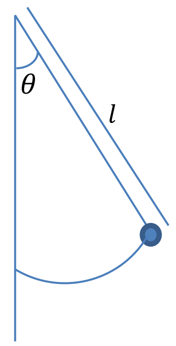
Oscillateur harmonique quantique : Résolution par la méthode de Heisenberg.

Position du problème

L'oscillateur harmonique permet de décrire l'évolution d'un système autour d'une position d'équilibre stable, c'est-à-dire une position pour laquelle le système admet un minium d'énergie potentielle.

Beaucoup de système peuvent être localement approximés par l'oscillateur harmonique : exemple du pendule simple.



$$Ep = mgl(1 - \cos(\theta))$$

$$Ep \underset{\theta \to 0}{=} \frac{1}{2} mgl\theta^2$$

$$Ec = \frac{1}{2} ml^2\dot{\theta}^2$$

$$Em = Ec + Ep = K \text{ (Système conservatif)}$$

$$\frac{dEm}{dt} = ml^2\dot{\theta}\ddot{\theta} + mgl\theta\dot{\theta} = 0$$

$$\ddot{\theta} + \omega_0^2\theta = 0 \; avec \; \omega_0 = \sqrt{\frac{g}{l}}$$

Aux petites oscillations, on retrouve l'équation différentielle caractéristique de l'oscillateur harmonique.

Dans quels cas faire faut-il avoir une approche quantique de l'oscillateur harmonique ?

L'idée est de faire appel à la mécanique quantique quand le système ne peut plus être traité par les approximations classiques. Une des limites de la mécanique classique est de considérer que l'énergie est une quantité continue. La mécanique quantique propose le contraire et affirme que l'énergie s'échange par paquets élémentaires. On peut distinguer un système à traiter de façon quantique quand les énergies qu'il met en œuvre ne sont plus prépondérantes devant un quantum d'énergie.

Considérons le pendule simple de longueur 1 mètre et de masse 1kilogramme. On se place dans le cas des petites oscillations, par exemple $\theta = 1°$ pour l'angle maximal. Dans ce cas :

$$Em = Ep = mgl(1 - \cos(\theta)) \cong 1.5mJ$$

Comparons cette grandeur au quantum d'énergie $\hbar\omega$ avec $\omega = \sqrt{\frac{g}{l}}$ $\hbar\omega \cong 3.1 \times 10^{-34}J$. Ainsi pour ce système $\hbar\omega \ll Em$ il est donc inutile de traiter ce système par la mécanique quantique.

Cependant pour un système microscopique disposant d'une énergie comparable au quantum d'énergie, on ne peut plus considérer que les échanges d'énergie se font de façon continue.

Les cristaux sont un bon exemple. Les atomes aux nœuds du réseau cristallin vibrent autour de leur position d'équilibre et peuvent donc être considérés comme des oscillateurs. Une approche classique de ce système permet de retrouver la loi de Dulong et Petit qui affirme que la capacité thermique à volume constant vaut 3R (pour une mole de cristal). Cette loi est parfaitement vérifiée aux hautes températures, c'est-à-dire quand le quantum d'énergie est négligeable devant l'énergie du système.

Cependant la loi de Dulong et Petit est en contradiction avec l'expérience pour les basses températures. En effet pour une température proche de 0 kelvin la capacité thermique à volume constant s'effondre vers 0 $J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$. Le modèle d'Einstein consiste à considérer les atomes aux nœuds du réseau comme des oscillateurs harmoniques quantiques (vibrant selon la même pulsation dans toutes les directions de l'espace). Ce modèle permet de retrouver le comportement expérimental de cette grandeur thermodynamique.

Résolution

Résoudre le système revient à résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans le cas de l'oscillateur harmonique quantique. C'est-à-dire rechercher les éléments propres ($E\ et |\psi\rangle$) de H qui est l'Hamiltionien du système c'est-à-dire l'observable associée à la mesure de l'énergie du système.

