TD 6: Oscillateur harmonique quantique

Dans ce TD, on omettra les « chapeaux » sur les opérateurs pour ne pas surcharger les notations.

1 Définitions

1. Donner des exemples physiques faisant intervenir le modèle d'oscillateur harmonique.

> **Correction**
>
> Toute situation proche d'une position d'équilibre stable peut être assimilée en première approximation à un oscillateur harmonique (atome, pendule, ressort, cristal, etc.).

2. Rappeler l'énergie classique d'un oscillateur harmonique de masse m en fonction de sa pulsation propre ω. En déduire l'expression du hamiltonien quantique à une dimension en fonction des opérateurs position X et impulsion P.

> **Correction**
>
> L'énergie d'un oscillateur, par exemple pour un ressort, s'écrit : $E = E_\mathrm{c} + E_\mathrm{p} = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. On peut donc intuiter l'expression du hamiltonien :
>
> $$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2X^2$$

3. On définit les opérateurs $\tilde{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X$ et $\tilde{P} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}P$. Montrer que le hamiltonien s'écrit :

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(\tilde{X}^2 + \tilde{P}^2). \tag{1}$$

Sachant que $[X, P] = i\hbar$, calculer le commutateur $[\tilde{X}, \tilde{P}]$.

> **Correction**
>
> En remplaçant les définitions dans le hamiltonien :
>
> $$H = \frac{m\omega\hbar\tilde{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{\hbar}{m\omega}\tilde{X}^2\right) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\tilde{P}^2 + \tilde{X}^2\right)$$
>
> Et pour le commutateur :
>
> $$[\tilde{X}, \tilde{P}] = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}[X, P] = \frac{1}{\hbar}[X, P] = i$$
>
> Au passage, on peut retrouver le commutateur $[X, P]$ en connaissant l'action de X et P sur les fonctions d'onde :
>
> $$[X, P]\psi = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)(x\psi) = i\hbar\psi$$
>
> Cette relation étant vraie pour toute fonction d'onde ψ, on vérifie donc $[X, P] = i\hbar$.
> On en déduit avec la renormalisation $[\tilde{X}, \tilde{P}] = i$.

2 Opérateurs annihilation et création

On définit les opérateurs

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{X} + i\tilde{P}) \qquad \text{et} \qquad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{X} - i\tilde{P}) \tag{2}$$

appelés respectivement *opérateur annihilation* et *opérateur création*.

1. Calculer le commutateur $[a, a^\dagger]$.

Correction

$$\begin{aligned}[a,a^\dagger] &= \frac{(\tilde{X}+i\tilde{P})(\tilde{X}-i\tilde{P}) - (\tilde{X}-i\tilde{P})(\tilde{X}+i\tilde{P})}{2} = \frac{\tilde{X}^2 + i[\tilde{P},\tilde{X}] + \tilde{P}^2 - (\tilde{X}^2 - i[\tilde{P},\tilde{X}] + \tilde{P}^2)}{2} \\ &= i[\tilde{P},\tilde{X}] \\ &= 1\end{aligned}$$

2. Écrire le hamiltonien H en fonction de ces opérateurs a et $a^\dagger$.

Correction

Inverser les définitions des opérateurs a et $a^\dagger$ donne :

$$\tilde{X} = \frac{a + a^\dagger}{\sqrt{2}} \qquad \text{et} \qquad \tilde{P} = \frac{a - a^\dagger}{i\sqrt{2}}$$

En remplaçant dans le hamiltonien :

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar\omega}{4}\left[-(a-a^\dagger)^2 + (a+a^\dagger)^2\right] = \frac{\hbar\omega}{4}\left[-a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a - (a^\dagger)^2 + a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + (a^\dagger)^2\right] \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}(aa^\dagger + a^\dagger a) \\ &= \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)\end{aligned}$$

où on a utilisé le commutateur $[a, a^\dagger]$.

