MECANIQUE QUANTIQUE
Chapitre 6 :
Oscillateur Harmonique Quantique

Pr. M. ABD-LEFDIL
Université Mohammed V- Agdal
Faculté des Sciences
Département de Physique
Année universitaire 06-07
Filières SM-SMI

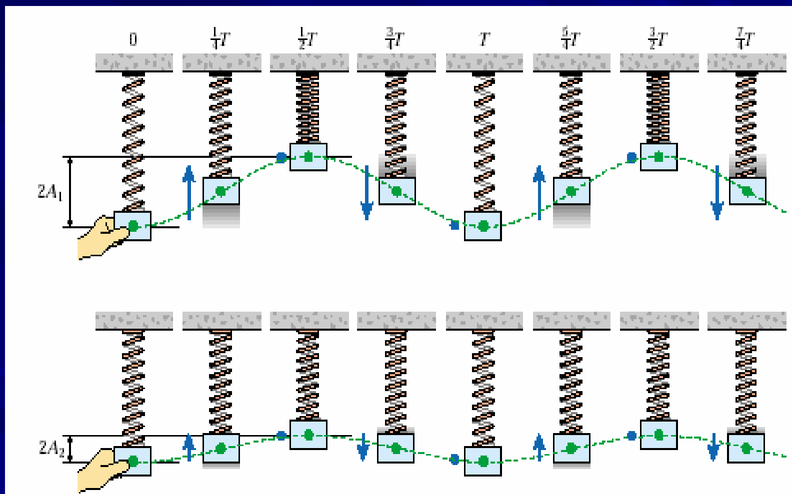
Introduction

L'oscillateur harmonique classique a été étudié de manière détaillée en S.1 où l'énergie mécanique du système s'écrivait comme :

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}Kx^2 \qquad (1)$$

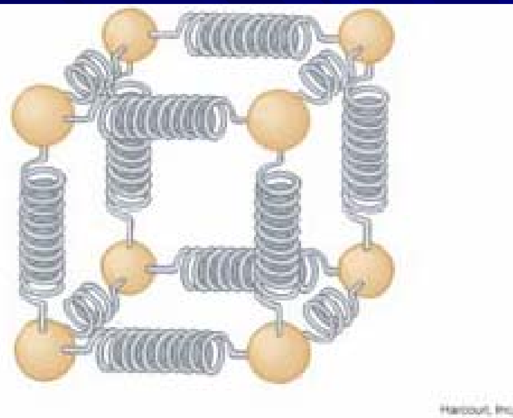
m étant la masse du point matériel (ou particule), ω sa pulsation, x son déplacement par rapport à la position d'équilibre et p_x sa quantité du mouvement.

Exemple: masse accrochée à un ressort.



Dans ce chapitre, on se propose de faire une étude quantique de l'oscillateur harmonique.

Exemple O. H. Q. :
Vibrations des atomes dans les solides.
Imaginons un système que l'on écarte légèrement de sa position d'équilibre, par exemple une molécule diatomique d'acide chlorhydrique HCl.
Si l'on éloigne les atomes de H et Cl, une force de rappel va essayer de remettre la molécule dans la position d'équilibre.



c'est une façon schématique de représnter les liaisons chimiques dans un matériau. les atomes sont liés entre eux par des ressorts et qui oscillent autour de leur position d'équilibre.

Dans ce cas, les grandeurs classiques x et p_x sont remplacées respectivement par les observables X et P_x (principe de correspondance).

Rappelons que X et P_x sont deux observables qui ne commutent pas (Chapitre n° 2):

$$\boxed{[X, P_x] = i\hbar} \quad (2)$$

Ainsi, l'opérateur hamiltonien du système est donné par :

$$\boxed{H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} K X^2} \quad (3)$$

On remarque que H est indépendant du temps: le système est stationnaire. Par conséquent, l'étude quantique de l'oscillateur harmonique se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres :

$$\boxed{H|\phi\rangle = E|\phi\rangle} \quad (4)$$

Dans la représentation {|x>} (base de Dirac):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\phi(x)=E\phi(x) \qquad (5)$$

Revenons à l'équation (3) et introduisons les opérateurs suivants:

$$\hat{X}=\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}X \qquad (6) \qquad \hat{P}_x=\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}P_x$$

On remarque que les observables $\hat{X}$ et $\hat{P}_x$ sont sans dimension et on a:

$$\left[\hat{X},\hat{P}_x\right]=i \qquad (7)$$

L'hamiltonien (3) devient:

$$H=\hbar\omega\,\hat{H} \qquad (8) \qquad \hat{H}=\frac{1}{2}\left[\hat{X}^2+\hat{P}_x^2\right]$$

- Le problème est donc de chercher les solutions de l'équation :

$$\hat{H}\left|\phi_n\right\rangle=\varepsilon_n\left|\phi_n\right\rangle \qquad (9)$$

où les valeurs propres ε_n sont sans dimension.

