IOGS Bordeaux
Mécanique Quantique 2A
2024-2025

TD#1 : Oscillateur harmonique quantique
CORRECTION

oscillateur harmonique = brique de base de la physique

Il fait naître les ondes harmoniques et modélise tout minimum d'énergie près de l'équilibre. Classiquement, l'oscillation correspond au passage de l'énergie mécanique du système d'une forme potentielle à une forme cinétique et inversement ($E = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}mv^2$).

L'oscillateur harmonique quantique lui ressemble beaucoup : l'énergie méccanique devient un opérateur hamiltonien se partageant là encore en une partie potentielle et une partie cinétique.

A. Mise en forme

B. Valeurs propres et états propres de $\hat{N}$

8/ On a $|\varphi_n\rangle = c_n\hat{a}^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle$ soit

$$\begin{aligned}
\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle &= \langle\varphi_n| c_n\hat{a}^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle \\
&= \left(\langle\varphi_{n-1}| \hat{a}c_n^*\right) c_n\hat{a}^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle \\
&= |c_n|^2 \langle\varphi_{n-1}| \hat{a}\hat{a}^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle \\
&= |c_n|^2 \langle\varphi_{n-1}| 1 + \hat{N} |\varphi_{n-1}\rangle \\
&= |c_n|^2 \left[1 + (n-1)\right] \langle\varphi_{n-1}|\varphi_{n-1}\rangle \\
&= |c_n|^2 n \langle\varphi_{n-1}|\varphi_{n-1}\rangle
\end{aligned}$$

Et donc, d'après la condition d'orthonormalisation ($\langle\varphi_i|\varphi_i\rangle = 1$), on a $c_n = \frac{1}{\sqrt{n}}$ (réel et positif).

On a maintenant $|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle$ soit encore

$$\sqrt{n}\,|\varphi_n\rangle = \hat{a}^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle \Leftrightarrow \hat{a}^\dagger |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\varphi_{n+1}\rangle$$

D'autre part

$$\begin{aligned}
|\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle \\
\Leftrightarrow \hat{a}|\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}\hat{a}^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle \\
\Leftrightarrow \hat{a}|\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}}(1+\hat{N}) |\varphi_{n-1}\rangle \\
\Leftrightarrow \hat{a}|\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}}[1+(n-1)] |\varphi_{n-1}\rangle \\
\Leftrightarrow \hat{a}|\varphi_n\rangle &= \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle
\end{aligned}$$

9/ D'après la question précédente on a

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^\dagger \left(\frac{1}{\sqrt{n-1}}\hat{a}^\dagger |\varphi_{n-2}\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{n}}.\frac{1}{\sqrt{n-1}}.\frac{1}{\sqrt{n-2}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^3 |\varphi_{n-3}\rangle = ...$$

Ainsi par récurrence on montre que

$$|\varphi_n\rangle = \frac{\left(\hat{a}^\dagger\right)^n}{\sqrt{n!}} |\varphi_0\rangle$$

C. Fonctions d'onde

10/ Pour passer en représentation $\{|x\rangle\}$ ($\{|\vec{r}\rangle\}$ en 3D) la relation est $\varphi_n(x) = \langle x|\varphi_n\rangle$. $\varphi_n(x)$ est la fonction d'onde dans l'espace des positions (ici selon x car problème 1D).

11/ On a $\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0$ (voir question **8/**). De plus d'après l'expression générale de E_n on sait que l'état fondamental possède une énergie $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$. Par ailleurs :

$$\begin{aligned}
\langle x|\hat{a}|\varphi_0\rangle &= 0 \\
\Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\langle x|\hat{X}+i\hat{P}|\varphi_0\rangle &= 0 \\
\Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\langle x|\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}+i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{p}|\varphi_0\rangle &= 0 \\
\Leftrightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle x|\hat{x}|\varphi_0\rangle + i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\langle x|\hat{p}|\varphi_0\rangle &= 0 \\
\Leftrightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\varphi_0(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\varphi_0'(x) &= 0 \\
\Leftrightarrow \frac{m\omega}{\hbar}x\varphi_0(x)+\varphi_0'(x) &= 0 \\
\Leftrightarrow \varphi_0'(x) &= -\frac{m\omega}{\hbar}x\varphi_0(x)
\end{aligned}$$

