

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 mécanique devient un opérateur hamiltonien se partageant là encore en une partie potentielle et une partie cinétique.

A. Mise en forme

La détermination des valeurs et vecteurs propres de l'Hamiltonien se fait ici de manière algébrique i.e par la manipulation d'opérateurs et non par la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps. L'avantage de cette méthode est qu'elle est généralisable dans plein d'autres situations, notamment la quantification du champ électromagnétique. Le point de départ étant de réécrire l'Hamiltonien du système en fonction des opérateurs de création et d'annihilation $\hat{a}^\dagger$ et $\hat{a}$:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2\right) \quad \text{avec} \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = 1$$

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

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

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

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

Ainsi, par récurrence on montre que

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

C. Comparaison aux résultats classiques

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

- $\langle \hat{x} \rangle = \langle \varphi_n | \hat{x} | \varphi_n \rangle$

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

L'égalité $\langle \hat{x} \rangle = 0$ signifie que, lorsque la particule est dans un état propre, sa position est nulle en moyenne ; contrairement au cas classique où elle oscille à la fréquence ω du piège.

- $\langle \hat{p} \rangle = \langle \varphi_n | \hat{p} | \varphi_n \rangle$

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

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

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

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

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

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

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

On retrouve que les relations d'indétermination de Heisenberg sont bien vérifiées avec égalité pour l'état fondamental $n = 0$. On dit que l'état fondamental $n = 0$ est un paquet d'onde gaussien.

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

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

11/ Ici, les valeurs moyennes des opérateurs $\hat{x}$ et $\hat{p}$ sont évaluées dans un état quelconque $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\varphi_n\rangle$ qui est une superposition des états propres $|\varphi_n\rangle$. Ainsi : $\langle \hat{x} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle$. D'après le théorème d'Ehrenfest, on a :

$$\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{\mathcal{H}}] \rangle + \cancel{\langle \frac{\partial \hat{x}}{\partial t} \rangle}$$

Pour calculer le commutateur $[\hat{x}, \hat{H}]$, on a deux méthodes :

— Méthode 1 : exprimer $\hat{x}\hat{p}$ en fonction de $\hat{p}\hat{x}$ grâce au commutateur $[\hat{x}, \hat{p}]$:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{H}] &= \frac{1}{2m} [\hat{x}, \hat{p}^2] \\ &= \frac{1}{2m} (\hat{x}\hat{p}^2 - \hat{p}^2\hat{x}) \\ &= \frac{1}{2m} (\hat{x}\hat{p}\hat{p} - \hat{p}\hat{p}\hat{x}) \\ &= \frac{1}{2m} ((\hat{p}\hat{x} + i\hbar)\hat{p} - \hat{p}\hat{p}\hat{x}) \\ &= \frac{1}{2m} (\hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] + i\hbar\hat{p}) \\ &= \frac{i\hbar}{m} \hat{p} \end{aligned}$$

— Méthode 2 : utiliser la relation $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$, ce qui donne :

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

On a donc $\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m}$. De la même manière on trouve $\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = -m\omega^2 \langle \hat{x} \rangle$. En dérivant la première équation, et en y injectant la deuxième, on retrouve l'équation différentielle d'un oscillateur harmonique classique :

$$\frac{d^2 \langle \hat{x} \rangle}{dt^2} + \omega^2 \langle \hat{x} \rangle = 0$$

dont la solution est :

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

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

Autre méthode pour calculer les valeurs moyennes :

Reprenons l'état quelconque $|\psi\rangle$ défini plus haut :

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

A $t = 0$ on a :

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

Comme les $|\varphi_n\rangle$ sont les états propres de l'Hamiltonien, on a :

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

Ainsi :

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

où $x_{mn} = \langle \varphi_m | \hat{x} | \varphi_n \rangle$. Un calcul similaire à celui effectué à la question **10** donne :

$$\langle \varphi_m | \hat{x} | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n} \langle \varphi_m | \varphi_{n-1} \rangle + \sqrt{n+1} \langle \varphi_m | \varphi_{n+1} \rangle \right]$$

Il est alors clair que $x_{mn} \neq 0 \Rightarrow m = n \pm 1 \Rightarrow m - n = \pm 1 \Rightarrow$ 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 $\langle \hat{p} \rangle (t)$.

