LU3PY101
Physique Quantique 1
2022-2023

# TD 7 - Oscillateur harmonique quantique unidimensionnel – Corrigé –

Une particule de masse $m$ est soumise au potentiel harmonique $\widehat{V}(\hat{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$. On introduit les opérateurs adimensionnés $\widehat{X} = \hat{x}/x_0$ et $\widehat{P} = \hat{p}/p_0$, où $p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}$ et $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$. On rappelle que les opérateurs de création et d'annihilation sont définis par

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\widehat{X} + i\widehat{P}\right], \text{ et } \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\widehat{X} - i\widehat{P}\right].$$

## 1 Quelques manipulations autour de l'énergie

1. Rappeler les expressions de $\hat{a}|n\rangle$ et $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ en fonctions d'états propres du hamiltonien, ainsi que l'interprétation de ces expressions.

**Solution:**

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \text{ et } \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

L'opérateur d'annihilation permet d'annihiler un quantum d'énergie de l'oscillateur, l'opérateur de création créé un quantum d'énergie dans l'oscillateur. Ces opérateurs permettent donc de monter et descendre dans l'échelle des niveaux d'énergie de l'oscillateur.

2. Exprimer les opérateurs énergie cinétique $\widehat{T}$ et énergie potentielle $\widehat{V}$ en fonction des opérateurs $\hat{X}$ et $\hat{P}$ puis en fonction des opérateurs $\hat{a}$ et $\hat{a}^\dagger$.

**Solution:**

$$\widehat{V} = \hbar\omega\frac{\widehat{X}^2}{2}, \ \widehat{T} = \hbar\omega\frac{\widehat{P}^2}{2},$$

puis on développe en prenant garde au fait que les opérateurs $\hat{a}^\dagger$ et $\hat{a}$ ne commutent pas :

$$\widehat{V} = \hbar\omega \times \frac{1}{4}\left[\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right]$$

et

$$\hat{T} = -\hbar\omega \times \frac{1}{4}\left[\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\right]$$

3. Montrer que la valeur moyenne de l'énergie cinétique est égale à la valeur moyenne de l'énergie potentielle lorsque le système est dans un état propre du hamiltonien.

**Solution:**

$$\langle \widehat{V} \rangle_n = \langle n|\widehat{V}|n\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}\langle n|\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle,$$

et

$$\langle \widehat{T} \rangle_n = \langle n|\widehat{T}|n\rangle = -\frac{\hbar\omega}{4}\langle n|\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle$$

La contribution aux valeurs moyennes des termes carrés est nulle car $\hat{a}^2|n\rangle \propto |n-2\rangle$ et $(\hat{a}^\dagger)^2|n\rangle \propto |n+2\rangle$ et que les vecteurs $\{|n\rangle, |n-2\rangle, |n+2\rangle\}$ sont orthogonaux deux-à-deux. Finalement,

$$\langle \hat{V} \rangle_n = \frac{\hbar\omega}{4}\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle,$$

et

$$\langle \hat{T} \rangle_n = \frac{\hbar\omega}{4}\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle,$$

D'où

$$\langle \hat{T} \rangle_n = \langle \hat{V} \rangle_n.$$

On retrouve le théorème du Viriel. Dans le cas de l'oscillateur harmonique unidimensionnel, l'énergie est en moyenne équitablement répartie entre énergie cinétique et énergie potentielle.

4. En déduire sans calcul ces deux valeurs moyennes.

**Solution:**

$$\langle \hat{H} \rangle_n = \langle \hat{T} \rangle_n + \langle \hat{V} \rangle_n = 2\langle \hat{T} \rangle_n = 2\langle \hat{V} \rangle_n$$

donc

$$\langle \hat{T} \rangle_n = \langle \hat{V} \rangle_n = \frac{1}{2}\langle \hat{H} \rangle_n = \frac{E_n}{2} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

5. Retrouver le résultat de la question 4 par un calcul explicite de l'action des opérateurs $\hat{a}$ et $\hat{a}^\dagger$ sur $n$.