On remarque facilement que la solution est de la forme $\varphi_0(x) = Ce^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$ où C est une constante. Pour déterminer C on utilise la propriété suivante :

$$\begin{aligned}
\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1 &= \int dx|\varphi_0(x)|^2 \\
\Leftrightarrow 1 &= |C|^2 \int dx e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} \\
\Leftrightarrow 1 &= |C|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \\
\Leftrightarrow C &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}
\end{aligned}$$

Au final : $\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$

Commentaires : on observe que l'énergie de l'état fondamental n'est pas nulle (contrairement au cas classique) et vaut $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$. Cette énergie est appelé énergie de point zéro et est due aux fluctuations quantiques. Elle vient de la non-commutation entre $\hat{x}$ et $\hat{p}$. Le principe d'incertitude d'Heisenberg, qui oblige un système quantique à avoir une agitation minimale, traduit cette non-commutation. Par exemple les fluctuations quantiques du vide sont responsables de nombreux phénomènes tels que l'émission spontanée, l'effet Casimir, etc...

La particule classique sans énergie est confinée au fond du puits parabolique, mais le système quantique est une onde, pour la confiner spatialement il faut superposer des fréquences différentes et donc augmenter l'impulsion (interdépendance exprimée par la relation d'incertitude).

De plus la densité de probabilité de présence cet état $|\varphi_0(x)|^2$ indique que la particule a une probabilité non nulle de se trouver en dehors des limites "classiques".

12/ On a $|\varphi_1\rangle = \hat{a}^\dagger |\varphi_0\rangle$ soit encore

$$\varphi_1(x) = \langle x|\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle x| \hat{X} - i\hat{P} |\varphi_0\rangle = ...$$

De manière similaire on obtient

$$\varphi_1(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x\varphi_0(x) - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \varphi_0'(x)$$

En dérivant $\varphi_0(x)$ et en insérant l'expression qui en resulte dans l'équation précédente on obtient

$$\varphi_1(x) = \left[\frac{4}{\pi}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3\right]^{1/4} x e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

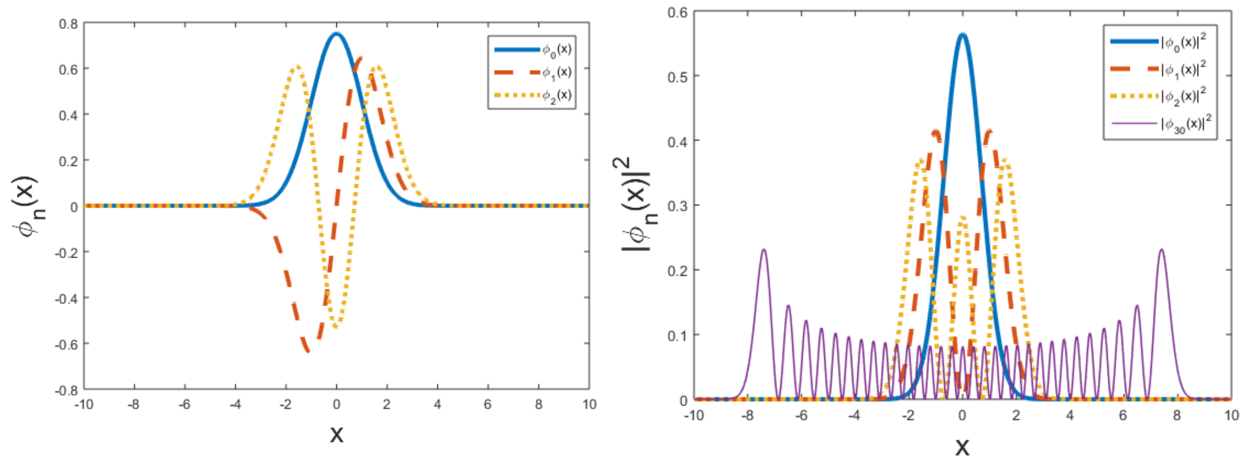

FIGURE 1 – Représentation des fonctions d'onde et densités de probabilité de présence des 3 premiers états de l'oscillateur harmonique où $\frac{m\omega}{\hbar} = 1$