D. Fonctions d'onde

12/ 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).

13/ D'après l'expression générale de E_n (question **7/**), on sait que l'état fondamental possède une énergie $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$: énergie du point zéro.

On a $\hat{a} |\varphi_0\rangle = 0$ (voir question **8/**). Pour déterminer la fonction d'onde $\varphi_0(x)$ il faut projeter cette relation sur la base $|x\rangle$. Ainsi :

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{a}|\varphi_0\rangle &= 0 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \delta(x-x') [\hat{a}\varphi_0](x') &= 0 \\ [\hat{a}\varphi_0](x) &= 0\end{aligned}$$

où l'on a introduit la relation de fermeture $\hat{\mathbb{I}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle\langle x'|$ entre $\hat{a}$ et $\langle x|$ dans la première ligne. Dans la dernière égalité, $\hat{a}$ est exprimé dans la base $\{|x\rangle\}$ (voir **Rappel et compléments** plus bas). Comme $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ en représentation x alors :

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p} \quad \Rightarrow \quad \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}$$

on a donc :

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\varphi_0(x) + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\varphi_0'(x) &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{m\omega}{\hbar}x\varphi_0(x) + \varphi_0'(x) &= 0 \\ \Leftrightarrow \varphi_0'(x) &= -\frac{m\omega}{\hbar}x\varphi_0(x)\end{aligned}$$

Une manière équivalente de présenter les choses est la suivante :

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

On remarque facilement que la solution est de la forme $\varphi_0(x) = C \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$ où C est

une constante. Pour déterminer C on utilise la propriété de normalisation :

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

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

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 appelée 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" (voir Fig. 2).

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

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

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 résulte dans l'équation précédente on obtient

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

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

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

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

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

$$\Leftrightarrow \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

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

15/ L'allure des 3 premières fonctions d'onde est représentée en Fig. 1. Les densités de probabilité de présence sont représentées sur la Fig. 2.

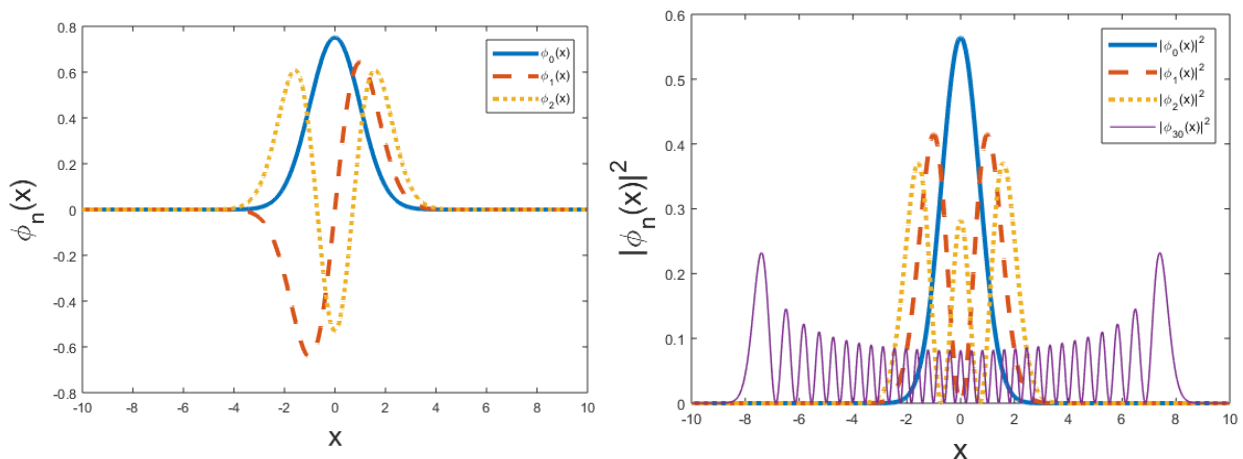


FIGURE 1 – Représentation des fonctions d'onde et densités de probabilité de présence des 3 premiers états de l'oscillateur harmonique où $\frac{m\omega}{\hbar} = 1$

Commentaire sur la Fig. 2 :

Aspect quantique :

- nœuds 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 ($\Delta E = \hbar\omega$)