**Solution:** On a

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \hat{a}\left[\hat{a}^\dagger|n\rangle\right] = \sqrt{n+1}\hat{a}|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}|n\rangle$$

et

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|n\rangle = \hat{a}^\dagger\,[\hat{a}\,|n\rangle] = \sqrt{n}\hat{a}^\dagger|n-1\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n}|n\rangle$$

donc d'après les équations (3) et (4)

$$\langle \hat{T} \rangle_n = \langle \hat{V} \rangle_n = \frac{\hbar\omega}{4}(n+1+n) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

6. *(Bonus)* Montrer que pour un système décrit par un hamiltonien $\widehat{H}_\lambda$ dépendant d'un certain

paramètre $\lambda$ réel, alors, si $|\Psi_\lambda\rangle$ est un état propre normalisé de $\widehat{H_\lambda}$ d'énergie $E_\lambda$, la relation

$$\frac{\partial E_\lambda}{\partial \lambda} = \langle \Psi_\lambda | \frac{\partial \widehat{H}_\lambda}{\partial \lambda} | \Psi_\lambda \rangle$$

est vérifiée. Elle est connue sous le nom de théorème d'Hellmann-Feynman. Elle permet de déterminer la dérivée des énergies propres en fonction d'un paramètre dont dépend le hamiltonien.

**Solution:** $|\Psi_\lambda\rangle$ est un état propre de $\widehat{H}_\lambda$ associé à la valeur propre $E_\lambda$, d'où

$$\widehat{H}_\lambda |\Psi_\lambda\rangle = E_\lambda |\Psi_\lambda\rangle, \text{ et } \langle \Psi_\lambda | \widehat{H}_\lambda | \Psi_\lambda \rangle = E_\lambda.$$

On différentie cette expression par rapport à lambda :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_\lambda}{\partial \lambda} &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \Psi_\lambda | \widehat{H}_\lambda | \Psi_\lambda \rangle && (1) \\
&= \frac{\partial \langle \Psi_\lambda |}{\partial \lambda} | \widehat{H}_\lambda | \Psi_\lambda \rangle + \langle \Psi_\lambda | \widehat{H}_\lambda | \frac{\partial |\Psi_\lambda\rangle}{\partial \lambda} + \langle \Psi_\lambda | \frac{\partial \widehat{H}_\lambda}{\partial \lambda} | \Psi_\lambda \rangle && (2) \\
&= E_\lambda \left( \frac{\partial \langle \Psi_\lambda |}{\partial \lambda} | \Psi_\lambda \rangle + \langle \Psi_\lambda | \frac{\partial |\Psi_\lambda\rangle}{\partial \lambda} \right) + \langle \Psi_\lambda | \frac{\partial \widehat{H}_\lambda}{\partial \lambda} | \Psi_\lambda \rangle && (3) \\
&= E_\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \Psi_\lambda | \Psi_\lambda \rangle + \langle \Psi_\lambda | \frac{\partial \widehat{H}_\lambda}{\partial \lambda} | \Psi_\lambda \rangle = \langle \Psi_\lambda | \frac{\partial \widehat{H}_\lambda}{\partial \lambda} | \Psi_\lambda \rangle && (4) \\
& && (5)
\end{aligned}$$

7. *(Bonus)* Appliquer le théorème d'Hellmann-Feynman à l'oscillateur harmonique quantique, pour le paramètre $\omega$. Montrer qu'on retrouve l'expression de $\langle V \rangle_n$ déterminée précédemment. Appliquer ce même théorème pour le paramètre $m$. Conclure.

