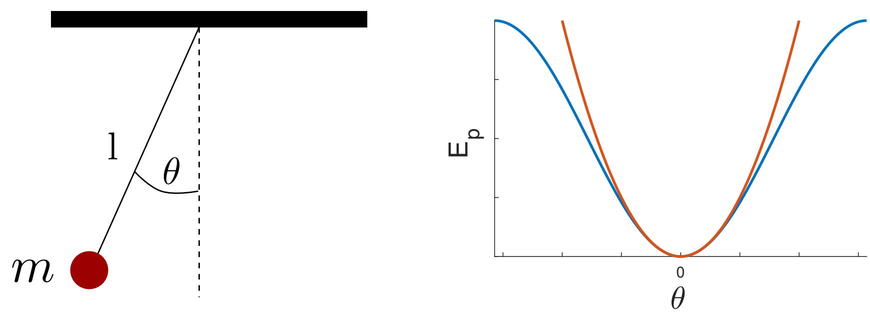
Chapitre 8

Oscillateur harmonique quantique

L'oscillateur harmonique quantique est l'un des rares problèmes que l'on sait résoudre exactement. C'est un modèle d'un importance capitale en physique, car les oscillateurs harmoniques sont omniprésents dans la nature. Quelques exemples :

Approximation harmonique Si l'on considère un système physique quelconque, il est très probable que son énergie potentielle possède des minima locaux. Au voisinage des ces minima, on peut faire un développement limité de l'énergie potentielle, et le premier terme non nul est le terme quadratique. Au premier ordre non nul, le système est donc décrit par le modèle de l'oscillateur harmonique. Un exemple bien connu est celui du pendule simple, dont l'énergie potentielle est $E_p(\theta) = mgl\,(1 - \cos\theta)$, qui au voisinage du minimum $\theta = 0$, s'approxime par $E_p(\theta) \approx mgl\theta^2/2$ (approximation des petits angles). Au voisinage de $\theta = 0$, l'énergie totale est quadratique en la vitesse angulaire $\dot{\theta}$ et en la position angulaire θ, nous pouvons donc décrire le système avec le modèle de l'oscillateur harmonique.



On peut donner une multitude d'autres exemples : le système masse-ressort, le potentiel de Lennard-Jones (potentiel d'interaction entre deux molécules de gaz rare), le potentiel de Morse (liaison covalente), et bien d'autres encore. On retiendra qu'au voisinage d'un minimum local de son énergie potentielle, un système peut être modélisé par un oscillateur harmonique.

Dynamique d'un oscillateur harmonique classique Un oscillateur harmonique mécanique a une énergie quadratique en la position et l'impulsion (ou de manière générale en ses deux variables conjuguées) :

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

En introduisant les variables adimensionnées $X = x/x_0$, et $P = p/m\omega x_0$, où x_0 est la position initiale de l'oscillateur, on peut définir une énergie adimensionnée

$$\tilde{E} = \frac{E}{m\omega^2 x_0^2} = \frac{1}{2}\left(X^2 + P^2\right).$$

Sous cette forme, on constate que comme l'énergie est une constante [1], la trajectoire du système dans le plan (X, P) est un cercle. On peut obtenir le même résultat en résolvant les équations du mouvement. En choisissant l'impulsion initiale $p_0 = 0$, on trouve $(X(t), P(t)) = (\cos \omega t, -\sin \omega t)$ qui est l'équation paramétrique d'un cercle. Par ailleurs, si l'on assimile l'espace des phase à un plan complexe, le nombre complexe représentant l'état du système à un instant t est $\alpha = (X + iP) / \sqrt{2}$. $\alpha(t)$ est la trajectoire du système dans ce plan complexe. Cette trajectoire est circulaire centrée sur l'origine.

Notion de mode En physique on appelle *mode* un état de vibration pour lequel toutes les zones du système oscillent sinusoïdalement à la même fréquence. Vous connaissez par exemple les modes de vibration d'une corde attachée aux deux extrémités. Ces modes constituent une base de solutions d'une équation différentielle appelée équation d'onde. Souvent les modes sont orthogonaux, et l'on parle de modes *normaux*. Cela signifie que les modes ne sont pas couplés entre eux. Si l'on excite le premier harmonique de la corde vibrante, puis qu'on laisse évoluer le système librement, il va continuer de vibrer à la fréquence de ce mode, jusqu'à ce que le mouvement s'atténue complètement, en présence de frottements. Mais en aucun cas le système ne va se mettre spontanément à vibrer à d'autres fréquences. Il ne peut y avoir d'échange d'énergie entre modes normaux. Les modes normaux forment une base orthogonale de fonctions propres sur laquelle on peut décomposer n'importe quel état de vibration du système (structure d'espace vectoriel). Notez que la notion de mode s'applique aussi aux situations ou la fréquence (ou l'énergie) n'est pas quantifiée. Les ondes planes sont des modes propres obtenus à partir de l'équation des ondes électromagnétiques dans le vide ou de l'équation de Schrödinger en l'absence de potentiel. Dans ce cas, l'énergie est un paramètre continu. Un mode propre n'est donc pas forcément associé à une onde stationnaire.