On définit deux opérateurs par:

$$a=\frac{\hat{X}+i\hat{P}}{\sqrt{2}} \qquad (10) \qquad a^+=\frac{\hat{X}-i\hat{P}}{\sqrt{2}}$$

On vérifie aisément que les deux opérateurs a^+ et a sont adjoints l'un de l'autre.

a^+ et a ne sont pas hermitiques.

Calculons a a⁺:

$$a^{+}a = \left[\frac{\hat{X} - i\hat{P}}{\sqrt{2}}\right]\left[\frac{\hat{X} + i\hat{P}}{\sqrt{2}}\right] = \frac{1}{2}\left(\hat{X}^{2} + \hat{P}_{x}^{2} + i\left[\hat{X},\hat{P}\right]\right)$$

$$\Leftrightarrow \qquad a^{+}a = \frac{1}{2}\left(\hat{X}^{2} + \hat{P}_{x}^{2} - 1\right)$$

En comparant avec l'expression **(8)**, on voit que :

$$\hat{H} = \mathbf{a}^{+}a + \frac{1}{2} \qquad (11)$$

On définit l'opérateur nombre de particules par : $N = a^{+}a$

N est hermitique car : $N^{+} = (a^{+}a)^{+} = (a)^{+} (a^{+})^{+} = a^{+}a = N$

$$\hat{H} = \mathbf{N} + \frac{1}{2} \qquad (12)$$

On montre facilement que :

$[a , a^{+}] = 1$; $[N , a] = - a$; $[N , a^{+}] = a^{+}$ **(13)**

$[N , a] = - a$, en effet:
$N a – a N = a^{+}a\, a - a\, a^{+}a = (a^{+}a - a\, a^{+})a = (-[a , a^{+}])\, a = - a$

$[N , a^{+}] = a^{+}$, en effet:
$Na^{+} – a^{+}N = a^{+}a\, a^{+} - a^{+}\, a^{+}a = a^{+}(aa^{+} - a^{+}a) = a^{+} [a , a^{+}] = a^{+}$

VECTEURS PROPRES ET VALEURS PROPRES DE N :

- Soit : $N|\phi_n\rangle = n|\phi_n\rangle$ (14)

$H = \hbar\omega \hat{H}$ (8)

D'où: $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$

$\hat{H} = \mathbf{N} + \frac{1}{2}$ (12)

Avec $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ (15)

Interprétations des opérateurs a+ et a :

- **i)** On a vu que: [N , a] = - a

$$[N,a]|\phi_n\rangle = -a|\phi_n\rangle$$

$\Leftrightarrow$

$$(Na - aN)|\phi_n\rangle = -a|\phi_n\rangle$$
$$N(a|\phi_n\rangle) = (n-1)(a|\phi_n\rangle)$$

Et $H(a|\phi_n\rangle) = (E_n - \hbar\omega)(a|\phi_n\rangle)$

L'application de l'opérateur a au $\mathbf{V_p}$ $|\Phi_n>$ fait **baisser** l'énergie d'une quantité $\hbar\omega$ qui est un quantum d'énergie. Pour cette raison:
a est appelé opérateur d'annihilation.

- **ii)** On a vu que: $[N , a^{+}] = a^{+}$.
  Comme dans i), on montre que:

$$H(a^{+}|\phi_n\rangle) = (E_n + \hbar\omega)(a^{+}|\phi_n\rangle)$$

L'application de l'opérateur a^{+} au **Vp** $|\Phi_n>$ fait **augmenter** l'énergie d'une quantité $\hbar\,\omega$ qui est un quantum d'énergie. Pour cette raison:
a^{+} est appelé opérateur de création.