On effectue le calcul similaire pour le deuxième état excité et on trouve

$$\varphi_2(x) = \left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{1/4} \left[\frac{2m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right] e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

Ou sinon **de manière plus générale** on a

$$|\varphi_n\rangle = \frac{\left(\hat{a}^\dagger\right)^n}{\sqrt{n!}} |\varphi_0\rangle \Rightarrow \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx}\right]^n \varphi_0(x)$$
$$\Leftrightarrow \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

où $H_n(X)e^{-\frac{X^2}{2}} = \left(X - \frac{d}{dX}\right)^n e^{-\frac{X^2}{2}}$ [$H_n(X)$ = polynômes d'Hermite sous la forme dite "physique"].

13/ L'allure des 3 premières fonctions d'onde est représentée en Fig. C..

D. Retour au hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$

14/ On a $\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)$ et $\hat{P} = -\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\hat{a} - \hat{a}^\dagger\right)$.

• $\langle \hat{x} \rangle = \langle \varphi_n | \, \hat{x} \, | \varphi_n \rangle$

$$\begin{aligned}
&\langle \hat{x} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \, \langle \varphi_n | \, \hat{X} \, | \varphi_n \rangle \\
\Leftrightarrow \; &\langle \hat{x} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \, \langle \varphi_n | \, \hat{a} + \hat{a}^\dagger \, | \varphi_n \rangle \\
\Leftrightarrow \; &\langle \hat{x} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\langle \varphi_n | \, \hat{a} \, | \varphi_n \rangle + \langle \varphi_n | \, \hat{a}^\dagger \, | \varphi_n \rangle \right] \\
\Leftrightarrow \; &\langle \hat{x} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n} \, \langle \varphi_n | \varphi_{n-1} \rangle + \sqrt{n+1} \, \langle \varphi_n | \varphi_{n+1} \rangle \right] \\
\Leftrightarrow \; &\langle \hat{x} \rangle = 0
\end{aligned}$$

• $\langle \hat{p} \rangle = \langle \varphi_n | \, \hat{p} \, | \varphi_n \rangle$

$$\begin{aligned}
&\langle \hat{p} \rangle = \sqrt{m\hbar\omega} \, \langle \varphi_n | \, \hat{P} \, | \varphi_n \rangle \\
\Leftrightarrow \; &\langle \hat{p} \rangle = i\sqrt{m\hbar\omega} \, \langle \varphi_n | \, \hat{a} - \hat{a}^\dagger \, | \varphi_n \rangle \\
\Leftrightarrow \; &\langle \hat{p} \rangle = i\sqrt{m\hbar\omega} \left[\langle \varphi_n | \, \hat{a} \, | \varphi_n \rangle - \langle \varphi_n | \, \hat{a}^\dagger \, | \varphi_n \rangle \right] \\
\Leftrightarrow \; &\langle \hat{p} \rangle = i\sqrt{m\hbar\omega} \left[\sqrt{n} \, \langle \varphi_n | \varphi_{n-1} \rangle - \sqrt{n+1} \, \langle \varphi_n | \varphi_{n+1} \rangle \right] \\
\Leftrightarrow \; &\langle \hat{p} \rangle = 0
\end{aligned}$$