3. On définit un dernier opérateur $N = a^\dagger a$ appelé *opérateur nombre*. Calculer les commutateurs $[N, a]$ et $[N, a^\dagger]$. On pourra utiliser la relation de distribution des commutateurs $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$.

Correction

On a

$$[N,a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger[a,a] + [a^\dagger, a]a = -a$$

et de même $[N, a^\dagger] = a^\dagger$.

Trouver le spectre du hamiltonien revient à trouver celui de l'opérateur N. On se concentre dans la suite sur ce problème.

3 Spectre de N

Soit λ une valeur propre de N, de vecteur propre associé $|\phi\rangle$.

1. Écrire la valeur propre λ sous la forme de la norme d'un vecteur, et en déduire son signe.

Correction

$$\lambda = \langle \phi | N | \phi \rangle = \left\langle \phi \middle| a^\dagger a \middle| \phi \right\rangle = \| a | \phi \rangle \|^2 \geq 0$$

2. En utilisant les commutateurs précédents, montrer que $a|\phi\rangle$ et $a^\dagger|\phi\rangle$ sont aussi des vecteurs propres de N si $\lambda \neq 0$. Donner leur valeur propre respective. Préciser le cas $\lambda = 0$.

Correction

On peut faire apparaître les communicateurs :

$$N(a|\phi\rangle) = \underbrace{[N, a]}_{=-a} |\phi\rangle + a \underbrace{N|\phi\rangle}_{=\lambda|\phi\rangle} = (\lambda - 1) a |\phi\rangle$$

De la même manière, on peut montrer que $N\left(a^\dagger |\phi\rangle\right) = (\lambda + 1)|\phi\rangle$.

Le cas $\lambda = 0$ est particulier. Si $|\phi\rangle$ est un vecteur propre de N de valeur propre $\lambda = 0$, alors d'après la question précédente $0 = \lambda = ||a|\phi\rangle||^2$ implique $a|\phi\rangle = 0$. Ainsi $a|\phi\rangle$ ne peut pas être un vecteur propre (non nul par définition).

3. En déduire que les valeurs propres de N sont des entiers positifs. Justifier les noms des trois opérateurs a, $a^\dagger$ et N.

Correction

On a montré deux choses :

(a) les valeurs propres de N sont toutes positives ou nulles.

(b) si λ est valeur propre non nulle, alors $\lambda - 1$ et $\lambda + 1$ aussi, de vecteurs propres $a|\phi\rangle$ et $a^\dagger|\phi\rangle$ respectivement. Par récurrence, on en déduit que $\lambda - n$ aussi tant que $\lambda - n \neq 0$, avec comme vecteur propre associé $a^n|\phi\rangle$.

Ces deux assertions sont incompatibles, sauf si λ est un entier positif, et dans ce cas, la chaîne descendante de valeurs propres s'arrête à $\lambda = 0$.

L'opérateur a descend d'un cran la valeur propre, alors que l'opérateur $a^\dagger$ l'augmente de un, ce qui explique leur noms d'opérateurs *annihilation* et *création* respectivement.

4 Vecteurs propres de l'hamiltonien

Vus les résultats précédents, on note $n \in \mathbb{N}$ les valeurs propres de N dont on peut montrer par récurrence qu'elles sont non-dégénérées (on associe donc un seul vecteur propre à chaque valeur propre). Dans cette partie, on cherche les états propres $|\phi_n\rangle$ associés.

1. Calculer la fonction propre $\phi_0(x)$ associée à $\lambda = 0$. On pourra utiliser les résultats de la partie précédente.

Correction

On sait que pour $\lambda = 0$, le vecteur propre ϕ_0 vérifie

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

ce qui se traduit par une équation vérifiée par la fonction d'onde :

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \phi_0 + \frac{i \times (-i)}{\sqrt{m\omega\hbar}} \hbar \frac{\partial \phi_0}{\partial x} = 0 \qquad \text{soit} \qquad \frac{\mathrm{d}\phi_0}{\phi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} x$$

En intégrant, on obtient ainsi l'expression d'une gaussienne pour la fonction propre : $\phi_0(x) = A\,\mathrm{e}^{-m\omega x^2/2\hbar}$.

