Oscillateur harmonique quantique en 1D

Mécanique Quantique

Hossein Rahimzadeh

8/19/2008

Oscillateur harmonique Quantique en 1D

Équation de Schrödinger :

$$\hat{H}\left|\Psi\right\rangle = \hat{E}\left|\Psi\right\rangle$$

Où,

- $\left|\Psi\right\rangle$: La fonction d'onde d'un système
- $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$: L'opérateur Hamiltonien du système
- $\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$: L'opérateur d'énergie

En une dimension :

$$\hat{H}\psi(x,t) = \hat{E}\psi(x,t)$$

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\right]\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)$$

Soit $\psi'(x,t)$ une solution particulière de cette équation, par la méthode de séparation des variables on pose :

$$\psi'(x,t) = u(x)T(t)$$

On dérive :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\psi'(x,t) = T(t)\dfrac{d^2}{dx^2}u(x) \\ \dfrac{\partial}{\partial t}\psi'(x,t) = u(x)\dfrac{d}{dt}T(t) \end{cases}$$

On substitut dans l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}T(t)\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x)T(t) = i\hbar u(x)\frac{d}{dt}T(t)$$

On divise par $\psi'(x,t) = u(x)T(t)$:

$$\frac{1}{u(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x)\right] = \frac{i\hbar}{T(t)}\frac{d}{dt}T(t)$$

Les termes de chaque côté de cette équation doivent être constante.

$$\underbrace{\frac{1}{u(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x)\right]}_{cte=E} = \underbrace{\frac{i\hbar}{T(t)}\frac{d}{dt}T(t)}_{cte=E}$$

Le terme à droite :

$$\frac{i\hbar}{T(t)}\frac{d}{dt}T(t) = E \Rightarrow \frac{dT(t)}{T(t)} = -\frac{iE}{\hbar}dt \Rightarrow T(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

Le terme à gauche :

$$\frac{1}{u(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x)\right] = E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$$

C'est l'équation de Schrödinger indépendante du temps en une dimension.

C'est une équation aux valeurs propres car :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]u(x)=Eu(x)\text{, ou } \hat{H}u(x)=Eu(x)$$

Solution

Le potentiel de l'oscillateur harmonique quantique s'écrit :

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

Donc,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]u(x)=Eu(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2u(x)=Eu(x)$$

Avec le changement de variable $y=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}x$,

$$\frac{d}{dx}=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{d}{dy}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}=\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{dy^2}$$

Donc, équation de Schrödinger s'écrit comme :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{dy^2}u(y)+\frac{1}{2}m\omega^2\left(y\right)^2u(y)=Eu(y)$$

$$-\frac{1}{2}\hbar\omega\frac{d^2}{dy^2}u(y)+\frac{1}{2}\hbar\omega y^2u(y)=Eu(y)$$

$$\frac{d^2}{dy^2}u(y)-y^2u(y)=-\frac{2E}{\hbar\omega}u(y)$$

$$\frac{d^2}{dy^2}u(y)+(\frac{2E}{\hbar\omega}-y^2)u(y)=0$$

Alors, on doit résoudre l'équation suivante :

$$\boxed{\frac{d^2}{dy^2}u(y)+(\varepsilon-y^2)u(y)=0 \text{ où } \varepsilon=\frac{2E}{\hbar\omega}}$$

Solution asymptotique :

Pour les valeurs de y^2 suffisamment grands, cette équation devient :

$$\boxed{\frac{d^2}{dy^2}u_0(y)-y^2u_0(y)=0}$$

Dont la solution asymptotique est de la forme :

$$u_0(y)\approx e^{-ay^2}$$

On trouve a en substituent dans l'équation :

$$\frac{d^2}{dy^2}e^{-ay^2}-y^2e^{-ay^2}=0$$

Mais,

$$\frac{d^2}{dy^2}e^{-ay^2}=-2ae^{-ay^2}+4a^2y^2e^{-ay^2}\underset{\text{Pour } y^2\to\infty}{\approx}4a^2y^2e^{-ay^2}$$

Donc,

$$4a^2y^2e^{-ay^2}-y^2e^{-ay^2}=0$$

Cette équation est valable pour $a=\frac{1}{2}$.