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (1.1)$$

Préliminaires

On considère que l'oscillateur harmonique est à une dimension selon l'axe x. H s'écrit sous la forme

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2X^2 \quad (1.2)$$

Où P_x est l'observable associée à la mesure de l'impulsion le long de l'axe x et X, l'observable associée à la mesure de la position le long de l'axe x.

On introduit les opérateurs échelle suivants comme intermédiaires de calcul. On pourra néanmoins leur trouver un sens physique qui sera détaillé par la suite.

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(X + \frac{i}{m\omega} P_x\right) \quad (1.3)$$

$$\bar{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(X - \frac{i}{m\omega} P_x\right) \quad (1.4)$$

$$N = \bar{a}a \quad (1.5)$$

On notera que N est hermitien.

On peut établir la relation suivante entre N et H

$$H = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right) \quad (1.6)$$

Ainsi à un facteur et une constante additive près, les valeurs propres de N sont celles de H. De plus on peut montrer que H et N commutent donc leurs vecteurs propres sont les même.

L'idée est donc chercher les éléments propres de N.

Recherche des valeurs propres de l'Hamiltionien

Soit $|n\rangle$ vecteur propre normé de N de valeur propre associée n. On peut commencer par écrire l'équation aux valeurs propres :

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad (1.7)$$

On en déduit que toute valeur propre de N est positive ou nulle.

L'objectif est de montrer que les valeurs propres de N sont entières, pour cela, on introduit la quantité $\left\langle n\middle|\bar{a}^k a^k\middle|n\right\rangle$ pour tout k entier positif. On montre que cette quantité est telle que :

$$\left\langle n\middle|\bar{a}^k a^k\middle|n\right\rangle = \mathrm{n(n-1)(n-2)\ldots(n-(k-1))} \quad (1.8)$$

Pour que cette série s'arrête et donc qu'il existe un niveau fondamental, n doit nécessairement être entier.

On sait donc maintenant que les valeurs propres de N sont les entiers positifs

$$Sp(N) = \mathbb{N}$$

En utilisant la relation (1.6), on trouve que les énergies accessibles au système sont :

$$En = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (1.9)$$

On a donc déterminé l'ensemble des valeurs propres de H.

Détermination des états propres

Etat fondamental

L'idée est ici de déterminer le comportement de l'oscillateur harmonique quantique dans son plus bas niveau d'énergie.

Commençons par déterminer l'action de N sur les ket $a|n\rangle$ et $\bar{a}|n\rangle$

$$Na|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \text{ (2.1)}$$

$$N\bar{a}|n\rangle = (n+1)\bar{a}|n\rangle \text{ (2.2)}$$

$a|n\rangle \; et \; \bar{a}|n\rangle$ sont ket propres de N de valeur propre associée: respectivement $(n-1) \; et \; (n+1)$

Il est possible de poser :

$$a|n\rangle = \alpha|n-1\rangle \text{ (2.3)}$$

Avec $|n-1\rangle$ normé, on trouve : $\alpha = \sqrt{n}$ (2.4)

C'est-à-dire $a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ (2.5)

De la même façon, on montre que $\bar{a}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$ (2.6)

C'est ici qu'on peut voir le sens physique des opérateurs échelle. En effet a permet d'abaisser la valeur propre n d'une unité. C'est pourquoi on l'appelle aussi opérateur d'annihilation car il abaisse le niveau d'énergie d'un rang. Tandis que $\bar{a}$ permet d'élever la valeur propre n d'une unité. C'est pourquoi on l'appelle aussi opérateur de création car il élève rang le niveau d'énergie d'un rang

On remarquera d'après (2.5) que si $n = 0$ alors $a|0\rangle = \vec{0}$ (2.7)

Par passage en représentation $\{\vec{r}\}$ dans (2.7), on obtient :

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_0(x) = 0 \text{ (2.8)}$$

Equation différentielle dont la résolution donne l'état fondamental de l'oscillateur harmonique quantique :

$$\psi_0(x) = \lambda_0 e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \text{ (2.9) avec } \lambda_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \text{ (2.10)}$$

La constante λ_0 est donnée par la condition de normalisation.