2. Montrer que $|\phi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger |\phi_n\rangle$, par exemple en calculant la norme de $|\phi_{n+1}\rangle$. En déduire qu'on peut écrire les états propres normés de N (et donc de H) sous la forme

$$|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(a^\dagger\right)^n |\phi_0\rangle \tag{3}$$

Correction

Puisque les états propres sont non dégénérés, et qu'on sait que $a^\dagger |\phi_n\rangle$ est un état propre de valeur propre $n+1$, on peut écrire $|\phi_{n+1}\rangle = \alpha a^\dagger |\phi_n\rangle$ avec α un facteur de normalisation à trouver. Calculons sa norme :

$$1 = \langle \phi_{n+1} | \phi_{n+1} \rangle = |\alpha|^2 \left\langle \phi_n \middle| a a^\dagger \middle| \phi_n \right\rangle = |\alpha|^2 \langle \phi_n | N+1 | \phi_n \rangle = |\alpha|^2 (n+1)$$

Ainsi $|\phi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger |\phi_n\rangle$. Par récurrence directe, on trouve l'expression proposée dans l'énoncé.

On retiendra les effets des opérateurs création et annihilation sur les états propres de N :

$$a|\phi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\phi_{n-1}\rangle \qquad \text{et} \qquad a^\dagger |\phi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\phi_{n+1}\rangle \tag{4}$$

5 États cohérents

Les états propres $|\phi_n\rangle$ sont des états purement quantiques, dans lesquels se trouvent un nombre déterminé d'excitations élémentaires (de *quanta d'énergie*). À l'inverse, on peut justifier que les états les plus fidèles à la mécanique classique sont les états propres de l'opérateur a. Ces états sont appelés *états cohérents*.

1. Chercher un état cohérent $|\alpha\rangle$ de valeur propre α sous la forme d'une superposition d'états propres de H.

Correction

On cherche un état cohérent sous la forme $|\alpha\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$. Appliquons l'opérateur a :

$$a|\alpha\rangle = \sum_{n\geq 0} c_n a |\phi_n\rangle = \sum_{n\geq 1} c_n \sqrt{n}\,|\phi_{n-1}\rangle = \sum_{n\geq 0} c_{n+1}\sqrt{n+1}\,|\phi_n\rangle$$

En identifiant terme à terme avec $\alpha|\alpha\rangle$, on trouve l'équation de récurrence $c_{n+1} = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} c_n$, équation d'une suite géométrique. On en déduit les coefficients c_n en fonction de c_0 : $c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0$.
On détermine c_0 en demandant à ce que le vecteur soit normé :

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1 = \sum_{n\geq 0} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} |c_0|^2 = |c_0|^2\,\mathrm{e}^{|\alpha|^2} \qquad \text{d'où} \qquad |c_0| = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2}$$

On a la liberté de la phase de c_0 (comme toujours en mécanique quantique), on choisit c_0 réel positif. Finalement les états cohérents s'écrivent

$$|\alpha\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\phi_n\rangle \qquad \text{avec } \alpha \in \mathbb{C}$$

2. Calculer les valeurs moyennes $\langle X \rangle_\alpha$, $\langle P \rangle_\alpha$, ainsi que $\langle H \rangle_\alpha$ l'énergie moyenne d'un tel état en fonction de $\hbar\omega$ et α.