Un mode de vibration est un oscillateur harmonique Prenons l'exemple d'une corde vibrante attachée en $x = 0$ et en $x = L$. Le mode propre de vibration d'indice n a pour évolution [2] spatio-temporelle $y_n(x, t) = A_n \sin(k_n x) \cos(\omega_n t)$, où L est la longueur de la corde et ω_n est la fréquence d'oscillation temporelle du mode, qui est un multiple de la fréquence d'oscillation du mode fondamental. k_n est le vecteur d'onde du mode n, multiple du vecteur d'onde du mode fondamental : $k_n = nk_0$, avec $k_0 = \pi/L$. Le mode n évolue avec l'équation

$$\frac{d^2 y_n}{dt^2} = -\omega_n^2 y_n,$$

qui n'est autre que l'équation d'évolution d'un oscillateur harmonique. Chaque mode propre de vibration est donc un oscillateur harmonique. Cela est vrai pour les modes de vibation mécaniques, mais aussi pour les modes de vibration du champ électrique (par exemple les mode d'une cavité optique), etc.

8.1 Solution du problème quantique

Dans la première partie du cours, vous avez vu comment trouver les états possibles d'un systèmes quantiques en résolvant une équation différentielle sur la fonction d'onde : l'équation de Schrödinger. On pourrait trouver les états possibles de l'oscillateur harmonique et leurs propriétés de cette manière. Mais d'une part c'est difficile mathématiquement, et d'autre part, nous allons voir qu'il est possible d'obtenir de nombreuses informations sans résoudre l'équation de Schrödinger, et en utilisant uniquement des résultats d'algèbre linéaire. De manière générale, retenez qu'il existe souvent différentes manière d'aborder le même problème. Enfin, sachez qu'il existe assez peu de problèmes quantiques solubles analytiquement. L'oscillateur harmonique quantique fait donc figure d'exception.

1. Dans ce cours, on ne considérera que des systèmes non dissipatifs (sans pertes). À votre avis, quelle serait la trajectoire du système, si l'on ajoute des pertes ?

2. Notez, pour faire le lien avec la première partie du cours, que cette solution est une solution aux variables séparées. Une onde stationnaire est l'une des solutions stationnaires possibles en mécanique quantique, mais attention, un état stationnaire n'est pas obligatoirement associé à une onde stationnaire.

8.1.1 Hamiltonien et grandeurs caractéristiques

L'hamiltonien du système est quadratique en l'opérateur position et l'opérateur impulsion :

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\widehat{x}^2. \tag{8.1}$$

Les paramètres du problème sont la masse m, la fréquence angulaire ω, et la constante de Planck $\hbar$. Avec ces paramètres nous pouvons construire une longueur $\sqrt{\hbar/m\omega}$, une impulsion $\sqrt{\hbar m\omega}$ et une énergie $\hbar\omega$ caractéristiques. Elles permettent de déterminer des ordres de grandeur, avant même d'aborder la résolution mathématique. Elles permettent également d'adimensionner les variables, et de traiter le problème de manière générique. Introduisons la position, l'impulsion et l'hamiltonien adimensionnés :

$$\widehat{X} = \widehat{x}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad \widehat{P} = \frac{\widehat{p}}{\sqrt{\hbar m\omega}}, \quad \text{et} \quad \widehat{\mathcal{H}} = \frac{\widehat{H}}{\hbar\omega} = \frac{1}{2}\left(\widehat{X}^2 + \widehat{P}^2\right) \tag{8.2}$$

8.1.2 Opérateurs d'annihilation et de création d'un quantum de vibration

Définition : On introduit deux opérateurs adjoints notés $\widehat{a}$ et $\widehat{a}^\dagger$, nommés respectivement *opérateur d'annihilation* et *opérateur de création* (sous-entendu : *d'un quantum de vibration).* Nous expliquerons plus tard la signification de leurs noms. Il sont définis comme combinaisons linéaires de $\widehat{X}$ et $\widehat{P}$:

$$\widehat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\widehat{X} + \mathrm{i}\widehat{P}\right) \tag{8.3}$$

$$\widehat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\widehat{X} - \mathrm{i}\widehat{P}\right) \tag{8.4}$$

Notez dès à présent que $\widehat{a}$ est obtenu à partir du nombre complexe $\alpha = (X + iP)/\sqrt{2}$ représentant la position de l'oscillateur harmonique classique dans l'espace des phases. Nous avons simplement ajouté des chapeaux sur les variables X et P.

Propriété : $\widehat{a} \neq \widehat{a}^\dagger$, donc ces opérateurs ne sont pas hermitiens → ils ne sont pas observables.