• $\langle \hat{x}^2 \rangle = \langle \varphi_n | \, \hat{x}^2 \, | \varphi_n \rangle$

$$\begin{aligned}
&\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \, \langle \varphi_n | \, \hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} \, | \varphi_n \rangle \\
\Leftrightarrow \; &\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\langle \varphi_n | \, \hat{a}\hat{a}^\dagger \, | \varphi_n \rangle + \langle \varphi_n | \, \hat{a}^\dagger \hat{a} \, | \varphi_n \rangle \right] \\
\Leftrightarrow \; &\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\langle \varphi_n | \, \hat{N} + 1 \, | \varphi_n \rangle + \langle \varphi_n | \, \hat{N} \, | \varphi_n \rangle \right] \\
\Leftrightarrow \; &\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \, (2n+1) \\
\Leftrightarrow \; &\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)
\end{aligned}$$

On a donc $\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)}$.

• $\langle \hat{p}^2 \rangle = \langle \varphi_n | \hat{p}^2 | \varphi_n \rangle$

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}^2 \rangle &= -\frac{m\hbar\omega}{2} \left[- \langle \varphi_n | \hat{a}\hat{a}^\dagger | \varphi_n \rangle - \langle \varphi_n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \varphi_n \rangle \right] \\ \Leftrightarrow \langle \hat{p}^2 \rangle &= \frac{m\hbar\omega}{2} \left[\langle \varphi_n | \hat{N} + 1 | \varphi_n \rangle + \langle \varphi_n | \hat{N} | \varphi_n \rangle \right] \\ \Leftrightarrow \langle \hat{p}^2 \rangle &= \frac{m\hbar\omega}{2} (2n+1) \\ \Leftrightarrow \langle \hat{p}^2 \rangle &= m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

On a donc $\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2} = \sqrt{m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)}$.

• On a alors $\Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)} \sqrt{m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)} = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \geq \frac{\hbar}{2}$

Pour l'état fondamental $n = 0$, on retrouve ici le principe d'incertitude d'Heisenberg (voir plus haut)

• $\langle E_c \rangle = \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{2m} = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{E_n}{2}$

• $\langle E_p \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{E_n}{2}$

Les valeurs moyennes des énergies cinétique et potentielle sont les mêmes que dans le cas classique, soit $E_{tot}/2$.

De plus si l'on reprend les résultats obtenus en question **11/** ,**12/** et **13/** et que l'on trace les probabilités de présence on a

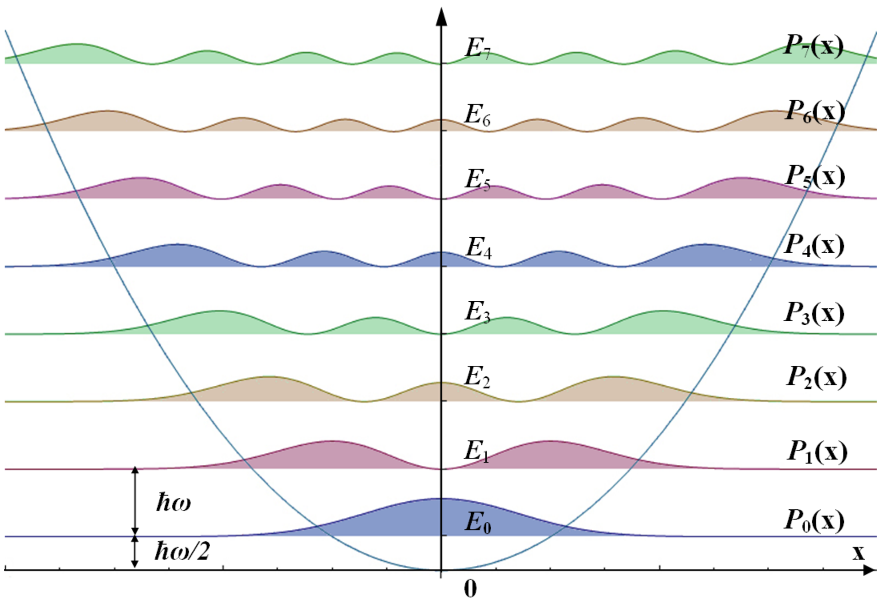

FIGURE 2 – Représentation des probabilités de présence de la particule pour les différents niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique (Tiré de Wikipedia)

Commentaire sur la Fig. 2 :

Aspect quantique :

- noeuds dans la probabilité de présence de la particule (n nœuds pour l'état φ_n).