On remarquera que l'équation différentielle qui a mené à la détermination de l'état fondamental est d'ordre 1. Ainsi l'ensemble des solutions de cette équation forme une droite vectorielle. De ce fait toutes les solutions sont proportionnelles entre elles. Or deux états quantiques qui diffèrent uniquement d'un facteur multiplicatifs représentent le même état. Il apparait donc que l'état fondamental de l'oscillateur harmonique quantique est non-dégénéré.

Etats propres

On cherche maintenant à déterminer tous les autres états propres de l'oscillateur harmonique quantique.

Une question est de savoir si les états propres du système (en dehors de l'état fondamental) sont dégénérés et le cas échéant, de quel ordre ?

Supposons que l'état $|n\rangle$ soit dégénéré k fois. On peut donc écrire l'état de k façons différentes :

$$|n,1\rangle, |n,2\rangle, \dots |n,k\rangle$$

Si l'applique n fois l'opérateur annihilation, on trouve un état fondamental écrit de k façons différentes :

$$|0,1\rangle, |0,2\rangle, \dots |0,k\rangle$$

Ceci est impossible puisqu'on vient de montrer que l'état fondamental est non-dégénéré. On en déduit donc que tous les états propres de l'oscillateur harmonique quantique sont simples.

Par la suite, on montre par applications successives de l'opérateur création que :

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\overline{a}^{\,n}|0\rangle \text{ (2.11)}$$

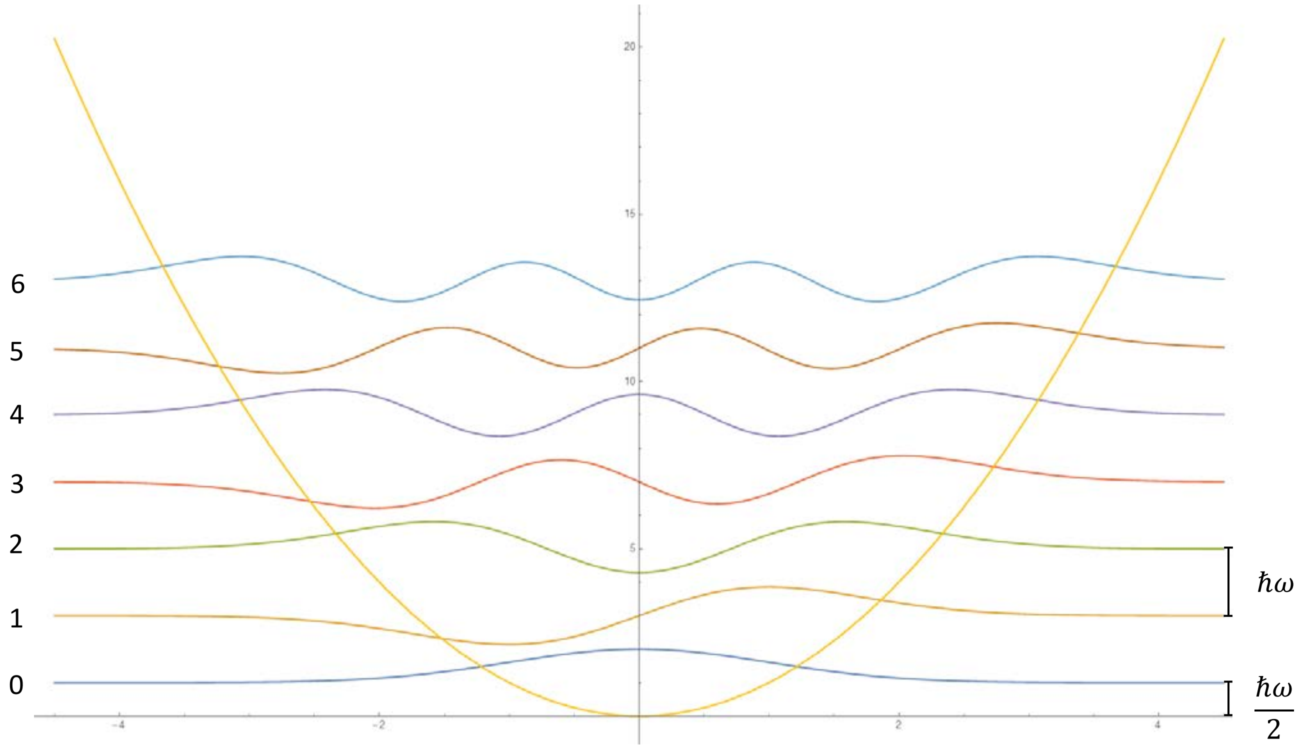
Par passage en représentation $\{\vec{r}\}$ dans (2.4), on trouve :

