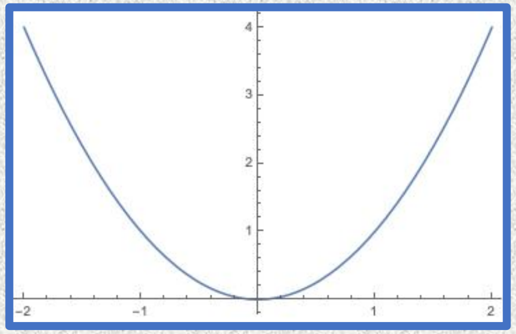
MQI: Cours 8

L'Oscillateur Harmonique (OH) en Mécanique Quantique

Rappel de Mécanique Classique (1)

Hamiltonien Particule 1D: $\mathrm{h} = \frac{1}{2m} p^2 + V(x)$

Potentiel Harmonique: $V(x) = \frac{1}{2}\, k\, x^2, k > 0$



On pose: $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \Leftrightarrow k = m\,\omega^2$

Les équations de Hamilton s'écrivent: $\begin{cases} \dot{x}(t) = \frac{\partial h}{\partial p} = \frac{p(t)}{m} \\ \dot{p}(t) = -\frac{\partial h}{\partial x} = -m\omega^2\, x(t) \end{cases}$ ⇒ $\ddot{x}(t) = -\omega^2\, x(t)$

⇒ $x(t) = x_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t$ avec $x_0 = x(0)$ et $p_0 = p(0)$.

Remarque: cette méthode de résolution passe par une équation du second ordre, alors que les équations de Hamilton sont du premier ordre. Peut-on « résoudre » en conservant les équations du premier ordre? OUI (diapo suivante)

Rappel de Mécanique Classique (2)

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = \dfrac{p(t)}{m} \\ \dot{p}(t) = -m\omega^2\, x(t) \end{cases}$$

Définissons la quantité <u>complexe</u> $a(t) = x(t) + i\,\dfrac{p(t)}{m\,\omega}$

$$h = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 |a|^2$$

Alors: $\dot{a}(t) = \dot{x}(t) + i\,\dfrac{\dot{p}(t)}{m\,\omega} = \dfrac{p(t)}{m} - i\omega\, x(t) \Longrightarrow \dot{a}(t) = -i\omega\, a(t)$ ➡ $a(t) = a(0)e^{-i\omega\, t}$

Nous allons réutiliser cette « astuce » dans le cas quantique.

Rôle de l’OH en Physique

L’oscillateur harmonique joue un grand rôle en Physique classique comme quantique

✦ Un certain nombre de systèmes dynamiques « exacts » se réduisent à des oscillateurs harmoniques:
Exemple: le champ électromagnétique (équations de Maxwell)

✦ Beaucoup de systèmes étudiés aux alentours de leur minimum d’énergie peuvent être décrits par des oscillateurs harmoniques:

Si $V(x)$ a un minimum en x_0 alors $V(x_0 + h) \cong V(x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)h^2$.

Nombreuses Applications en Physique moléculaire et Physique du solide.

L'oscillateur Harmonique Quantique

Particule 1D: $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + V(\hat{Q})$

Avec $V(\hat{Q}) = \frac{1}{2} m\, \omega^2\, \hat{Q}^2$

$\Leftrightarrow\ \hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x)$

Espace des états $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$

Le potentiel $V(x)$ est confinant ($\lim_{x\to\pm\infty} V(x) = +\infty$) donc les énergies (valeurs propres de $\hat{H}$) sont « quantifiées » et les états propres sont « normalisables » ($\in L^2\ (\mathbb{R})$).

On va utiliser les notations de Dirac et un **raisonnement purement algébrique** pour trouver les valeurs propres et les états propres de $\hat{H}$ (pas de résolution d'équation différentielle).

Le pb aux Vals. Propres: changements d'opérateurs (1)

Trouver les E_n et $|\phi_n\rangle \in \mathcal{H}$ tels que $\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n\,|\phi_n\rangle$.