LEMME : Les valeurs propres n de N sont des entiers naturels n. En effet:

La norme au carré de $a|\Phi_n>$ (qui est $\mathbf{V_p}$ de N et de H) est donnée par :

$$\langle\phi_n|a^{+}a|\phi_n\rangle = \langle\phi_n|N|\phi_n\rangle = n\langle\phi_n|\phi_n\rangle \geq \mathbf{0}$$

Donc:

$$n \geq \mathbf{0}$$

Supposons que n soit non entier. On montrera que ceci est en contradiction avec le lemme énoncé plus haut.

Soit p un entier supérieur ou égal à zéro tq:

$n - p > 0$ et $n-p-1 < 0$

On a la relation : **$N (a^p|\Phi_n >) = (n - p)\,(a^p|\Phi_n >)$** pour tout entier naturel p.

(**Relation facile à vérifier pour p= 0, 1, 2, ...**)

Démonstration:

$[N,a^p]=p\, a^{p-1}\,[N,a]$ (**T.D. n° 4 ex. 1**)

$\Leftrightarrow$ $N a^p - a^p N = p\, a^{p-1}\,(-a) = -\,p\, a^p$

$\Leftrightarrow$ $N a^p = (n-p)\; a^p$

Aussi: $N (a^{p+1}|\Phi_n >) = (n-p-1)\,(a^{p+1}|\Phi_n >)$

Or $n-p-1 < 0$ à cause de l'hypothèse de départ.

Si n n'est pas un entier, construire un vecteur propre non nul de N avec une valeur propre négative est en contradiction avec le lemme ci-dessus.

- **Cas particulier:**

$$\langle \phi_n | a^+ a | \phi_n \rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad n = \mathbf{0} \ \ \mathbf{et} \ \ a|\phi_0\rangle = 0$$

Multiplions a^+ par $a\,|\Phi_0> = 0$, on obtient :

$$a^+ a|\phi_0\rangle = N|\phi_0\rangle = 0|\phi_0\rangle$$

n=0: C'est l'état fondamental où: $E_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2}$

$$a|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\hat{P}\right)|\phi_0\rangle = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X + i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}P_x\right)|\phi_0\rangle = 0$$

En représentation {|x>} (Base de Dirac):

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\langle x|X|\phi_0\rangle + i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\langle x|P_x|\phi_0\rangle\right) = 0 \quad \Leftrightarrow$$

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\,\phi_0(x) + i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\phi_0(x)}{\partial x}\right) = 0$$

Multiplions par $\sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}$ on obtient :

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar}\,x\,\phi_0(x) + \frac{d\phi_0(x)}{dx}\right) = 0$$

Et

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp - \left(\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}\right)$$

- On montrera en T.D. que:

$$a|\phi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\phi_{n-1}\rangle$$

$$a^+|\phi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\phi_{n+1}\rangle$$

$$|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^+\right)^n|\phi_0\rangle$$

Dans la représentation {|x>} les $|\Phi_n>$ s'expriment par :

$$\langle x|\phi_n\rangle = \phi_n(x)$$

et

$$\langle x|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|\left(a^+\right)^n|\phi_0\rangle$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\,X - i\,\frac{P}{\sqrt{\hbar\,m\,\omega}}\right] \Leftrightarrow$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\,X - \sqrt{\frac{\hbar}{m\,\omega}}\,\frac{\partial}{\partial x}\right]$$

- Par conséquent:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]^n \phi_0(x)$$

- Comme:

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\,\omega}{\pi\,\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp - \left(\frac{m\,\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}\right)$$

Alors:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{m\omega}{\hbar} x - \frac{d}{dx} \right]^n e^{\frac{-m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-\alpha^2}{2}x^2} H_n(\alpha x)$$

Avec:

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}$$

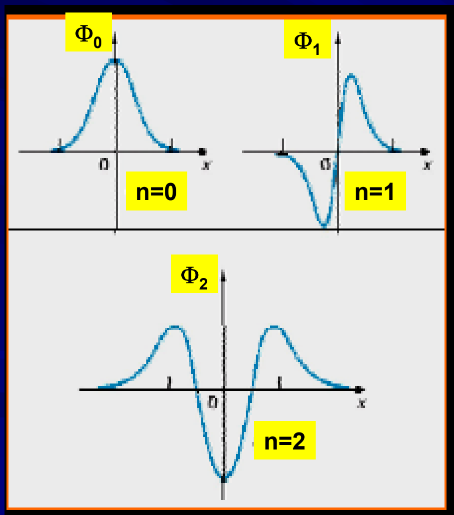
et

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x^2}\right)$$

$H_n(x)$ est le polynôme d'Hermite

$H_0(x) = 1$
$H_1(x) = 2x$
$H_2(x) = 4x^2 - 2$
$H_3(x) = 8x^3 - 12x$

Ci-dessous, nous présentons les fonctions d'ondes associées aux trois premiers niveaux de l'oscillateur harmonique en mécanique quantique (n = 0, 1, 2).