Relation de commutation : Calculons dès à présent le commutateur $\left[\widehat{a}, \widehat{a}^\dagger\right]$, il jouera un rôle crucial par la suite. Dans ce calcul, on utilise la linéarité à gauche et à droite du commutateur, ainsi que l'expression du commutateur $[\widehat{x}, \widehat{p}] = i\hbar\hat{\mathbb{1}}$, qui devient $[\widehat{X}, \widehat{P}] = i\hat{\mathbb{1}}$ en utilisant les variables adimensionnées :

$$\begin{aligned}
\left[\widehat{a}, \widehat{a}^\dagger\right] &= \frac{1}{2}\left[\widehat{X} + \mathrm{i}\widehat{P}, \widehat{X} - \mathrm{i}\widehat{P}\right] = \frac{1}{2}\left(\left[\widehat{X}, \widehat{X} - \mathrm{i}\widehat{P}\right] + \mathrm{i}\left[\widehat{P}, \widehat{X} - \mathrm{i}\widehat{P}\right]\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(\cancelto{0}{\left[\widehat{X}, \widehat{X}\right]} - \mathrm{i}\left[\widehat{X}, \widehat{P}\right] + \mathrm{i}\left[\widehat{P}, \widehat{X}\right] - \mathrm{i}\cancelto{0}{\left[\widehat{P}, \widehat{P}\right]}\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(-\mathrm{i}\left(\mathrm{i}\hat{\mathbb{1}}\right) + \mathrm{i}\left(-\mathrm{i}\hat{\mathbb{1}}\right)\right) = \hat{\mathbb{1}}
\end{aligned}$$

$$\left[\widehat{a}, \widehat{a}^\dagger\right] = \hat{\mathbb{1}} \tag{8.5}$$

8.1.3 Opérateur nombre

Introduisons maintenant un autre opérateur appelé *opérateur nombre*. Nous allons montrer que l'hamiltonien s'exprime de manière simple en fonction de cet opérateur. Étudier cet opérateur nous permettra donc par la suite de déterminer les propriétés de l'hamiltonien.

Définition :

$$\widehat{N} \equiv \widehat{a}^\dagger\widehat{a} \tag{8.6}$$

Propriété : $\widehat{N} = \left(\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\right)^\dagger = \widehat{a}^\dagger\widehat{a} = \widehat{N}^\dagger$, donc $\widehat{N}$ est hermitien. L'opérateur nombre est une observable.

Expression en fonction de $\widehat{X}$ et $\widehat{P}$ On développe en prenant garde à conserver l'ordre des opérateurs.

$$\widehat{N} = \frac{1}{2}\left(\widehat{X} - \mathrm{i}\widehat{P}\right)\left(\widehat{X} + \mathrm{i}\widehat{P}\right) = \frac{1}{2}\left(\widehat{X}^2 \overbrace{-\mathrm{i}\widehat{P}\widehat{X} + \mathrm{i}\widehat{X}\widehat{P}}^{\mathrm{i}[\widehat{X},\widehat{P}]} + \widehat{P}^2\right) = \frac{1}{2}\left(\widehat{X}^2 + \widehat{P}^2 - \hat{\mathbb{1}}\right) \tag{8.7}$$

On constate à nouveau sur cette expression que $\widehat{N}$ est hermitien.

Lien avec l'hamiltonien : En comparant les équations 8.2 et 8.7, on obtient $\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{N} + \hat{\mathbb{1}}/2$, d'où

$$\boxed{\widehat{H} = \hbar\omega\left(\widehat{N} + \frac{\hat{\mathbb{1}}}{2}\right).} \tag{8.8}$$

$\widehat{H}$ dépend linéairement de $\widehat{N}$. Le spectre de $\widehat{H}$ se déduit directement du spectre[3] de $\widehat{N}$ via cette relation. Dans ce qui suit, nous allons donc déterminer le spectre de $\widehat{N}$, afin d'en déduire celui de $\widehat{H}$.

Digression : relations de commutation avec $\widehat{a}$ et $\widehat{a}^\dagger$: Ces relations de commutation serviront par la suite. Ces calculs utilisent le développement des commutateurs, ainsi que l'équation 8.5.

$$\left[\widehat{N}, \widehat{a}\right] = \left[\widehat{a}^\dagger\widehat{a}, \widehat{a}\right] = \widehat{a}^\dagger\widehat{a}\widehat{a} - \widehat{a}\widehat{a}^\dagger\widehat{a} = \left(\widehat{a}^\dagger\widehat{a} - \widehat{a}\widehat{a}^\dagger\right)\widehat{a} = \left[\widehat{a}^\dagger, \widehat{a}\right]\widehat{a} = -\widehat{a} \tag{8.9}$$

$$\left[\widehat{N}, \widehat{a}^\dagger\right] = \left[\widehat{a}^\dagger\widehat{a}, \widehat{a}^\dagger\right] = \widehat{a}^\dagger\widehat{a}\widehat{a}^\dagger - \widehat{a}^\dagger\widehat{a}^\dagger\widehat{a} = \widehat{a}^\dagger\left(\widehat{a}\widehat{a}^\dagger - \widehat{a}^\dagger\widehat{a}\right) = \widehat{a}^\dagger\left[\widehat{a}, \widehat{a}^\dagger\right] = \widehat{a}^\dagger \tag{8.10}$$

8.1.4 Dérivation du spectre de $\widehat{N}$

Cette dérivation algébrique est due à Paul Dirac. Nous allons démontrer successivement trois lemmes avant de conclure. Attention, il faut bien assimiler l'interprétation des résultats des trois lemmes : ces lemmes ne sont pas simplement des intermédiaires mathématiques, ils ont une interprétation physique essentielle pour la suite.

