L'oscillateur harmonique à une dimension

I) Introduction

- Particule de masse m dans un potentiel $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \Rightarrow F_x = -\frac{dV}{dx} = -kx$

$V(x)$: potentiel harmonique $\Rightarrow$ oscillation de la particule $\omega^2 = \frac{k}{m}$

- Equation du mouvement : $m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx \Rightarrow x = x_n \cos(\omega t - \varphi)$

$\Rightarrow$ mouvement oscillatoire sinusoïdale d'amplitude x_n, de pulsation ω.

Energie cinétique de la particule : $T = \frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = \frac{p^2}{2m}$

Energie totale : $E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$

$\Rightarrow E = \frac{1}{2}m\omega^2 x_n^2$ (l'energie totale ne dépend pas du temps)

- Quantiquement on remplace les grandeurs x et p par les observables X et P. On a : $[X, P] = i\hbar$

L'hamiltonien du système est : $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2X^2$

Equation aux valeurs propres : $H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \Rightarrow \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right\}\varphi(x) = E\varphi(x)$

- Les valeurs propres de l'hamiltonien sont positives
- Les fonctions propres de H ont une parité définie
- Le spectre d'énergie est discret

II) Valeurs propres de l'hamiltonien

- On introduit les observables sans dimensions :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.X \qquad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}.P$$

on a : $[\hat{X}, \hat{P}] = i$ et $H = \hbar\omega\hat{H}$ avec $\hat{H} = \frac{1}{2}\{\hat{X}^2 + \hat{P}^2\}$

Equation aux valeurs propres : $\hat{H}|\varphi_v^i\rangle = \varepsilon_v|\varphi_v^i\rangle$

- On définit les opérateurs : $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P})$ et $a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P})$

donc : $\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^+ + a)$ et $\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2}}i(a^+ - a)$ et $[a, a^+] = 1$

on a : $\hat{H} = a^+a + \frac{1}{2}$ et $\hat{H} = aa^+ - \frac{1}{2}$

on pose : $N = a^+a$ $(N^+ = N)$ donc : $\hat{H} = N + \frac{1}{2}$

on a $[N, a] = -a$ et $[N, a^+] = a^+$

on aura l'equation aux valeurs propres : $N|\varphi_v^i\rangle = v|\varphi_v^i\rangle \Rightarrow \hat{H}|\varphi_v^i\rangle = (v + \frac{1}{2})|\varphi_v^i\rangle$

comme $\hat{H} = \frac{1}{\hbar\omega} H$ alors on aura : $H|\varphi_v^i\rangle = (v+\frac{1}{2})\hbar\omega|\varphi_v^i\rangle$

- on a les lemmes suivants :
  - $v \geqslant 0$
  - si $v=0$ $\quad a|\varphi^i_{v=0}\rangle = 0$
  - si $v>0$ $\quad N a|\varphi_v^i\rangle = (v-1)a|\varphi_v^i\rangle$ $\quad N a^p|\varphi_v^i\rangle = (v-p)a|\varphi_v^i\rangle$
  - $a^+|\varphi_v^i\rangle \neq 0$
  - si $v>0$ $\quad N a^+|\varphi_v^i\rangle = (v+1)a^+|\varphi_v^i\rangle$ $\quad N a^{+p}|\varphi_v^i\rangle = (v+p)a^{+p}|\varphi_v^i\rangle$

- On a : $N|\varphi_v^i\rangle = v|\varphi_v^i\rangle$ où v est un entier n positif.

Les valeurs propres de H sont de la forme : $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$

L'énergie de l'oscillateur harmonique est quantifiée.

- Remarque.
  - a est un opérateur d'annihilation
  - a^+ est un opérateur de création
- Le niveau fondamental $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ n'est pas dégénéré
- Plus généralement tous les niveaux E_n sont non dégénérés.