Méthode algébrique

✦ On a: $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + V(\hat{Q})$ avec $\left[\hat{Q},\hat{P}\right] = i\,\hbar\,Id_{\mathcal{H}}$ et $V\left(\hat{Q}\right) = \frac{1}{2}m\,\omega^2\,\hat{Q}^2$

✦ **Premier Changement d'opérateurs (opérateurs non-dimensionnés)**.
On pose:

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{Q} \text{ et } \hat{K} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{P}$$

$$\Rightarrow \quad \begin{cases} \hat{H} = \dfrac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{K}^2 + \hat{X}^2\right) \\ \left[\hat{X},\hat{K}\right] = i\,Id_{\mathcal{H}} \end{cases}$$

Le pb aux Vals. Propres: changements d'opérateurs (2)

$$\boxed{\begin{cases} \hat{H} = \dfrac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{K}^2 + \hat{X}^2\right) \\ \left[\hat{X}, \hat{K}\right] = i\, Id_{\mathcal{H}} \end{cases}}$$

✦ **Deuxième Changement d'opérateurs (opérateurs « de <u>création</u> » et « <u>d'annihilation</u> »).**

On pose:

annihilation ➡ $\hat{A} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\hat{K}\right)$ et $\hat{A}^{\dagger} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} - i\hat{K}\right)$ ⬅ création

<u>Conséquences:</u>

$$\boxed{\begin{cases} \hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{A}^{\dagger}\hat{A} + \dfrac{1}{2}\right) \\ \left[\hat{A}, \hat{A}^{\dagger}\right] = 1 \equiv Id_{\mathcal{H}} \end{cases}}$$

(Preuve diapo suivante)

Le pb aux Vals. Propres: changements d'opérateurs (3)

✦ **Preuve** de $\left[\hat{A}, \hat{A}^\dagger\right] = \ Id_{\mathcal{H}} \equiv 1$:

$$\left[\hat{A}, \hat{A}^\dagger\right] = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\widehat{K}\right), \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} - i\widehat{K}\right)\right] = -\mathrm{i}\left[\hat{X}, \widehat{K}\right] = Id_{\mathcal{H}} \equiv 1$$

✦ **Preuve** de $\widehat{H} = \hbar\omega\left(\hat{A}^\dagger\hat{A} + \frac{1}{2}\right)$:

$$\hat{A}^\dagger\hat{A} = \frac{1}{2}\left(\hat{X} - i\widehat{K}\right)\left(\hat{X} + i\widehat{K}\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{X}^2 + \widehat{K}^2 - i[\widehat{K}, \hat{X}]\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{X}^2 + \widehat{K}^2 - 1\right)$$

✦ **Remarque** (changement inverse):

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{A} + \hat{A}^\dagger\right) \text{ et } \hat{P} = (-i)\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(\hat{A} - \hat{A}^\dagger\right)$$

Le pb aux Vals Propres: résolution (lemme1)

A retenir

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \text{ avec } \hat{N} = \hat{A}^\dagger\hat{A} \text{ et } \left[\hat{A}, \hat{A}^\dagger\right] = 1$$

Question: Peut-on formellement déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres de $\hat{N}$?

OUI

Lemme1:

- Il existe un **unique** ket normalisé $|0\rangle \in \mathcal{H}$ tel que $\hat{A}|0\rangle = 0$. Dit autrement le noyau $Ker\ \hat{A}$ de l'opérateur $\hat{A}$ est de dimension 1.
- Il n'existe aucun ket (non-nul) $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ tel que $\hat{A}^\dagger|\psi\rangle = 0$

Preuve lemme1:

Comme $\hat{A} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{Q} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{P}$, si l'on note $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$, alors:

$$\hat{A}|0\rangle = 0 \Leftrightarrow \forall x, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\psi_0(x) + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\left(-i\hbar\frac{d\psi_0}{dx}\right) = 0 \Leftrightarrow \psi_0'(x) + \frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0(x) = 0$$

Le pb aux Vals Propres: résolution (lemme1)

Preuve lemme1 (suite et fin): $\psi_0'(x) + \frac{m\omega}{\hbar} x\psi_0(x) = 0 \Rightarrow \psi_0(x) = \mathrm{C}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$.