Lemme 1 : Soit $\nu \in \mathrm{Sp}\left(\widehat{N}\right)$, et $|\varphi_\nu\rangle$ un vecteur propre associé, alors $\boxed{\nu \geq 0 \text{ **et** } \widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle = 0 \iff \nu = 0}$

Démonstration : Une norme étant toujours positive ou nulle, on a $\|\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle\,\|^2 \geq 0$. On peut par ailleurs expliciter cette norme, ce qui fait apparaître $\widehat{N}$, puis utiliser le fait que $|\varphi_\nu\rangle$ en est un vecteur propre :

$$\|\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle\,\|^2 = \langle\varphi_\nu|\widehat{a}^\dagger\widehat{a}|\varphi_\nu\rangle = \langle\varphi_\nu|\widehat{N}|\varphi_\nu\rangle = \nu\,\langle\varphi_\nu|\varphi_\nu\rangle = \nu\|\,|\varphi_\nu\rangle\,\|^2.$$

Or $|\varphi_\nu\rangle$ ne peut être le vecteur nul puisque par hypothèse, c'est un état propre d'un opérateur hermitien. On en déduit que $\|\,|\varphi_\nu\rangle\,\|^2 > 0$, et donc que $\nu \geq 0$, c'est à dire que les valeurs propres de $\widehat{N}$ sont positives ou nulles. Enfin, ce résultat montre en particulier que $\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle = 0 \iff \nu\|\,|\varphi_\nu\rangle\,\|^2 = 0$. Étant donné que $\|\,|\varphi_\nu\rangle\,\|^2 > 0$, on en déduit que $\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle = 0 \iff \nu = 0$.

Lemme 2 : Soit $\nu \in \mathrm{Sp}\left(\widehat{N}\right)$, et $|\varphi_\nu\rangle$ un vecteur propre associé, alors $\boxed{\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle \propto |\varphi_{\nu-1}\rangle \text{ **ou** } \widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle = 0}$

Démonstration : $\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle \propto |\varphi_{\nu-1}\rangle$ signifie que $\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle$ est un ket propre de $\widehat{N}$ (associé à la valeur propre $\nu-1$). Pour le démontrer il faut donc lui appliquer $\widehat{N}$. Dans ce calcul comme c'est $\widehat{N}$ et non $\widehat{a}$ que l'on sait faire agir sur $|\varphi_\nu\rangle$, la première étape consiste à faire commuter $\widehat{N}$ et $\widehat{a}$ en utilisant la relation 8.9 :

$$\widehat{N}\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle = \left(\widehat{a}\widehat{N} - \widehat{a}\right)|\varphi_\nu\rangle = (\nu-1)\,\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle$$

L'équation $\widehat{N}\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle = (\nu-1)\,\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle$ est vérifiée dans deux situations : soit si $\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle = 0$, soit si $\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle$ est un vecteur propre de $\widehat{N}$ associé à la valeur propre $\nu-1$. Dans ce cas, $\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle$ est donc $|\varphi_{\nu-1}\rangle$ (un ket propre de $\widehat{N}$ associé à la valeur propre $\nu-1$) à une constante complexe près.

3. Le spectre d'un opérateur $\widehat{A}$ est l'ensemble de ses valeurs propres. On le note $\mathrm{Sp}\left(\widehat{A}\right)$

Lemme 3 : Soit $\nu \in \mathrm{Sp}\left(\widehat{N}\right)$, et $|\varphi_\nu\rangle$ un vecteur propre associé, alors alors $\boxed{\widehat{a}^\dagger |\varphi_\nu\rangle \propto |\varphi_{\nu+1}\rangle}$

Démonstration : $\widehat{a}^\dagger |\varphi_\nu\rangle \propto |\varphi_{\nu+1}\rangle$ signifie que $\widehat{a}^\dagger |\varphi_\nu\rangle$ est un ket propre de $\widehat{N}$ (associé à la valeur propre $\nu+1$).. Pour le démontrer il faut donc lui appliquer $\widehat{N}$. Dans ce calcul comme c'est $\widehat{N}$ et non $\widehat{a}^\dagger$ que l'on sait faire agir sur $|\varphi_\nu\rangle$, la première étape consiste à faire commuter $\widehat{N}$ et $\widehat{a}^\dagger$ en utilisant la relation 8.10 :

$$\widehat{N}\widehat{a}^\dagger |\varphi_\nu\rangle = \left(\widehat{a}^\dagger \widehat{N} + \widehat{a}^\dagger\right) |\varphi_\nu\rangle = (\nu+1)\, \widehat{a}^\dagger |\varphi_\nu\rangle$$