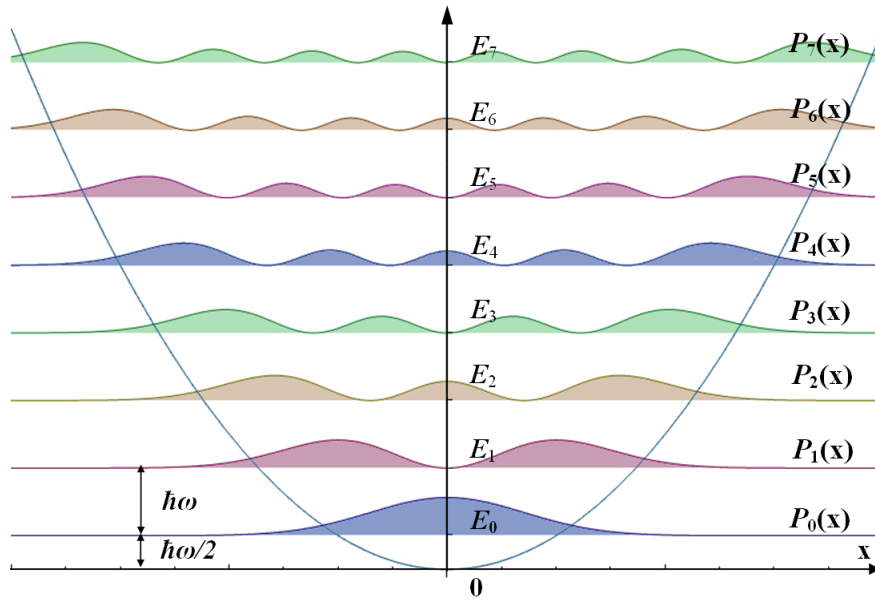


FIGURE 2 – Représentation des probabilités de présence de la particule pour les différents niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique (Tiré de Wikipedia)

Aspect classique :

- Probabilité de présence plus importante sur les bords.
- Plus grande fréquence spatiale au centre, donc plus grande impulsion

16/ Rappelons d'abord le lien entre la valeur moyenne, évaluée dans un état $|\psi\rangle$, d'une observable $\hat{A}$ et la fonction d'onde $\psi(x, t)$. Par définition : $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$. En introduisant la relation de fermeture entre $\hat{A}$ et $\langle \psi(t) |$, on a dans la représentation position :

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) [\hat{A} \psi](x, t) dx$$

En particulier, pour l'opérateur position on a :

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x, t)|^2 dx$$

et, à titre d'exemple, pour l'opérateur impulsion :

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(x, t)}{dx} dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \frac{d\psi(x, t)}{dx} dx$$

Pour l'état $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_0\rangle + |\varphi_1\rangle)$ on a à l'instant t :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_0\rangle e^{-iE_0t/\hbar} + |\varphi_1\rangle e^{-iE_1t/\hbar})$$

Ce qui donne :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_0(x) e^{-iE_0 t/\hbar} + \varphi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} \right)$$

La densité de probabilité de présence correspondante s'écrit alors :

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= \psi^*(x, t) \psi(x, t) \\ &= \frac{|\varphi_0(x)|^2 + |\varphi_1(x)|^2}{2} + \operatorname{Re} \left(\varphi_0^*(x) \varphi_1(x) \exp \left(-i \frac{E_1 - E_0}{\hbar} t \right) \right) \\ &= \frac{|\varphi_0(x)|^2 + |\varphi_1(x)|^2}{2} + \varphi_0(x) \varphi_1(x) \cos(\omega t) \end{aligned}$$

Au final, on obtient :

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle(t) &= \frac{1}{2} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} x |\varphi_0(x)|^2 dx}_{=0} + \frac{1}{2} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} x |\varphi_1(x)|^2 dx}_{=0} + \cos(\omega t) \int_{-\infty}^{+\infty} x \varphi_0(x) \varphi_1(x) dx \\ \langle \hat{x} \rangle(t) &= \left(\frac{\pi}{4} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \cos(\omega t) \end{aligned}$$

On retrouve le résultat de la question **10** : $\langle \hat{x} \rangle(t)$ est fonction sinusoïdale du temps, comme l'oscillateur harmonique classique, lorsque l'état de la particule est une superposition d'états propres.