Normalisation: $\langle 0|0\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow \mathrm{C} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$ (et donc on vérifie $|0\rangle \in \mathcal{H}$).

Conclusion: Tous les ket $|\psi\rangle$ tels que $\hat{A}|\psi\rangle = 0$ sont de la forme $|\psi\rangle = \lambda|0\rangle$.

De même on montre que l'équation $\hat{A}^\dagger|\psi\rangle = 0$ a comme seules solutions les fonctions $\psi(x) = \mathrm{C}e^{\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$. Or $\psi \in L^2(\mathbb{R}) \Leftrightarrow C = 0$. Donc $\hat{A}^\dagger|\psi\rangle = 0 \Longrightarrow |\psi\rangle = 0$.

CQFD.

Le pb aux Vals Propres: résolution (lemme2)

Lemme 2:

- L'opérateur $\widehat{N} = \hat{A}^{\dagger}\hat{A}$ est hermitien **positif**, ses valeurs propres λ vérifient $\boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}$.
- L'opérateur $\widehat{N}$ vérifie les relations de commutation:

$$[\widehat{N}, \hat{A}] = -\hat{A} \text{ et } [\widehat{N}, \hat{A}^{\dagger}] = \hat{A}^{\dagger}$$

Preuve lemme 2:

- $\widehat{N}^{\dagger} = \left(\hat{A}^{\dagger}\hat{A}\right)^{\dagger} = \hat{A}^{\dagger}\left(\hat{A}^{\dagger}\right)^{\dagger} = \widehat{N}$ donc $\widehat{N}$ est hermitien. Dire que $\widehat{N}$ est positif c'est dire que $\forall\psi \in \mathcal{H}, \langle\psi|\widehat{N}|\psi\rangle \geq 0$. Or $\langle\psi|\widehat{N}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^{\dagger}\hat{A}|\psi\rangle = \left\|\hat{A}|\psi\rangle\right\|^{2} \geq 0$. Donc $\widehat{N}$ est positif.
- Si $\widehat{N}|\phi_{\lambda}\rangle = \lambda|\phi_{\lambda}\rangle$, $|\phi_{\lambda}\rangle$ normalisé, alors on obtient $\langle\phi_{\lambda}|\widehat{N}|\phi_{\lambda}\rangle = \lambda \geq 0.$
- $[\widehat{N}, \hat{A}] = [\hat{A}^{\dagger}\hat{A}, \hat{A}] = \hat{A}^{\dagger}[\hat{A}, \hat{A}] + [\hat{A}^{\dagger}, \hat{A}]\hat{A} = -\hat{A},$
- $[\widehat{N}, \hat{A}^{\dagger}] = [\hat{A}^{\dagger}\hat{A}, \hat{A}^{\dagger}] = \hat{A}^{\dagger}[\hat{A}, \hat{A}^{\dagger}] + [\hat{A}^{\dagger}, \hat{A}^{\dagger}]\hat{A} = \hat{A}^{\dagger}$

CQFD

Le pb aux Vals Propres: résolution (lemme3)

Lemme 3:
Si $|\phi_\lambda\rangle$ est vecteur propre normalisé de $\widehat{N}$ associé à la valeur propre λ:
(a) alors $\hat{A}^\dagger|\phi_\lambda\rangle$ est aussi vecteur propre (non-normalisé) associé à la valeur λ+1.
(b) alors, ou bien $\hat{A}\,|\phi_\lambda\rangle = 0$, ou bien $\hat{A}\,|\phi_\lambda\rangle$ est vecteur propre (non-normalisé) associé à la valeur propre $\lambda - 1$.

