Oscillateur harmonique à une dimension

Clement Lotteau

May 2020

1 Introduction

On cherche à trouver une solution analytique de l'équation de Schrödinger pour un oscillateur harmonique à une dimension[1]. On rappelle quelques notions. Equation de Schrödinger indépendante du temps : $H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$. Où H est l'opérateur hamiltonien, et E l'énergie de l'état quantique $|\phi\rangle$. En représentation $|x\rangle$:

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

On peut montrer que les valeurs de l'énergie sont discrètes et s'écrivent : $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ où n est un entier positif ou nul. On introduit aussi les opérateurs d'échelle :

$$\boxed{a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \quad et \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) \qquad avec \quad \begin{cases} \hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X \\ \hat{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}P \end{cases}}$$

a et $a^\dagger$ sont respectivement les opérateurs d'annihilation et de création. Ils permettent de retirer et d'ajouter la quantité $\hbar\omega$ à l'énergie E_n. L'état fondamental du système a une énergie $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. L'action de $a^\dagger$ sur l'état quantique fondamental $|\phi_0\rangle$ a pour effet de passer de l'énergie E_0 à l'énergie $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$. L'énergie ne pouvant par être inférieure à celle de l'état fondamental, l'action de a sur $|\phi_0\rangle$ est nulle : $a|\phi_0\rangle = 0$. Cette conséquence nous permet de déduire la fonction d'onde de l'état fondamental :

$$a|\phi_0\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}}P\right)|\phi_0\rangle = 0$$

Ainsi :

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{d}{dx}\right)\phi_0(x) = 0$$

[1] [Cla18]

Cette équation a pour solution : $\phi_0(x) = c^{te} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$ où c^{te} est une constante de normalisation . L'action de $a^\dagger$ sur cette fonction d'onde nous permet d'obtenir celles des états d'énergie supérieure. En répétant l'opération n fois, on obtient la fonction d'onde de l'état d'énergie E_n : $\phi_n(x) = \left[\frac{1}{2^n n!}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^n\right]^{1/2}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left[\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{d}{dx}\right]^n e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}}$. Ce sont des polynômes d'Hermite. Les fonctions d'onde ϕ_0, ϕ_1, ϕ_2 et ϕ_3 sont :

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

$$\phi_1(x) = \left[\frac{4}{\pi}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3\right]^{\frac{1}{4}} x e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}}$$

$$\phi_2(x) = \left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\left[2\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right] e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}}$$

$$\phi_3(x) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\frac{1}{\pi}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3\right]^{\frac{1}{4}}\left[2\frac{m\omega}{\hbar}x^3 - 3x\right] e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}}$$

2 Calcul numérique des fonctions d'onde

Dans cette section, on s'intéresse à au tracer de ces quatre fonctions d'onde ainsi que de leur module carré. Le programme utilisé pour gérer les données est codé en C++. m, ω et $\hbar$ ont tous été choisis égaux à 1 et le calcul est effectué entre $x = -5$ et $x = +5$ avec un pas de 0,02. Le code calcule dans un premier temps ϕ_0 puis écrit la position, l'amplitude de la fonction d'onde et de son module carré dans un fichier. Il recommence ensuite l'opération avec ϕ_1, ϕ_2 et ϕ_3 pour un total de quatre fichiers. Les données générées sont ensuite traitées dans un programme écrit en Python constistant à tracer les fonctions d'onde et leur modules carré grâce à l'outil Matplotlib.

Ici ajouter que ϕ_n a n 0 (p.551). Faire le lien entre valeurs notables de ϕ_n et énergie (p.520) $\rightarrow$E$_p = E_c$ croissent avec n (p.523)

References

[Cla18] Franck Laloë Claude Cohen-Tannoudji Bernard Diu. *Mécanique quantique Tome 1*. EDP Sciences, 2018, pp. 371–378. ISBN: 9782759822874.

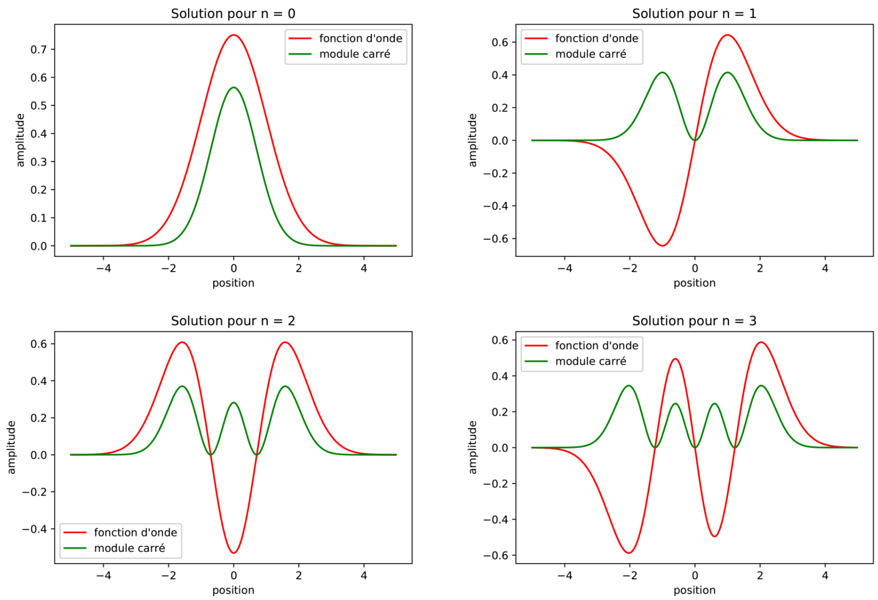

Figure 1: Fonction d'onde (rouge) et module carré (vert). On observe que la partié de la fonction d'onde correspond à la parité de n.