L'équation $\widehat{N}\widehat{a}^\dagger |\varphi_\nu\rangle = (\nu+1)\, \widehat{a}^\dagger |\varphi_\nu\rangle$ est vérifiée si $\widehat{a}^\dagger |\varphi_\nu\rangle$ est un vecteur propre de $\widehat{N}$ associé à la valeur propre $\nu+1$. Dans ce cas, $\widehat{a}\,|\varphi_\nu\rangle$ est donc le ket $|\varphi_{\nu+1}\rangle$ à une constante complexe près. Attention, contrairement au cas du lemme 2, $\widehat{a}^\dagger |\varphi_\nu\rangle$ ne peut être le vecteur nul. En effet,

$$\|\widehat{a}^\dagger |\varphi_\nu\rangle\|^2 = \langle\varphi_\nu|\widehat{a}\widehat{a}^\dagger|\varphi_\nu\rangle = \langle\varphi_\nu|\widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \mathbb{1}|\varphi_\nu\rangle = \langle\varphi_\nu|\widehat{N} + \mathbb{1}|\varphi_\nu\rangle = \underbrace{(\nu+1)}_{>0}\underbrace{\|\,|\varphi_\nu\rangle\,\|^2}_{>0},$$

où l'on a utilisé la relation de commutation 8.5. Or, d'après le lemme 1, $\nu \geq 0$, donc $\nu+1 > 0$. Par ailleurs, comme $|\varphi_\nu\rangle$ ne peut être le vecteur nul, nous avons également $\|\,|\varphi_\nu\rangle\,\|^2 > 0$. D'où le fait que $\|\widehat{a}^\dagger |\varphi_\nu\rangle\|^2 > 0$ et que $\widehat{a}^\dagger |\varphi_\nu\rangle$ ne peut être le vecteur nul.

Bilan lemmes 1 et 2 : Analysons les conclusions des lemmes 1 et 2 grâce à la figure 8.1. L'axe vertical représente les valeurs propres de $\widehat{N}$. L'hypothèse de départ est que l'on possède $|\varphi_\nu\rangle$ qui est un état propre de $\widehat{N}$ associé à la valeur propre ν. Le lemme 2 montre qu'appliquer l'opérateur $\widehat{a}$ à $|\varphi_\nu\rangle$ donne le ket $|\varphi_{\nu-1}\rangle$ associé à la valeur propre $\nu-1$. On peut à nouveau appliquer $\widehat{a}$. On obtient alors $|\varphi_{\nu-2}\rangle$ associé à la valeur propre $\nu-2$, et ainsi de suite, jusqu'à arriver à la valeur propre ν_{min} telle que $0 \leq \nu_{\text{min}} < 1$. Si $\nu_{\text{min}} = 0$, alors $|\varphi_{\nu_{\text{min}}}\rangle$ est le vecteur nul, et lui appliquer $\widehat{a}$ donnera toujours le vecteur nul. Si $0 < \nu_{\text{min}} < 1$, alors $\widehat{a}\,|\varphi_{\nu_{\text{min}}}\rangle$ devrait être un vecteur propre de $\widehat{N}$ associé à une valeur propre négative, car $\nu_{\text{min}} - 1 < 0$, ce qui n'est pas possible si l'on regarde la seconde conclusion du lemme 1. Nous avons donc montré que $\widehat{a}\,|\varphi_{\nu_{\text{min}}}\rangle$ doit être le vecteur nul. Or si l'on applique le lemme 1 pour $\nu \equiv \nu_{\text{min}}$, on obtient

$$\overbrace{\|\widehat{a}\,|\varphi_{\nu_{\text{min}}}\rangle\,\|^2}^{0} = \nu_{\text{min}}\overbrace{\|\,|\varphi_{\nu_{\text{min}}}\rangle\,\|^2}^{>0},$$

d'où l'on tire la conclusion que $\nu_{\text{min}} = 0$. La plus petite valeur propre atteinte lors d'applications successives de $\widehat{a}$ à un état propre de $\widehat{N}$ est donc 0.

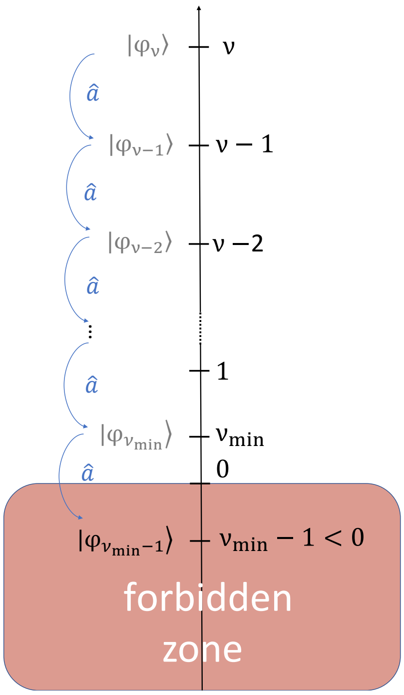


FIGURE 8.1 – Lemmes 1 & 2

Bilan lemme 3 : Analysons maintenant les conclusions du lemme 3 grâce à la figure 8.2. Le lemme 3 montre qu'appliquer $\widehat{a}^\dagger$ à un vecteur propre de $|\varphi_\nu\rangle$ donne un vecteur propre de $\widehat{N}$ associé à la valeur propre $\nu+1$. Appliquons ce résultat au vecteur propre associé à la valeur propre minimale, qui comme nous l'avons montré est 0 : $\widehat{a}^\dagger |\varphi_0\rangle \propto |\varphi_1\rangle$ associé à la valeur propre 1. Si l'on répète l'opération, on obtient $\widehat{a}^\dagger |\varphi_1\rangle \propto |\varphi_2\rangle$ associé à la valeur propre 2, puis $\widehat{a}^\dagger |\varphi_2\rangle \propto |\varphi_3\rangle$ associé à la valeur propre 3, et ainsi de suite. Lors d'opérations successives de l'opérateur $\widehat{a}^\dagger$, on constate que les valeurs propres obtenues balaient l'ensemble des entiers. Le résultat important que nous venons de montrer est donc