- état fondamental étalé.

- Probabilité non nulle pour la particule d'osciller en dehors des limites classiques (zones énergétiques interdites classiquement $\rightarrow$ impulsion imaginaire)

- $E_0 \neq 0$, niveaux d'énergie quantifiés et équidistants ($\Delta E = \hbar\omega$)

Aspect classique :

- Probabilité de présence plus importante sur les bords.

- Plus grande fréquence spatiale au centre, donc plus grande impulsion

15/ D'après le théorème d'Ehrenfest, pour un état stationnaire, on a :

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{x},\hat{\mathcal{H}}\right]\right\rangle + \cancel{\left\langle\frac{\partial\hat{x}}{\partial t}\right\rangle}$$

or

$$\begin{aligned}
\left[\hat{x},\hat{\mathcal{H}}\right] &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\hbar\omega}{2}\left[\hat{X},\hat{X}^2+\hat{P}^2\right] \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\hbar\omega}{2}\left\{\cancel{\left[\hat{X},\hat{X}^2\right]}+\left[\hat{X},\hat{P}^2\right]\right\} \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\hbar\omega}{2}\left\{\hat{P}\left[\hat{X},\hat{P}\right]+\left[\hat{X},\hat{P}\right]\hat{P}\right\} \\
&= i\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\hbar\omega\hat{P} \\
&= \frac{i\hbar}{m}\hat{p}
\end{aligned}$$

On a donc $\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}$. De la même manière on trouve $\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = -m\omega^2\langle\hat{x}\rangle$. On a donc

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} &= \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m} \\
\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} &= -m\omega^2\langle\hat{x}\rangle
\end{aligned}$$

soit

$$\begin{aligned}
\langle\hat{x}\rangle(t) &= \langle\hat{x}\rangle(0)\cos\omega t + \frac{\langle\hat{p}\rangle(0)}{m\omega}\sin\omega t \\
\langle\hat{p}\rangle(t) &= \langle\hat{p}\rangle(0)\cos\omega t - m\omega\langle\hat{p}\rangle(0)\sin\omega t
\end{aligned}$$

$\langle\hat{x}\rangle(t)$ et $\langle\hat{p}\rangle(t)$ sont fonctions sinusoïdales du temps, comme l'oscillateur harmonique classique.

Autre méthode :

Considérons un oscillateur harmonique dans un état $|\Phi\rangle$ quelconque. On peut écrire :

$$|\Phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |\varphi_n\rangle$$

D'une façon générale, $|\Phi\rangle$ évoluera au cours du temps. En particulier, si à $t = 0$

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

on aura

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

On a alors par exemple :

$$\langle \hat{x}\rangle(t) = \langle \Phi(t)| \hat{x} |\Phi(t)\rangle = \sum_m \sum_n c_m^*(0) c_n(0) x_{mn} e^{i(m-n)\omega t}$$

avec $x_{mn} = \langle \varphi_m| \hat{x} |\varphi_n\rangle$. Mais $x_{mn} \neq 0 \Rightarrow m = n \pm 1 \Rightarrow m - n = \pm 1 \Rightarrow$ la somme ne comprend que des termes en $e^{\pm i\omega t} \Rightarrow \langle \hat{x}\rangle(t) = Ae^{i\omega t} + Be^{-i\omega t} = C\cos(\omega t + \varphi)$.

$\langle \hat{x}\rangle(t)$ est fonction sinusoïdale du temps, comme l'oscillateur harmonique classique. De même pour $\langle \hat{p}\rangle(t)$.