**Solution:** Dans le cas de l'OH quantique, les états propres du hamiltonien sont les états nombres $|n\rangle$. On calcule donc la variation des énergies propres en fonction des deux paramètre grâce au résultat de la question précédente. On a

$$\frac{\partial E_n}{\partial \omega} = \langle n | \frac{\partial \widehat{H}_n}{\partial \omega} | n \rangle = \langle n | m\omega \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{2}{\omega} \langle V \rangle,$$

or on a par ailleurs $\frac{\partial E_n}{\partial \omega} = \hbar \left( n + 1/2 \right)$, d'où $\langle V \rangle_n = E_n/2$.

$$\frac{\partial E_n}{\partial m} = \langle n | - \frac{\hat{p}}{2m^2} + \frac{1}{2}\omega^2 \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{1}{m} \left( -\langle T \rangle_n + \langle V \rangle_n \right),$$

or on sait par ailleurs que $\frac{\partial E_n}{\partial m} = 0$, et donc on retrouve le théorème du Viriel $\langle T \rangle_n = \langle V \rangle_n$. En effet, l'énergie potentielle est proportionnelle à la masse alors que l'énergie cinétique est inversement proportionnelle à celle-ci.

8. Déterminer les énergies potentielles et cinétiques moyennes lorsque le système est dans un état quasi-classique. Commenter les résultats obtenus.

**Solution:** $\langle \widehat{V} \rangle_\alpha = \langle \alpha | \widehat{V} | \alpha \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \langle \alpha | \hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle$. On utilise le fait que les états quasi-classiques sont propres de $\hat{a}$ : $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ et la relation associée dans l'espace dual $\langle \alpha | \hat{a}^\dagger = \alpha^* \langle \alpha |$. On utilise également la relation de commutation $\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = \mathbb{1}$ pour faire commuter l'avant dernier terme. On obtient

$$\langle \widehat{V} \rangle_\alpha = \frac{\hbar\omega}{4} \left(\alpha^2 + (\alpha^*)^2 + 2|\alpha|^2 + 1\right) = \frac{\hbar\omega}{4} \left((\alpha + \alpha^*)^2 + 1\right).$$

Or nous avons vu dans le cours que le coefficient complexe $\alpha$ représente la trajectoire de l'oscillateur harmonique classique dans l'espace des phase : $\alpha = (X + iP)/\sqrt{2}$. De cette relation nous déduisons $X = (\alpha + \alpha^*)/\sqrt{2}$, ce qui permet de récrire

$$\langle \widehat{V} \rangle_\alpha = \frac{\hbar\omega}{2} \left(X^2 + \frac{1}{2}\right).$$

Ainsi l'énergie potentielle moyenne d'un OH dans un état quasi-classique est supérieure à l'énergie potentielle de l'oscillateur harmonique classique de $\hbar\omega/4$.

On peut également calculer la valeur moyenne de l'énergie cinétique $\langle \widehat{T} \rangle_\alpha = \frac{\hbar\omega}{2} \left(P^2 + 1/2\right)$. On trouve également qu'elle est supérieure à l'énergie cinétique de l'oscillateur harmonique classique de $\hbar\omega/4$. Par rapport au cas classique l'énergie totale de l'oscillateur harmonique est augmentée de l'énergie de point zéro $\hbar\omega/2$

Remarque : si l'on prend $X(t) = A\cos(\omega t + \phi)$, on a $P(t) = -A\omega \sin(\omega t + \phi)$, en prenant les valeurs moyennes temporelles de $\langle \widehat{T} \rangle_\alpha$ et $\langle \widehat{V} \rangle_\alpha$, on retrouve le théorème du Viriel.

## 2 Relation d'incertitude d'Heisenberg

9. En considérant le système dans un état nombre, et en utilisant les résultats de la partie précédente, déterminer le produit $\Delta\widehat{X}\Delta\widehat{P}$.

**Solution:** On a $\langle \widehat{X}^2 \rangle_n = \frac{2}{\hbar\omega} \langle \widehat{V} \rangle_n = n + \frac{1}{2}$. De même on a $\langle \widehat{P}^2 \rangle_n = n + \frac{1}{2}$. Par ailleurs nous avons vu dans le cours sur les états quasi-classiques que la valeur moyenne de la position et de l'impulsion sur un état nombre est nulle. D'où $\Delta\widehat{X}\Delta\widehat{P} = n + 1/2$

10. L'inégalité d'Heisenberg est elle vérifiée pour tout $n$ ? Commenter le cas $n = 0$. Comparer au cas des états quasi-classiques.