Correction

On utilise les expressions de X, P et H en fonction de a et $a^\dagger$:

$$\begin{aligned}
\langle X\rangle_\alpha &= \langle\alpha\,|X|\,\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\langle\alpha\left|a+a^\dagger\right|\alpha\right\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}2\,\mathrm{Re}(\langle\alpha\,|a|\,\alpha\rangle) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,\mathrm{Re}(\alpha)\\
\langle P\rangle_\alpha &= \langle\alpha\,|P|\,\alpha\rangle = \frac{1}{i\sqrt{2m\hbar\omega}}\left\langle\alpha\left|a-a^\dagger\right|\alpha\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}2\,\mathrm{Im}(\langle\alpha\,|a|\,\alpha\rangle) = \sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}}\,\mathrm{Im}(\alpha)\\
\langle H\rangle_\alpha &= \hbar\omega\left\langle\alpha\left|a^\dagger a+\frac{1}{2}\right|\alpha\right\rangle = \hbar\omega\left(|\alpha|^2+\frac{1}{2}\right)
\end{aligned}$$

$\langle X\rangle$ et $\langle P\rangle$ sont donc directement reliés aux parties réelles et imaginaires du nombre complexe α définissant l'état cohérent, et $\langle H\rangle$ uniquement au module carré.
Une remarque, on peut écrire $\langle H\rangle_\alpha = \sum_n p_n(\alpha)E_n$, où $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$ est l'énergie de l'état propre à n excitations, et $p_n(\alpha) = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}$ est le poids de cette énergie dans la moyenne. C'est une distribution de Poisson.

3. On montre que $\left\langle H^2\right\rangle_\alpha = \hbar^2\omega^2(|\alpha|^4+2|\alpha|^2+1/4)$. En déduire l'étalement en énergie ΔH_α de l'état cohérent. L'état a-t-il une énergie bien déterminée ?

Correction

On a

$$\Delta H_\alpha = \sqrt{\langle H^2\rangle_\alpha - \langle H\rangle_\alpha^2} = \hbar\omega\sqrt{|\alpha|^4+2|\alpha|^2+1/4-(|\alpha|^2+1/2)^2} = \hbar\omega\sqrt{2|\alpha|^2-|\alpha|^2} = \hbar\omega|\alpha|$$

Ainsi, l'incertitude relative de l'énergie vaut

$$\frac{\Delta H_\alpha}{\langle H\rangle_\alpha} = \frac{\hbar\omega|\alpha|}{\hbar\omega(|\alpha|^2+1/2)} \sim \frac{1}{|\alpha|} \overset{\alpha\to\infty}{\longrightarrow} 0$$

Un état cohérent n'est pas du tout un état propre du hamiltonien (puisque c'est une superposition infinie d'états propres). Cependant, lorsque $|\alpha|$ devient grand, l'écart-type de la distribution en énergies devient négligeable par rapport à la moyenne, ce qui signifie que l'état a une énergie très proche de sa valeur moyenne.

4. Donner l'évolution temporelle de l'état $|\psi(t=0)\rangle = |\alpha_0\rangle$. Montrer que celui-ci est toujours vecteur propre de a. Que remarque-t-on ?

Correction

Comme d'habitude, pour obtenir l'évolution dynamique, on décompose l'état sur une base d'états propres de H. C'est par définition déjà le cas. Alors :

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \mathrm{e}^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}}\sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}}\,|\phi_n(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}}\sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}}\,\mathrm{e}^{-i\omega t(n+1/2)}\,|\phi_n\rangle\\
&= \mathrm{e}^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}}\,\mathrm{e}^{-i\omega t/2}\sum_n \frac{(\alpha_0\,\mathrm{e}^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}\,|\phi_n\rangle
\end{aligned}$$

Ce qui, à une phase près non physique permet d'écrire

$$|\psi(t)\rangle = \left|\alpha_0\,\mathrm{e}^{-i\omega t}\right\rangle$$

Ainsi, lorsqu'un état cohérent évolue dans le temps, il garde sa structure d'état cohérent ! et il reste donc état propre de a. Son paramètre évolue selon $\alpha(t) = \alpha\,\mathrm{e}^{-i\omega t}$, et tourne dans le plan complexe.