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\, H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\right) \text{ (2.12)}$$

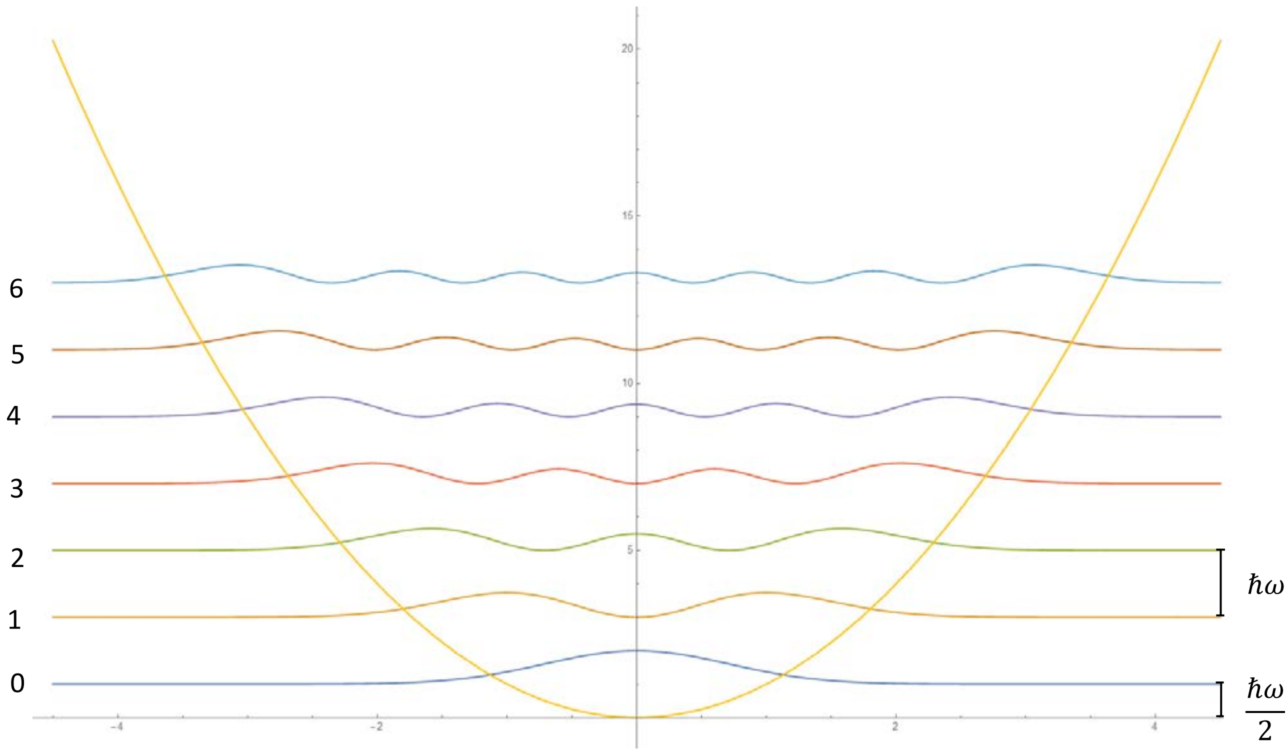
Où H_n est le n-ième polynôme d'Hermite.

On en déduit la probabilité élémentaire de trouver une particule entre $x\ et\ x + dx$ dans l'état $|n\rangle$:

$$P_n(x)dx = \|\psi_n(x)\|^2 dx = \frac{1}{2^n n!}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\, H_n^2\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\right) \text{ (2.13)}$$



Modes propres



Probabilité