$$\boxed{\mathrm{Sp}\left(\widehat{N}\right) = \mathbb{N}.} \tag{8.11}$$

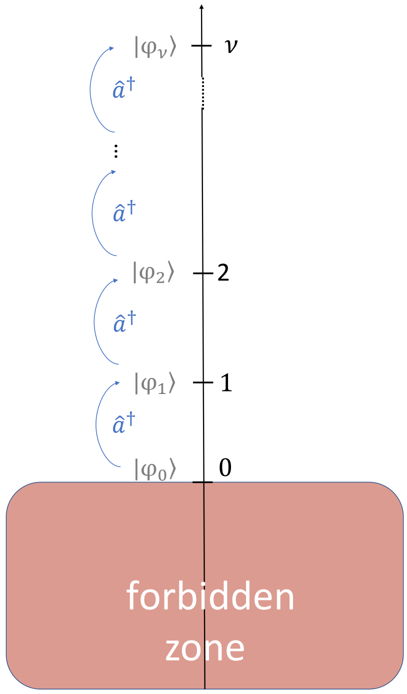


FIGURE 8.2 – Lemme 3

Comme $\widehat{H}$ et $\widehat{N}$ sont liés par la relation 8.8, on en déduit le spectre de l'hamiltonien. On notera E_n les valeurs propres de $\widehat{H}$. Elles valent donc [4]

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), n \in \mathbb{N} \tag{8.12}$$

On observe que l'écart entre les niveaux d'énergie successifs vaut $\hbar\omega$. C'est un résultat remarquable : les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique quantique unidimensionnel sont équidistants. Notez par ailleurs que dans la modélisation de ce problème, nous avons choisi le zéro d'énergie au fond du puits de potentiel. La formule 8.12 montre que la différence d'énergie entre le fond du puits (énergie de l'oscillateur classique immobile), et l'état fondamental du problème quantique est $\hbar\omega/2$: dans le cas quantique l'énergie de l'état fondamental est supérieure à l'énergie associée à l'absence de mouvement dans le cas classique. Il y a donc toujours du mouvement dans l'état fondamental du problème quantique. Ce mouvement se nomme *mouvement de point zéro* : s'il existait un état dans lequel l'oscillateur est immobile, sa position et son impulsion seraient alors simultanément déterminées, ce qui est interdit par les inégalités d'Heisenberg.

8.1.5 Degré de dégénérescence des niveaux

Afin de déterminer le degré de dégénérescence des niveaux d'énergie, nous allons faire un raisonnement par récurrence sur n : on montre d'abord que la propriété est vrai à l'ordre 0 (initialisation), puis on démontre que si on la suppose vraie à l'ordre n, elle est vraie à l'ordre $n+1$ (hérédité).

Initialisation : Soit $|\varphi_0\rangle$ un état propre associé à l'énergie propre $E_0 = \hbar\omega/2$ (état fondamental). D'après le lemme 1, nous savons que $\widehat{a}\,|\varphi_0\rangle = 0$. L'idée de la démonstration est de voir cette relation comme une équation différentielle sur la fonction d'onde de l'état fondamental. L'unicité de la solution de cette équation permettra de conclure. Substituons $\widehat{a}$ par sa définition (eq. 8.3), puis revenons aux variables dimensionnées grâce aux équations 8.2, et multiplions par le bra $\langle x|$ à gauche :

$$\begin{aligned}\left(\widehat{X}+\mathrm{i}\widehat{P}\right)|\varphi_0\rangle &= 0\\ \langle x|\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\widehat{x}+\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{m\hbar\omega}}\widehat{p}\right)|\varphi_0\rangle &= 0\\ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\,\langle x|\varphi_0\rangle+\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{m\hbar\omega}}\langle x|\widehat{p}|\varphi_0\rangle &= 0.\end{aligned}$$

Ici, on a utilisé le fait que $\widehat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$. On identifie également $\langle x|\varphi_0\rangle$ avec la fonction d'onde $\varphi_0(x)$, et $\langle x|\widehat{p}|\varphi_0\rangle$ avec l'action de $\widehat{p}$ sur la fonction [5] d'onde $\varphi_0(x)$, soit $-i\hbar d\varphi_0/dx$. L'équation différentielle obtenue est donc

$$\frac{d\varphi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\varphi_0(x). \tag{8.13}$$

Il s'agit d'une équation différentielle du premier ordre qui admet une *unique* solution. On ne peut donc associer qu'un seul état propre à l'énergie propre E_0. L'état fondamental n'est donc pas dégénéré, et

4. Attention, il est très important de bien se souvenir de l'ensemble de définition de ν et pas seulement de la formule.
5. Ce point est délicat suivant le stade conceptuel atteint au cours de la première partie du cours, et il est inutile de s'y attarder pour l'instant, il suffit de comprendre l'idée générale de la démonstration.

la propriété que l'on cherche à démontrer est vraie à l'ordre 0. La solution de l'équation 8.13 est la fonction d'onde de l'état fondamental, il s'agit d'une gaussienne $\varphi_0(x) \propto e^{-x^2/2\sigma^2}$ centrée en 0, et de largeur $\sigma = \sqrt{\hbar/2m\omega}$. On trouve le fait que l'extension caractéristique de la fonction d'onde de l'état fondamental est à un facteur $\sqrt{2}$ près la longueur caractéristique introduite au début du chapitre [6].