Alors,

$$\boxed{u_0(y) \approx e^{-\frac{y^2}{2}}}$$

Posons :

$$u(y) = H(y)e^{-\frac{y^2}{2}}$$

Où $H(y)$ est un polynôme en y .On substitue dans l'équation Schrödinger :

$$\frac{d^2}{dy^2}H(y)e^{-\frac{y^2}{2}} + (\varepsilon - y^2)H(y)e^{-\frac{y^2}{2}} = 0 \text{ où } \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

Mais,

$$\frac{d}{dy}H(y)e^{-\frac{y^2}{2}} = \frac{dH(y)}{dy}e^{-\frac{y^2}{2}} - yH(y)e^{-\frac{y^2}{2}}$$

Et,

$$\frac{d^2}{dy^2}H(y)e^{-\frac{y^2}{2}} = \frac{d^2H(y)}{dy^2}e^{-\frac{y^2}{2}} - y\frac{dH(y)}{dy}e^{-\frac{y^2}{2}} - H(y)e^{-\frac{y^2}{2}} - y\frac{dH(y)}{dy}e^{-\frac{y^2}{2}} + y^2H(y)e^{-\frac{y^2}{2}}$$

Donc,

$$\frac{d^2H(y)}{dy^2}e^{-\frac{y^2}{2}} - y\frac{dH(y)}{dy}e^{-\frac{y^2}{2}} - H(y)e^{-\frac{y^2}{2}} - y\frac{dH(y)}{dy}e^{-\frac{y^2}{2}} + y^2H(y)e^{-\frac{y^2}{2}} + (\varepsilon - y^2)H(y)e^{-\frac{y^2}{2}} = 0 \text{ où } \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$\boxed{\frac{d^2H(y)}{dy^2} - 2y\frac{dH(y)}{dy} + (\varepsilon - 1)H(y) = 0 \text{ où } \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}}$$

C'est l'équation de Hermite si $\varepsilon - 1 = 2n$, $n = 0,1,2,\ldots$. Dont, les solutions sont les polynômes de Hermite $H_n(x)$.**On trouve les valeurs propres E_n :**

$$\frac{2E_n}{\hbar\omega} - 1 = 2n \ , \ n = 0,1,2,\ldots$$

Alors,

$$\boxed{E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2}) \ \ , \ \ n = 0,1,2,\dots}$$

C’est le spectre des énergies discrètes de l’oscillateur harmonique quantique.

On trouve les fonctions propres dans l’espace des y :

$$u_n(y) = C_n e^{-\frac{y^2}{2}} H_n(y) \ \ , \ \ n = 0,1,2,\dots$$

On trouve C_n :

Les fonctions propres $u_n(y)$ sont orthonormées :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy u_m^*(y) u_n(y) = \delta_{mn}$$

Pour $m = n$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy u_n^*(y) u_n(y) = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy \left[C_n e^{-\frac{y^2}{2}} H_n(y) \right]^* C_n e^{-\frac{y^2}{2}} H_n(y) = 1$$

$$|C_n|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-y^2} \left[H_n(y)\right]^2 = 1$$

$$|C_n|^2 2^n n! \sqrt{\pi} = 1$$

$$\boxed{C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \ \ , \ \ n = 0,1,2,\dots}$$

Les fonctions propres dans l'espace des y :

$$\boxed{u_n(y)=\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{y^2}{2}}H_n(y)\ \ ,\ \ n=0,1,2,\ldots}$$

Les fonctions propres dans l'espace des x :

On rappelle que :

$$y=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}x\ \text{ et, }\ dy=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}dx$$

Donc,

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dx\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}u_m^*(y)u_n(y)=\delta_{mn}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dx\underbrace{\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}u_m^*(y)}_{u_m^*(x)}\underbrace{\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}u_n(y)}_{u_n(x)}=\delta_{mn}$$

Alors,

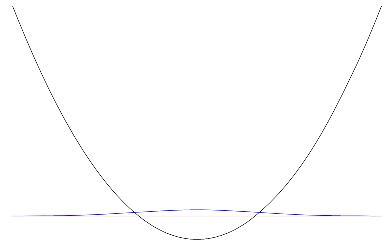
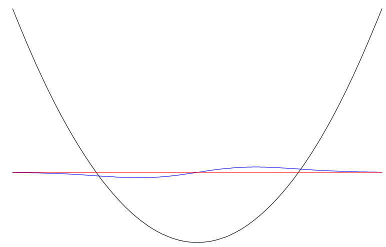
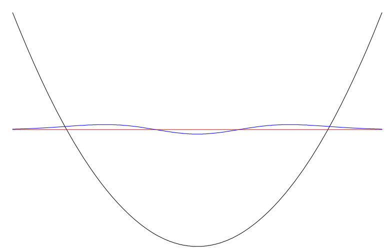
$$u_n(x)=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}u_n(y)$$

Donc,

$$u_n(x)=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}H_n\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}x\right]\ \ ,\ \ n=0,1,2,\ldots$$

$$\boxed{u_n(x)=\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}H_n\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}x\right]\ \ ,\ \ n=0,1,2,\ldots}$$

Exemples

$n=0$	$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$	$u_0(x)=\left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$	
$n=1$	$E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega$	$u_1(x)=\left(\frac{4}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}x$	
$n=2$	$E_2=\frac{5}{2}\hbar\omega$	$u_2(x)=\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2-1)$	
$n=3$	$E_3=\frac{7}{2}\hbar\omega$	$u_3(x)=\left(\frac{1}{9\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2-3)x$