Preuve lemme3:
- Si $\widehat{N}\,|\phi_\lambda\rangle = \lambda|\phi_\lambda\rangle$, de $[\widehat{N}, \hat{A}^\dagger] = \hat{A}^\dagger$ on déduit $\widehat{N}\big(\hat{A}^\dagger|\phi_\lambda\rangle\big) - \hat{A}^\dagger\big(\widehat{N}\,|\phi_\lambda\rangle\big) = \hat{A}^\dagger|\phi_\lambda\rangle$, d'où:
$$\widehat{N}\big(\hat{A}^\dagger|\phi_\lambda\rangle\big) = (\lambda+1)\hat{A}^\dagger|\phi_\lambda\rangle$$
- Et $\hat{A}^\dagger|\phi_\lambda\rangle \neq 0$ d'après le lemme1, donc $\hat{A}^\dagger|\phi_\lambda\rangle$ est vecteur propre associé à $\lambda+1$.
- Si $\widehat{N}\,|\phi_\lambda\rangle = \lambda|\phi_\lambda\rangle$, de $[\widehat{N}, \hat{A}] = -\hat{A}$ on déduit $\widehat{N}\big(\hat{A}|\phi_\lambda\rangle\big) - \hat{A}\big(\widehat{N}\,|\phi_\lambda\rangle\big) = -\hat{A}|\phi_\lambda\rangle$, d'où:
$$\widehat{N}\big(\hat{A}|\phi_\lambda\rangle\big) = (\lambda-1)\hat{A}|\phi_\lambda\rangle$$
- Donc ou bien $\hat{A}|\phi_\lambda\rangle = 0$ et donc $|\phi_\lambda\rangle = |0\rangle$ (lemme1), ou bien $\hat{A}|\phi_\lambda\rangle \neq 0$ et donc $\hat{A}|\phi_\lambda\rangle$ est vecteur propre associé à $\lambda - 1$.

Le pb aux Vals Propres: résolution (théorème)

Théorème:

- L'opérateur $\widehat{N}$ a pour **valeurs propres** les $n \in \mathbb{N}$ (les nombres entiers),
- Ces valeurs propres sont non-dégénérées et sont associées aux vecteurs propres **normalisés** $|n\rangle$ définis par :

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{A}^{\dagger}\right)^{n}|0\rangle$$

Preuve théorème:

Remarque: j'admettrais la dernière étape (voir diapo suivante) pour « écourter » la démonstration.

(a) La **plus petite valeur propre** λ de $\widehat{N}$ est $\lambda = 0$ et elle est non-dégénérée. En effet: (i) on sait que $\lambda \geq 0$ (lemme2), (ii) il existe un unique $|0\rangle$ normé tel que $\hat{A}|0\rangle = 0$ et $\hat{A}^{\dagger}|\psi\rangle = 0 \Rightarrow |\psi\rangle = 0$ (lemme1). Donc $\widehat{N}|\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow \hat{A}^{\dagger}\left(\hat{A}|\psi\rangle\right) = 0 \Rightarrow \hat{A}|\psi\rangle = 0 \Rightarrow |\psi\rangle = C\,|0\rangle$. Donc $\lambda = 0$ est valeur propre non-dégénérée associée au vecteur propre normalisé $|0\rangle$.

(b) Démontrons <u>par récurrence</u> que les « $|n\rangle$ » sont des vecteurs propres normalisés de $\widehat{N}$ associés aux valeurs propres « $n \in \mathbb{N}$ ».

Le pb aux Vals Propres: résolution (théorème)

Preuve théorème (récurrence):

- La proposition est vraie pour $n = 0$,
- Supposons que $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{A}^{\dagger}\right)^{n}|0\rangle$ est **vecteur propre normalisé** de $\widehat{N}$ **pour la valeur propre $\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{n}$.**

  Alors d'après le lemme3, $\hat{A}^{\dagger}|n\rangle$ est vecteur propre de $\widehat{N}$ pour la valeur propre $\lambda = n + 1$.

  Or $\hat{A}^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}\ |n+1\rangle$, donc $|n+1\rangle$ est bien vecteur propre de $\widehat{N}$ pour $\lambda = n + 1$.
- **Il reste à montrer que $|\boldsymbol{n}+\mathbf{1}\rangle$ est normalisé**. On a déjà $|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{A}^{\dagger}|n\rangle$.

  Donc $\langle n+1|n+1\rangle = \frac{1}{n+1}\langle n|\hat{A}\hat{A}^{\dagger}|n\rangle$. Mais d'après $\left[\hat{A}, \hat{A}^{\dagger}\right] = 1$, on déduit $\hat{A}\hat{A}^{\dagger} = \widehat{N} + 1$.