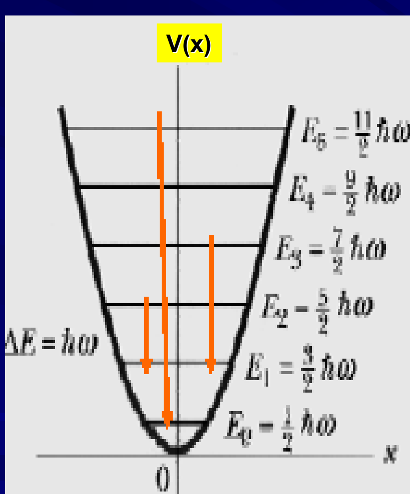
n= 0: état fondamental
n= 1: 1^er état excité
n= 2: 2^ème état excité

Le nombre de zéros dans Φ_n (x) est égal à n, en effet:

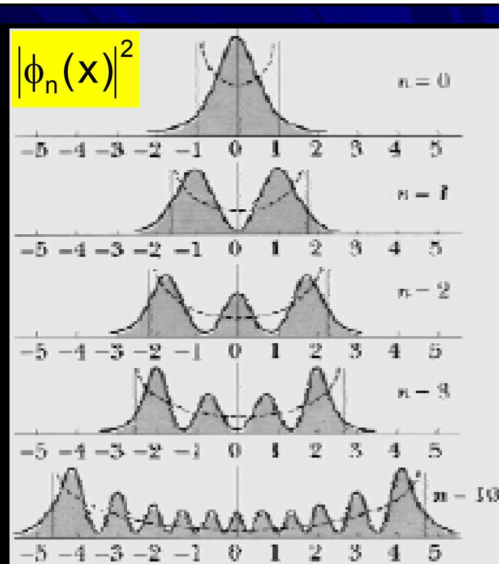
Φ_0 (x) ne s'annule jamais
Φ_1 (x) s'annule 1 fois
Φ_2 (x) s'annule 2 fois

Φ_p (x) s'annule p fois.

Etats excités dans l' O.H.Q.:



$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\,\omega$$



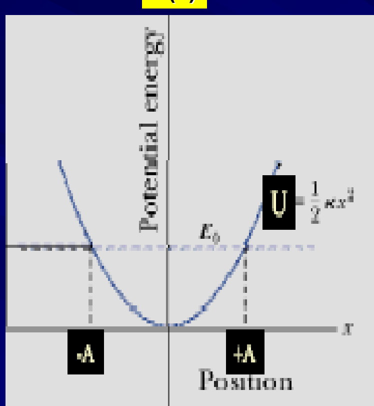
Quand n → ∞ probabilités classi. et quantique deviennent similaires

Remarques

i) L'intervalle dans lequel les Φ_n (x) prennent des valeurs appréciables augmente avec n. Ce qui correspond en mécanique classique à l'augmentation de l'amplitude avec l'énergie mécanique.

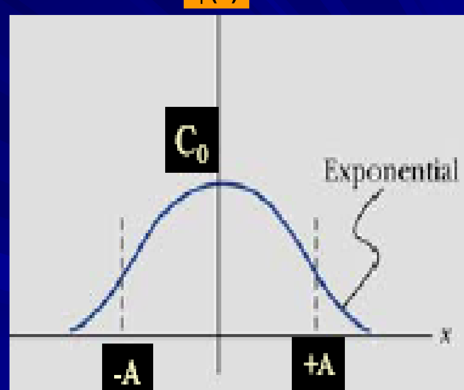
ii)

V(x)



$$E = E_c + \frac{1}{2} k\,\mathbf{x}^2 = \frac{1}{2} k\,\mathbf{A}^2$$

ψ(x)



Probabilité en M.Q. pour que la particule existe en dehors du domaine classique d'oscillations est finie