III) États propres de l'hamiltonien

- $|\varphi_0\rangle$ vecteur associé à $n=0$: $a|\varphi_0\rangle = 0$
- $|\varphi_n\rangle$ vecteur associé à n : $|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \cdot a^+|\varphi_{n-1}\rangle$
- on aura $|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|\varphi_0\rangle$

- Orthonormalisation : $\langle\varphi_{n'}|\varphi_n\rangle = \delta_{nn'}$
- Relation de fermeture : $\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1$
- On a les relations :

$$\begin{cases} a^+|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\varphi_{n+1}\rangle \\ a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\varphi_{n-1}\rangle \end{cases}$$

- Nous avons les relations :

$$\begin{cases} X|\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\sqrt{n+1}\,|\varphi_{n+1}\rangle + \sqrt{n}\,|\varphi_{n-1}\rangle\right\} \\ P|\varphi_n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left\{\sqrt{n+1}\,|\varphi_{n+1}\rangle - \sqrt{n}\,|\varphi_{n-1}\rangle\right\} \end{cases}$$

On a donc les éléments de matrice :

$$\langle \varphi_{n'} | a | \varphi_n \rangle = \sqrt{n}\,.\,\delta_{\overset{\text{ligne}}{n'},\, n-1}\ \text{colonne}$$

$$\langle \varphi_{n'} | a^+ | \varphi_n \rangle = \sqrt{n+1}\,.\,\delta_{n',n+1}$$

$$\langle \varphi_{n'} | X | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}\right\}$$

$$\langle \varphi_{n'} | P | \varphi_n \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left\{\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} - \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}\right\}$$

- La fonction d'onde de l'état stationnaire φ_n est :

$$\varphi_n(x) = \left\{\frac{1}{2^n n!\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^n}\right\}^{1/2} \cdot \left\{\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{d}{dx}\right\}^n e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \cdot \left\{\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right\}^{1/4}$$

où a $\quad \varphi_0(x) = \left\{\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right\}^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega x^2}{\hbar}}$

et $\quad \varphi_n(x) = \langle x | \varphi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x | (a^+)^n | \varphi_0 \rangle$

IV) Discussion physique

- Nous avons : $\langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle = 0$ et $\langle \varphi_n | P | \varphi_n \rangle = 0$
- On a : $\langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle = \frac{\hbar}{m\omega}(n + \frac{1}{2})$ et $\langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle = m\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$

d'où les écarts quadratiques :

$$(\Delta X)^2 = \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega}$$

$$(\Delta P)^2 = \left(n + \frac{1}{2}\right)m\hbar\omega$$

On a pour le produit $\Delta X . \Delta P$: $\quad \Delta X . \Delta P = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar$

- L'énergie potentielle moyenne d'une particule dans l'état $|\varphi_n\rangle$ est :

$$\langle V(X)\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2\langle X^2\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta X)^2$$

L'énergie cinétique moyenne est :

$$\left\langle \frac{P^2}{2m}\right\rangle = \frac{1}{2m}.(\Delta P)^2$$

- On a donc :

$$\langle V(X)\rangle = \left\langle \frac{P^2}{2m}\right\rangle = \frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \frac{E_n}{2}$$

VI) Résolution de l'équation aux valeurs propres de l'oscillateur harmonique par la méthode polynomiale

• En représentation $\{|x\rangle\}$ l'équation aux valeurs propres de H s'écrit :

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right\}\varphi(x)=E\,\varphi(x)$$

• On pose : $\beta=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$; $\hat{x}=\beta x$; $\hat{p}=\frac{p}{\beta\hbar}$

• $|\xi_{\hat{x}}\rangle$ vecteur propre de $\hat{X}$ avec la valeur propre $\hat{x}$: $\hat{X}|\xi_{\hat{x}}\rangle=\hat{x}|\xi_{\hat{x}}\rangle$

on a $\hat{x}=\beta x$ et on pose : $|x\rangle=|\frac{\hat{x}}{\beta}\rangle=\sqrt{\beta}\,|\xi_{\hat{x}}\rangle$

• Nous avons : $\varphi(x)=\langle x|\varphi\rangle$

et : $\hat{\varphi}(\hat{x})=\langle\xi_{\hat{x}}|\varphi\rangle=\frac{1}{\sqrt{\beta}}\langle\frac{\hat{x}}{\beta}|\varphi\rangle=\frac{1}{\sqrt{\beta}}\langle x|\varphi\rangle=\frac{1}{\sqrt{\beta}}\varphi(x)$

donc : $\hat{\varphi}(\hat{x})=\frac{1}{\sqrt{\beta}}\varphi(x)$

• L'équation aux valeurs propres de H s'écrira donc :

$$\frac{1}{2}\left\{-\frac{d^2}{d\hat{x}^2}+\hat{x}^2\right\}\hat{\varphi}(\hat{x})=\varepsilon\,\hat{\varphi}(\hat{x})\qquad\text{avec } \varepsilon=\frac{E}{\hbar\omega}$$

