TD#1 : Oscillateur harmonique quantique

En physique quantique, le comportement d'une particule piégée, est entièrement décrit par l'équation de Schrodinger où l'hamiltonien ne comporte que 2 termes :

— un terme d'energie cinétique : $\frac{\hat{p}^2}{2m}$

— un terme d'énergie potentielle : $V(\hat{r})$

Lorsque le potentiel de piégeage est suffisamment "lisse" ($C^{(2)}$), et que les particules ont une énergie suffisamment faible (i.e. n'explorent que le fond du piège), on peut se limiter au développement de Taylor à l'ordre 2 du potentiel. Cela revient à considérer le potentiel comme quadratique en position. Dans le cadre de ce TD, nous chercherons à déterminer les propriétés d'un tel hamiltonien restreint à 1D et en particulier l'ensemble de ses valeurs propres et vecteurs propres. Cet hamiltonien est très utilisé en physique quantique. Il gouverne en particulier le comportement des systèmes expérimentaux de piégeage d'atomes ou d'ions dans le vide, mais également le "piégeage" de photons dans une cavité optique.

A une dimension, l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique de masse m et de fréquence angulaire ω s'écrit

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

où $\hat{x}$ et $\hat{p}$ sont les observables position et impulsion de la particule respectivement. Cet hamiltonien est l'observable représentant l'énergie du système dont on cherche à étudier les propriétés.

A. Mise en forme

On introduit les observables suivantes :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} \quad \text{et} \quad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{p}$$

On définit l'opérateur annihilation $\hat{a}$ par

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\hat{P}\right)$$

1*/ Déterminer la dimension physique des nouveaux opérateurs.

2*/ Calculer les commutateurs $[\hat{x}, \hat{p}]$, $[\hat{X}, \hat{P}]$ et $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]$ où $\hat{a}^\dagger$ est l'opérateur création obtenu par conjugaison hermitique de $\hat{a}$. Les opérateurs création et annihilation sont-ils des observables ?

3*/ Établir l'expression de $\hat{\mathcal{H}}$ en fonction des opérateurs création et annihilation. En déduire une expression du hamiltonien ne faisant intervenir que l'opérateur nombre $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$. L'opérateur nombre est-il hermitien ?

4*/ Calculer $\left[\hat{N}, \hat{a}\right]$ et $\left[\hat{N}, \hat{a}^\dagger\right]$.

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

Soit $|\varphi_n\rangle$ un état propre normé de $\hat{N}$ associé à la valeur propre n :

$$\hat{N} |\varphi_n\rangle = n |\varphi_n\rangle$$

5/ Montrer que le produit scalaire $\langle\varphi_n| \hat{N} |\varphi_n\rangle$ est égal au carré de la norme d'un vecteur que l'on déterminera. En déduire que les valeurs propres de $\hat{N}$ sont positives.

6/ En utilisant les résultats de la question **4/**, montrer que $\hat{a} |\varphi_n\rangle$ est vecteur propre de $\hat{N}$ avec la valeur propre $(n-1)$. De la même façon, montrer que $\hat{a}^\dagger |\varphi_n\rangle$ est vecteur propre de $\hat{N}$ avec la valeur propre $(n+1)$.

7/ Montrer que $n \in \mathbb{N}$. En déduire la valeur de l'énergie E_n d'un état stationnaire.

Chaque vecteur propre $|\varphi_n\rangle$ peut être défini à partir du ket précédent de la suite par la relation : $|\varphi_n\rangle = c_n \hat{a}^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle$.

8/ Déterminer le coefficient c_n, réel et positif. Exprimer $\hat{a}^\dagger |\varphi_n\rangle$ et $\hat{a} |\varphi_n\rangle$ en fonction respectivement de $|\varphi_{n+1}\rangle$ et $|\varphi_{n-1}\rangle$.

9/ Exprimer $|\varphi_n\rangle$ en fonction de $|\varphi_0\rangle$ et de l'opérateur création $\hat{a}^\dagger$.

C. Fonctions d'onde

Soient $|\varphi_0\rangle$, $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ les 3 premiers états propres (état fondamental, premier état excité et deuxième état excité) de $\hat{\mathcal{H}}$. $\varphi_0(x)$,$\varphi_1(x)$ et $\varphi_2(x)$ sont les fonctions d'onde correspondantes.

10/ Quelle relation permet de passer de $|\varphi_n\rangle$ à $\varphi_n(x)$?

11/ Appliquer l'opérateur annihilation $\hat{a}$ à l'état propre $|\varphi_0\rangle$. En déduire l'énergie E_0 et la fonction d'onde $\varphi_0(x)$ associées au niveau fondamental. Commenter.

12/ A partir des résultats de la question précédente, calculer l'énergie E_1 et la fonction d'onde $\varphi_1(x)$ associées au premier niveau excité. Même question pour le second état excité.

13/ Tracer l'allure des 3 fonctions d'onde $\varphi_0(x)$,$\varphi_1(x)$ et $\varphi_2(x)$.

Indication : $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$

D. Comparaison aux résultats classiques.

14/ Dans l'état propre $|\varphi_n\rangle$, calculer :

- les valeurs moyennes de $\hat{x}$ et $\hat{p}$,
- les incertitudes sur $\hat{x}$ et $\hat{p}$ ainsi que leur produit,
- la valeur moyenne de l'énergie cinétique de l'oscillateur,
- la valeur moyenne de son énergie potentielle.

Comparer ces résultats au cas de l'oscillateur harmonique classique.

15/ Dans un état quelconque de l'énergie, étudier l'évolution des valeurs moyennes de $\hat{x}$ et $\hat{p}$ (***indice :*** théorème d'Ehrenfest).