  Et d'après l'hypothèse de récurrence $\widehat{N}|n\rangle = \mathrm{n}|n\rangle$ avec $|n\rangle$ normé,

  donc $\langle n+1|n+1\rangle = \frac{1}{n+1}\langle n|\widehat{N}+1|n\rangle = \frac{n+1}{n+1} = 1$.
- Pour compléter la démonstration, il faudrait montrer que tout état propre $|\phi_{\lambda}\rangle$ est nécessairement de la forme « $|n\rangle$ »: cela se fait grâce au lemme3, je laisse ce point de côté.

CQFD

Etats propres « en base x »

On cherche les $\boldsymbol{\psi_n(x) = \langle x|n\rangle}$ $= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left\langle x\middle|\left(\hat{A}^\dagger\right)^n\middle|0\right\rangle$

On connait l'expression de $\hat{A}^\dagger$ comme opérateur différentiel:

$$\hat{A}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{Q} - \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{P} \quad \Rightarrow \quad \left\langle x\middle|\hat{A}^\dagger\middle|\psi\right\rangle = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{\hbar}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\frac{d}{dx}\right)\langle x|\psi\rangle$$

D'où:

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{\hbar}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\frac{d}{dx}\right)^n \langle x|0\rangle$$

Et $\langle x|0\rangle$ est donné par la démonstration du lemme1 (diapo10):

$$\langle x|0\rangle = \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

L'OH quantique : résumé (1)

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \text{ avec } \hat{N} = \hat{A}^\dagger \hat{A} \text{ et } \left[\hat{A}, \hat{A}^\dagger\right] = 1$$

$$\hat{N}|n\rangle = n\,|n\rangle \text{ avec } n \in \mathbb{N} \text{ et } |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{A}^\dagger\right)^n|0\rangle$$

A retenir

Conclusion: Les énergies propres de $\hat{H}$ sont les $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ avec $n \in \mathbb{N}$ et les vecteurs propres sont les $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{A}^\dagger\right)^n|0\rangle$.

A retenir

Remarques sur le spectre:

1. Les niveaux d'énergie sont **équidistants** $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$ (propriété caractéristique du potentiel harmonique). La quantité $\hbar\omega$ est appelée « **le quantum d'énergie** ».
2. L'énergie de l'état fondamental $|0\rangle$ n'est pas $E = 0$ (c'est-à-dire le minimum du potentiel $V(x)$, comme en Mécanique Classique), mais $\boldsymbol{E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}}$. C'est ce que l'on nomme « **l'énergie de point zéro** », ou « **ZPE** » pour Zero Point Energy en anglais ⇒ Effet purement quantique.

L'OH quantique : résumé (2)

$$\hat{A}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \text{ et } \hat{A}^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

Remarques sur les opérateurs $\widehat{\boldsymbol{A}}$ et $\widehat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}$:

1. On appelle $\widehat{\boldsymbol{A}}$ « **opérateur d'annihilation** » car il fait passer de l'état $|n\rangle$ à $|n-1\rangle$: il « détruit un quantum »,
2. On appelle $\widehat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}$ « **opérateur de création** » car il fait passer de l'état $|n\rangle$ à $|n+1\rangle$: il « crée un quantum »,
3. En anglais les opérateurs $\widehat{\boldsymbol{A}}$ et $\widehat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}$ sont aussi appelés des « *Ladder operators* » (des « opérateurs d'échelle »): ils font « monter ou descendre une marche »: $n \mapsto n \pm 1$,
4. Beaucoup de « modèles quantiques » mettent en jeu des opérateurs de création et d'annihilation, et donc des oscillateurs harmoniques quantiques (voir diapo suivante).