• On aura donc l'équation : $\left\{\frac{d^2}{d\hat{x}^2}-(\hat{x}^2-2\varepsilon)\right\}\hat{\varphi}(\hat{x})=0$

Lorsque $\hat{x}$ est très grand on a $\hat{\varphi}(\hat{x})=h(\hat{x}).e^{-\frac{\hat{x}^2}{2}}$

nous aurons alors : $\frac{d^2}{d\hat{x}^2}h(\hat{x})-2\hat{x}\frac{d}{d\hat{x}}h(\hat{x})+(2\varepsilon-1)h(\hat{x})=0$

• On pose $h(\hat{x})=\sum_{m=0}^{\infty}a_{2m}.\hat{x}^{2m+p}$

(on doit avoir $h(\hat{x})$ pair ou impaire $\Rightarrow h(x)=\hat{x}^p.\sum_{m=0}^{\infty}a_{2m}\hat{x}^{2m}$)

• on obtient ainsi : $\frac{d}{d\hat{x}}h(\hat{x})=\sum_{m=0}^{\infty}(2m+p)\,a_{2m}\,\hat{x}^{2m+p-1}$

et : $\frac{d^2}{d\hat{x}^2}h(\hat{x})=\sum_{m=0}^{\infty}(2m+p)(2m+p-1)\,a_{2m}\,\hat{x}^{2m+p-2}$

en reportant dans l'équation précédente il faut que coefficient du terme général en $\hat{x}^{2m+p}$ soit nul, donc on aura :

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

Le terme de plus bas degré est en $\hat{x}^{p-2}$ $(m=-1\ ;\ a_{-2}=0)\Rightarrow p(p-1)a_0=0$

or on a $a_0\neq 0$ donc ma soit $p=0$, soit $p=1$.

• Nous avons la relation de récurrence :

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

Pour que la solution soit acceptable du point de vue physique, il faut qu'il existe un $m = m_0$ tel que $a_{2m_0+2} = 0$, donc que :

$$4m_0 + 2p + 1 - 2\mathcal{E} = 0$$

c'est à dire : $\mathcal{E} = \frac{1}{2}(4m_0 + 2p + 1)$

or $2m_0 + p$ est un entier pair ou impair suivant que $p = 0$ ou $p = 1$

on pose donc : $n = 2m_0 + p$ et l'on aura :

$$\mathcal{E} = n + \frac{1}{2}$$

or $\mathcal{E} = E/\hbar\omega$, d'où la relation de quantification de l'énergie :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

• Nous avons : $\tilde{\varphi}_n(\tilde{x}) = e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2}} \cdot h_n(\tilde{x})$ ($h_n(\tilde{x})$: polynome de degré n)

Pour l'état fondamental on a : $\tilde{\varphi}_0(\tilde{x}) = a_0\, e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2}}$ d'où en normalisant : $a_0 = \pi^{-1/4}$ et comme $\tilde{\varphi}(\tilde{x}) = \frac{1}{\sqrt{\beta}}\varphi(x)$ alors : $\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{+1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$

• On trouve : $\varphi_1(x) = \left(\frac{4\beta^6}{\pi}\right)^{1/4} x\, e^{-\frac{\beta^2x^2}{2}}$ et $\varphi_2(x) = \left(\frac{\beta^2}{4\pi}\right)^{1/4} \cdot (2\beta^2x^2 - 1)\, e^{-\frac{\beta^2x^2}{2}}$

• Remarque : on a avec $\mathcal{E} = n + \frac{1}{2}$ l'équation différentielle :

$$\left\{\frac{d^2}{d\tilde{x}^2} - 2\tilde{x}\frac{d}{d\tilde{x}} + 2n\right\} h(\tilde{x}) = 0$$