infty} \Big[-2(2m+p) + (2E-1)\Big] a_{2m}\, x^{2m+p} = 0$$

2A → le terme en x^{p-2} doit s'annuller.

$$\longrightarrow \quad p(p-1)\, a_0\, x^{p-2} = 0 \quad \longrightarrow \quad p = 0 \text{ ou } p = 1$$

2B les autres termes donnent la récurrence

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

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

5°) forme asymptotique.

Pour grand m on a $a_{2m+2} \simeq \frac{1}{m} a_{2m}$

Ce qui correspond au développement en série de e^{+x^2}

$$e^{+x^2} = \sum_m \frac{1}{m!} x^{2m} = \sum_m c_m x^{2m}$$

$$\text{et } \frac{c_{2m+2}}{c_{2m}} = \frac{1}{m}$$

$\longrightarrow$ le comportement asymptotique est

$$e^{-\frac{x^2}{2}} e^{+x^2} \simeq e^{+\frac{x^2}{2}} \longrightarrow$$ pas acceptable.

6°) série se termine

On n'aura pas la forme asymptotique 5°) si la récurrence 2B) se termine après un nombre fini de termes: E est tel que $4m + 2p + 1 - 2E = 0$

$\longrightarrow$ $\exists m$ tel que

$\exists p = 0, 1$

$$\Longrightarrow \boxed{E = n + \frac{1}{2}} \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$n = 2m + p$$

7°) ~~le coeff~~ Normalisation

Le coefficient a_0 n'est pas déterminé par la récurrence.

$\longrightarrow$ on le choisit de telle manière que la solution soit normalisée.