L'OH quantique: conclusion (1)

<u>Le rôle de l'oscillateur harmonique quantique en MQ</u>:

1. La mise en évidence expérimentale du ZPE d'un « **demi-quantum** » ($E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$) a été obtenue très tôt (1925) par des expériences très astucieuses sur les **vibrations moléculaires** (« Isotopic effects in band spectra », Robert S. Mulliken, Phys. Rev. 25, <u>1925</u>).
2. Cette mise en évidence a « validé » la construction dite « **canonique** » des Hamiltoniens quantiques (et a falsifié d'autres méthodes comme la quantification de Bohr-Sommerfeld).
3. Le « ZPE » dans le cadre de la **quantification du champ EM** (ElectroMagnétique) conduit à la prédiction d'une **énergie du vide EM**: dans l'espace vide de photons, il demeure une énergie du champ EM (dit autrement, même en l'absence de photons, <u>le champ EM n'est pas nul</u> comme le laisserait penser une image classique).
4. H. Casimir prédit en 1948 que cette **énergie du vide EM** (si elle existe) **peut avoir des effets mesurables**: il s'agit de « l'effet Casimir ».
5. La première **validation expérimentale de l'effet Casimir** date de 1958: « Measurements of Attractive Forces Between Flat Plates », M. Sparnaay, Physica, 24, <u>1958</u>).

L’OH quantique : conclusion (2)

<u>Le rôle de l’oscillateur harmonique quantique en MQ</u> (suite et fin):

8. Le « **concept de photon** »: la « quantification du champ EM » fait apparaitre des « quanta d’énergie observables». Ces quanta donnent « un support théorique » au concept de particules élémentaires du champ EM que l’on appelle les « **photons** »,
9. Le « **concept de phonon** »: De manière similaire, la « **quantification des vibrations des atomes » dans les solides cristallins** donnent aussi des « quanta » que l’on identifie dans ce cas à des « quasi-particules »: ce sont les « **phonons** ».
10. Dans ces solides « **tout se passe comme** » s’il existait des « particules qui transmettent les vibrations » du réseau cristallin, d’où le qualificatif de « **quasi-particule** ».
11. Dans la théorie (quantique) des semi-conducteurs, le « passage d’électrons dans la bande de conduction », avec la « création de trous dans la bande de valence » se modélise encore par des opérateurs « de création et d’annihilation »….

FIN Oscillateur Harmonique 1D

L'Oscillateur Harmonique (OH) 3D

Espace des Etats 3D versus 1D (diapo1)

Espace des états $\mathcal{H}_{3D} = L^2(\mathbb{R}^3)$

Espace des états $\mathcal{H}_{1D} = L^2(\mathbb{R})$

Si $\{\phi_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ est une base orthonormée de $\mathcal{H}_{1D} = L^2(\mathbb{R})$ alors $\{\psi_{i,j,k}\}_{(i,j,k)\in\mathbb{N}^3}$ définies par:

$$\psi_{i,j,k}(\mathrm{x},\mathrm{y},\mathrm{z}) = \phi_i(x)\phi_j(y)\phi_k(z)$$

est une base orthonormée de $\mathcal{H}_{3D} = L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$\langle\psi_{i\prime,j\prime,k\prime}|\psi_{i,j,k}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi_{i\prime,j\prime,k\prime}(\mathrm{x},\mathrm{y},\mathrm{z})^* \, \psi_{i,j,k}(\mathrm{x},\mathrm{y},\mathrm{z})dxdydz = \langle\phi_{i\prime}|\phi_i\rangle\langle\phi_{j\prime}|\phi_j\rangle\langle\phi_{k\prime}|\phi_k\rangle$$

$$= \delta_{i'i}\delta_{j'j}\delta_{k'k}$$

Donc: $\mathcal{H}_{3D} = \mathcal{H}_{1D}\otimes\mathcal{H}_{1D}\otimes\mathcal{H}_{1D} \equiv \mathcal{H}_{1D,x}\otimes\mathcal{H}_{1D,y}\otimes\mathcal{H}_{1D,z}$

Ou $L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R})\otimes L^2(\mathbb{R})\otimes L^2(\mathbb{R})$

Espace des Etats 3D versus 1D (diapo2)

Opérateurs

Prenons sur $\mathcal{H}_{3D}$ l'opérateur vectoriel position $\left(\hat{Q}_i\right)_{i=1,2,3} = \left(\widehat{\mathbb{X}}, \widehat{\mathbb{Y}}, \widehat{\mathbb{Z}}\right)$:

$$\widehat{\mathbb{X}}\psi(x,y,z) = x\psi(x,y,z), \widehat{\mathbb{Y}}\psi(x,y,z) = y\psi(x,y,z), \ \widehat{\mathbb{Z}}\psi(x,y,z) = z\psi(x,y,z)$$