Hérédité : Supposons que la propriété soit vraie à l'ordre n, à savoir qu'il existe un entier n tel que le niveau d'énergie E_n soit non dégénéré. Soit $|\varphi_{n+1}\rangle$ un état propre de $\widehat{N}$ associé à la valeur propre $n+1$. D'après le lemme 2, $\widehat{a}\,|\varphi_{n+1}\rangle \propto |\varphi_n\rangle$, donc $\exists\gamma \in \mathbb{C}$, tel que

$$\begin{aligned}
\widehat{a}\,|\varphi_{n+1}\rangle &= \gamma\,|\varphi_n\rangle \\
\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\,|\varphi_{n+1}\rangle &= \gamma\widehat{a}^\dagger\,|\varphi_n\rangle \\
\widehat{N}\,|\varphi_{n+1}\rangle &= \gamma\widehat{a}^\dagger\,|\varphi_n\rangle \\
|\varphi_{n+1}\rangle &= \frac{\gamma}{n+1}\widehat{a}^\dagger\,|\varphi_n\rangle\,.
\end{aligned}$$

Ici, on a multiplié des deux côtés par $\widehat{a}^\dagger$ pour faire apparaître l'opérateur nombre à gauche. On obtient une relation de proportionnalité entre $|\varphi_{n+1}\rangle$ et $\widehat{a}^\dagger\,|\varphi_n\rangle$. $|\varphi_n\rangle$ est unique (à une constante près) car le niveau E_n est non dégénéré, donc $\widehat{a}^\dagger\,|\varphi_n\rangle$ aussi. Finalement, $|\varphi_{n+1}\rangle$ est défini de manière univoque à partir d'un état non dégénéré, donc le niveau E_{n+1} est non dégénéré.

Conclusion : Nous avons démontré que la propriété est vraie à l'ordre 0, puis en supposant qu'elle est vraie à l'ordre n, nous avons démontré qu'elle est vraie à l'ordre $n+1$. Elle est donc vraie pour tout entier n. Les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique sont donc non dégénérés.

Changement de notation : Les niveaux E_n étant non dégénérés, ils sont définis par la seule donnée de l'entier n. Dans la suite les états propres de $\widehat{N}$, que l'on appelle aussi *états nombre*, ou *états de Fock*, seront donc notés de la manière suivante : $\boxed{|\varphi_n\rangle \equiv |n\rangle\,.}$

8.1.6 Signification de $\widehat{a}$ et $\widehat{a}^\dagger$

Le lemme 2 montre que $\widehat{a}\,|n\rangle \propto |n-1\rangle$ et le lemme 3 montre que $\widehat{a}^\dagger\,|n\rangle \propto |n+1\rangle$. Les opérateurs $\widehat{a}$ et $\widehat{a}^\dagger$ sont donc des *opérateurs d'échelle*, c'est à dire qu'ils permettent de passer d'un niveau à l'autre dans l'échelle des niveaux d'énergie, comme le montre la figure ci-contre. Cette figure est très importante car elle résume l'ensemble des résultats obtenus : la formule du spectre de l'hamiltonien, le fait que les états propres de$\widehat{H}$ sont les états propres de $\widehat{N}$, l'action des opérateurs d'échelle, l'équidistance des niveaux d'énergie, l'écart entre l'énergie du fond du puits et l'énergie de l'état fondamental.

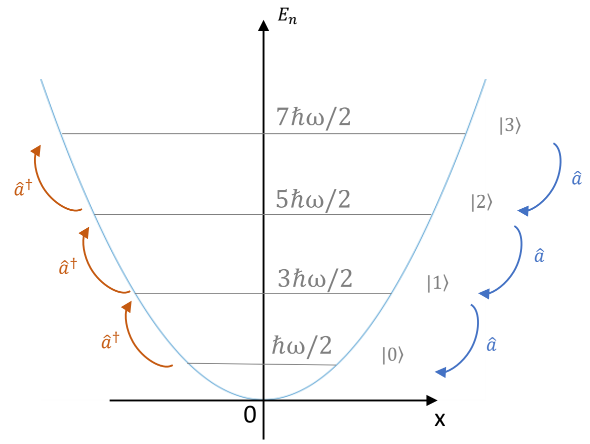


FIGURE 8.3 – Diagramme des niveaux de l'OH

Relations d'échelle : Afin de totalement caractériser l'action de $\widehat{a}$ et $\widehat{a}^\dagger$, il reste à déterminer les coefficients de proportionnalité des relations d'échelle. Supposons que les états nombre soient normés à l'unité. Dans les relations $\widehat{a}\,|n\rangle \propto |n-1\rangle$ et $\widehat{a}^\dagger\,|n\rangle \propto |n+1\rangle$ les membres de droite sont donc de norme unité. De plus d'après le lemme 1, $\|\widehat{a}\,|n\rangle\,\|^2 = n^2\|\,|n\rangle\,\|^2 = n^2$. A la fin de la démonstration du lemme 3, nous avons également montré que $\|\widehat{a}^\dagger\,|n\rangle\,\|^2 = (n+1)\,\|\,|n\rangle\,\|^2$. Nous en déduisons les relations d'échelle à savoir par coeur car très utiles en pratique :

$$\boxed{\widehat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle} \qquad (8.14) \qquad\qquad \boxed{\widehat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\,.} \qquad (8.15)$$