**Solution:** On a bien $\Delta\widehat{X}\Delta\widehat{P} \geq 1/2$ pour tout $n$. L'égalité est obtenue pour $n = 0$. Pour les états quasi-classiques on a trouvé dans le cours $\Delta\widehat{X}\Delta\widehat{P} = 1/2$ indépendamment de $\alpha$, c'est à dire que l'égalité est vérifiée pour tout états quasi-classique, qui sont des états d'incertitude minimale. Il est cohérent de trouver le cas d'égalité pour l'état nombre $n = 0$ puisqu'il s'agit d'un état qui est à la fois un état nombre et un état quasi-classique.

# 3 États quasi-classiques

Dans cette partie nous allons démontrer certaines propriétés des états quasi-classiques étudiés en cours. Dans un premier temps on souhaite trouver la relation de passage entre la base des états de Fock et la base des états quasi-classiques.

11. Exprimer les coefficients $c_n$ de la décomposition d'un état quasi-classique sur la base des états nombres, en fonction de $c_0$.

**Solution:** La décomposition s'écrit $|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle$. On utilise ensuite la relation de définition des états quasi-classiques : $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$. On substitue la décomposition dans le membre de gauche :

$$\begin{aligned}\hat{a}|\alpha\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{a}|n\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{n}|n-1\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1}\sqrt{n+1}|n\rangle\end{aligned}$$

On obtient donc l'égalité

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1}\sqrt{n+1}|n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \alpha|n\rangle.$$

Comme les états nombres forment une base, on en déduit que $\forall n, \sqrt{n+1}c_{n+1} = \alpha c_n$. On peut récrire cette relation de récurrence $c_n = \frac{\alpha}{\sqrt{n}} c_{n-1}$, qui se résout en $c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0$.

12. Déterminer $c_0$ en utilisant la condition de normalisation des états quasi-classiques. En déduire la relation de changement de base souhaitée.

**Solution:** On a $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$, donc $\sum_n^{\infty} |c_n|^2 = 1$. Or $c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0$, d'où

$$|c_0|^2 = \left(\sum_n^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}\right)^{-1} = e^{-|\alpha|^2},$$

en reconnaissant le développement en série entière de l'exponentielle. $c_0$ est donc connu à une phase près, que l'on peut choisir nulle puisque les états sont définis à une phase globale arbitraire près. La relation de passage s'écrit donc

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

On suppose que l'on dispose d'un compteur de photons, c'est-à-dire d'un appareil de mesure qui projette dans la base des états nombre.

13. Exprimer la valeur moyenne de l'opérateur nombre pour un système dans un état quasi-classique. On la notera $\langle n \rangle$. Conclure sur la signification du coefficient $\alpha$.

**Solution:**

$$\langle \widehat{N} \rangle = \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle = \alpha^* \alpha = |\alpha|^2$$

$|\alpha|^2$ est donc le nombre moyen de photons dans l'état quasi-classique $\alpha$.

14. Quelle est la variance $\Delta n^2$ du nombre de photons dans un état quasi-classique ?

**Solution:**

$$\langle \widehat{N}^2 \rangle = \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle = |\alpha|^2 \langle \alpha | \hat{a} \hat{a}^\dagger | \alpha \rangle = |\alpha|^2 \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} + \widehat{\mathbb{1}} | \alpha \rangle = |\alpha|^2 \left( |\alpha|^2 + 1 \right)$$

Finalement,

$$\Delta n^2 = \langle \widehat{N}^2 \rangle - \langle \widehat{N} \rangle^2 = |\alpha|^2$$

On voit que la distribution du nombre de photons possède la moyenne et la variance d'une loi de Poisson.

15. Si l'oscillateur harmonique est dans un état quasi-classique (par exemple l'état du champ électromagnétique à la sortie d'un laser), quelle est la probabilité $P(n)$ de mesurer $n$ photons avec ce détecteur ?

**Solution:**

$$P(n) = |\langle \alpha | n \rangle|^2 = e^{-\langle n \rangle} \frac{\langle n \rangle^n}{n!}$$

On a donc bien une distribution de Poisson.