Si on considère $\mathcal{H}_{3D} = \mathcal{H}_{1D,x} \otimes \mathcal{H}_{1D,y} \otimes \mathcal{H}_{1D,z}$, alors:

$$\widehat{\mathbb{X}} = \hat{X} \otimes Id_{\mathcal{H}_{1D,y}} \otimes Id_{1D,z} \ \text{ avec } \ \hat{X}\phi(x) = x\phi(x), \text{ idem } \widehat{\mathbb{Y}} = Id_{\mathcal{H}_{1D,x}} \otimes \hat{Y} \otimes Id_{1D,z}$$

$$et \ \ \widehat{\mathbb{Z}} = Id_{\mathcal{H}_{1D,x}} \otimes Id_{\mathcal{H}_{1D,y}} \otimes \hat{Z}$$

- **Par abus de langage on confondra dans la suite les opérateurs $\widehat{\mathbb{X}}$ et $\boldsymbol{\hat{X}}$, $\widehat{\mathbb{Y}}$ et $\boldsymbol{\hat{Y}}$, $\widehat{\mathbb{Z}}$ et $\boldsymbol{\hat{Z}}$.**
- On fera de même pour tous les opérateurs agissant sur une seule variable (par exemple pour les composantes de l'opérateur impulsion).

L'Oscillateur Harmonique 3D (diapo1)

Hamiltonien Classique 3D: $\mathrm{h} = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 + V(\vec{x})$

Potentiel: $V(\vec{x}) = \frac{1}{2}\, k\, \vec{x}^2,\, k > 0$

On pose encore: $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \Leftrightarrow k = m\,\omega^2$

$h = h_x + h_y + h_z$ avec $h_i = \frac{1}{2m} p_i^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x_i^2$

h est la somme de 3 « OH » 1D

Hamiltonien Quantique: $\widehat{H} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{2m} \widehat{P}_i^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \widehat{Q}_i^2$ avec $[\widehat{Q}_j, \widehat{P}_k] = i\hbar\delta_{jk}\, Id_{\mathcal{H}}$

$\widehat{H} = \sum_{i=1}^{3} \widehat{H}_i$ avec $[\widehat{H}_j, \widehat{H}_k] = 0$ si $j \neq k$.

$\Leftrightarrow\ \widehat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi(\vec{x})$

Somme de 3 OH 1D quantiques agissant sur $\mathcal{H}_{3D} = \mathcal{H}_{1D,x} \otimes \mathcal{H}_{1D,y} \otimes \mathcal{H}_{1D,z}$

Espace des états $\mathcal{H}_{3D} = L^2(\mathbb{R}^3)$

L'oscillateur Harmonique 3D (diapo2)

L'étude des états propres et énergies propres de $\widehat{H}$ est donc très simple:

- Les énergies propres sont les $E_{n_x,n_y,n_z} = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z}$ avec $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, soit:

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \hbar\omega\left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right) \text{ avec } \left(n_x, n_y, n_z\right) \in \mathbb{N}^3$$

- Les états propres sont les $|n_x, n_y, n_z\rangle \in \mathcal{H}_{3D}$ tels que:

$$|n_x, n_y, n_z\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle \otimes |n_z\rangle$$

- Les « fonctions d'onde » $\psi_{n_x,n_y,n_z}(x, y, z)$ sont données par:

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(x, y, z) = \langle x, y, z | n_x, n_y, n_z\rangle = \langle x|n_x\rangle\langle y|n_y\rangle\langle z|n_z\rangle$$

- Dégénérescence d'un niveau d'énergie E_{n_x,n_y,n_z}: c'est le nombre g_N de triplets $\left(n_x, n_y, n_z\right) \in \mathbb{N}^3$ tels que $n_x + n_y + n_z = N$. On montre (pb de dénombrement) que:

$$g_N = \frac{(N+1)(N+2)}{2}$$

FIN COURS 8