6. Ceci illustre une fois de plus la puissance de l'analyse dimensionnelle pour déterminer les paramètres clés d'un problème physique, sans faire le moindre calcul.

Justification du nom donné à $\widehat{a}$ et $\widehat{a}^\dagger$: Les opérateurs $\widehat{a}$ et $\widehat{a}^\dagger$ permettent donc d'*annihiler* et de *créer* un quantum de vibration $\hbar\omega$ dans l'oscillateur harmonique, d'où leurs noms respectifs : *opérateur de création* et *opérateur d'annihilation* (d'un quantum de vibration).

Annihilation d'un quantum dans l'état fondamental : En lisant la relation 8.14, on retrouve le fait que l'application de $\widehat{a}$ à l'état fondamental donne le vecteur nul de l'espace de Hilbert [7] : on ne peut pas retirer un quantum de vibration à l'état fondamental. Par ailleurs la relation 8.15 montre que l'on peut générer n'importe quel état nombre à par application successive d'$\widehat{a}^\dagger$ sur l'état fondamental. En effet,

$$\left(\widehat{a}^\dagger\right)^n |0\rangle = \sqrt{1}\sqrt{2}\sqrt{3}...\sqrt{n-1}\sqrt{n}\,|n\rangle = \sqrt{n!}\,|n\rangle\,, \quad \text{d'où} \quad |n\rangle = \frac{\left(\widehat{a}^\dagger\right)^n}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle\,.$$

8.2 Conclusion

Classique ou quantique ? : Dans le cas de l'atome d'hydrogène, nous avons évoqué dans un précédent chapitre, le fait que les fonctions d'onde obtenues en résolvant l'équation de Schrödinger se rapprochent de celle données par le modèle semi-classique de Bohr, lorsque le nombre quantique principal est très élevé (états de Rydberg). Dans le cas de l'oscillateur harmonique, c'est la même chose, la probabilité de présence classique de la particule se rapproche de la probabilité de présence obtenue avec le modèle quantique à grand n : le modèle quantique est nécessaire lorsque seuls les niveaux de basse énergie sont explorés par le système.

Effet de l'énergie thermique : Notez que dans ce qui précède nous n'avons pas pris en compte l'énergie thermique : nous avons trouvé la solution du problème *à température nulle*. En pratique, si $k_BT \gg \hbar\omega$, l'énergie thermique est suffisante pour faire transiter le système d'un état à un autre. L'expérimentateur n'a donc pas le contrôle parfait de l'état du système. Par contre, si $k_BT \ll \hbar\omega$, l'énergie thermique n'est plus suffisante pour faire transiter le système d'un niveau à l'autre, et l'expérimentateur a le parfait contrôle de l'état du système. Par exemple si le système est initialisé dans l'état nombre $|1\rangle$, l'énergie thermique n'est pas suffisante pour générer des transitions vers les états $|0\rangle$ et $|2\rangle$, et le système reste dans l'état $|1\rangle$ car il s'agit par ailleurs un état stationnaire.

Exemples d'oscillateurs harmoniques quantiques : En laboratoire, il existe une vaste zoologie d'oscillateurs mécaniques de géométrie, masse et fréquences diverses. Citons par exemple les nanomembranes de nitrure de silicium dont le mode fondamental possède une fréquence de l'ordre du MHz, et dont la masse est de l'ordre de 100 ng. Dans le cas d'un oscillateur mécanique les opérateurs de création et d'annihilation créent ou détruisent des *phonons* dans le mode mécanique. On peut également citer les modes (du champ électromagnétique) de cavité optique qui sont des oscillateurs harmonique. Dans ce cas, les opérateurs de création et d'annihilation créent ou détruisent des *photons* dans le mode de la cavité. On peut également citer les résonateurs micro-ondes supraconducteurs (circuits LC en matériau supraconducteur). Enfin, de manière plus abstraite, en théorie quantique des champs, une particule est une excitation élémentaire d'un certain champ. Créer ou annihiler une particule dans un mode de ce champ revient mathématiquement à appliquer un opérateur de création/annihilation [8].

7. Le vecteur nul de l'espace de Hilbert n'a pas d'existence physique. Le fait de trouver le vecteur nul est la traduction mathématique de l'impossibilité physique de cette opération.

8. Autrement dit, si vous poursuivez des études de physique quantique, vous allez très souvent rencontrer l'oscillateur harmonique (optique quantique, théorie quantique des champs, etc...).