Pour l'état $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_n\rangle + |\varphi_m\rangle)$ on a à l'instant t :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\varphi_n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} + |\varphi_m\rangle e^{-iE_m t/\hbar} \right)$$

Ainsi :

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle(t) &= \langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle \varphi_n | \hat{x} | \varphi_n \rangle + \frac{1}{2} \langle \varphi_m | \hat{x} | \varphi_m \rangle + \operatorname{Re} \left(\langle \varphi_m | \hat{x} | \varphi_n \rangle e^{i(m-n)\omega t} \right) \\ &= \operatorname{Re} \left(\langle \varphi_m | \hat{x} | \varphi_n \rangle e^{i(m-n)\omega t} \right) \end{aligned}$$

or nous avons vu à la question **10** que $\langle \varphi_m | \hat{x} | \varphi_n \rangle$ est non nul si et seulement si $m - n = \pm 1$. Il est clair que toute superposition d'états n'induit pas des oscillations de la position au cours du temps. C'est en particulier le cas de l'état $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_0\rangle + |\varphi_2\rangle)$.

17/ Pour l'état $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_0\rangle + e^{i\theta} |\varphi_1\rangle)$, un calcul similaire à celui de la question précédente donne :

$$\langle \hat{x} \rangle(t) = \left(\frac{\pi}{4} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \cos(\omega t + \theta)$$

Un déphasage (quantique) entre les deux états de la superposition se traduit par une phase à l'origine dans $\langle \hat{x} \rangle (t)$.

Rappel et compléments

Quelques propriétés des opérateurs $\hat{x}$ et $\hat{p}$

Les opérateurs position $\hat{x}$ et impulsion $\hat{p}$ sont deux opérateurs hermitiens. La base des états propres de $\hat{x}$ est $\{|x\rangle\}$, tandis que celle de $\hat{p}$ est $\{|p\rangle\}$:

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle \quad \text{et} \quad \hat{p} |p\rangle = p |p\rangle$$

Quelques propriétés de $\hat{x}$ et de $\{|x\rangle\}$:

- La base $\{|x\rangle\}$ est orthonormée : $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$
- Les éléments de la matrice de $\hat{x}$: $\langle x'|\hat{x}|x\rangle = x \delta(x - x')$
- Pour un état $|\psi\rangle$ quelconque : $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$
- Le produit scalaire de deux états quelconques : $\langle \psi|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \phi(x)$
- La relation de fermeture : $\hat{\mathbb{I}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle \langle x'|$

Quelques propriétés de $\hat{p}$ et de $\{|p\rangle\}$:

- Changement de base : $\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right)$. Les états $|p\rangle$ sont appelés ondes planes.
- Les éléments de la matrice de $\hat{p}$: $\langle x'|\hat{p}|x\rangle = -i\hbar\delta'(x - x')$ où δ' est la fonction dérivée du delta du Dirac δ ;
- Pour un état $|\psi\rangle$ quelconque : $\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}$. Ainsi, on écrit souvent de manière abusive : $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ en représentation x ;
- Pour un état $|\psi\rangle$ quelconque : $\psi(p) = \langle p|\psi\rangle$
- La relation de fermeture : $\hat{\mathbb{I}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dp' |p'\rangle \langle p'|$

Fonction d'un opérateur

Soit $\hat{B}$ un opérateur hermitien. Soit f une fonction que l'on suppose développable en série entière (comme la fonction exponentielle par exemple) : $f(z) = \sum_n f_n z^n$. La fonction d'opérateur $f(\hat{B})$ est alors définie par :

$$f(\hat{B}) = \sum_n f_n \hat{B}^n$$

Ainsi, si $|b\rangle$ est un vecteur propre de $\hat{B}$ associé à la valeur propre b alors :

$$\hat{B} |b\rangle = b |b\rangle \Rightarrow f(\hat{B}) |b\rangle = f(b) |b\rangle$$

C'est cette dernière propriété qui est utile et souvent utilisée. Un exemple important, en plus des opérateurs de création et d'annihilation vus plus haut, est celui de l'opérateur énergie potentielle $V(\hat{x})$. Comme $\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle$, on a :

$$V(\hat{x}) |x\rangle = V(x) |x\rangle$$

$$\langle x' | V(\hat{x}) |x\rangle = V(x) \delta(x - x')$$

$$\langle x | V(\hat{x}) | \psi \rangle = V(x) \psi(x)$$