Université de Rouen Normandie
L3 PHYSIQUE

PHYSIQUE QUANTIQUE 2
A. FNIDIKI

TD 12 : Oscillateur harmonique

Exercice 1 :

Soit un oscillateur harmonique à 1 dimension.

1. Calculer [x, H] et [p, H]. Conclusion sur une mesure de x ou p dans un état propre $|n\rangle$
2. Calculer <x> et <p> sur les états propres $|n\rangle$ et H.
3. Calculer <Δx> et <Δp> sur les états propres $|n\rangle$ et H. Conclusion.
4. A la date t, le vecteur d'état $|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$

   Calculer $|\psi(t)\rangle$, puis <x> et <p> à la date t.

   Vérifier dans ce cas le théorème d'Ehrenfest.

Exercice 2 :

Un oscillateur harmonique à uns dimension porte une charge q. Dans le champ électrique $\vec{E}$ constant et uniforme, parallèle à Ox, son énergie potentielle totale est : $\frac{1}{2}kx^2 - qEx$. Déterminer ses niveaux d'énergie. Montrer que les fonctions d'onde correspondantes sont $\psi_n\left(x - \frac{qE}{k}\right)$, où $\psi_n(x)$ est la fonction d'onde du niveau n de l'oscillateur en champ nul ; interpréter ce résultat. Calculer la polarisation de l'oscillateur soit directement, soit à l'aide de l'énergie. (On rappelle qu'un système de polarisation α acquiert dans le champ E l'énergie $-\alpha\varepsilon_0 \frac{E^2}{2}$).

Exercice 3 :

Un oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions est une particule de masse m dont l'énergie dont l'énergie potentielle est, avec une origine convenable, $\frac{1}{2}k\left(x^2 + y^2 + z^2\right)$. Montrer qu'on peut résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps en séparant les variables, c'est-à-dire en cherchant des fonctions d'onde de la forme : $\psi(\vec{r}) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$. Déterminer les niveaux d'énergie de la particule et leur dégénérescence.

1. Calculer [x, H] et [p, H]. Conclusion sur une mesure de x ou p dans un état propre $|n\rangle$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$[x,H] = [x,\frac{p^2}{2m}] + [x,V(x)] = [x,\frac{p^2}{2m}] = i\hbar\frac{p}{m}$$

$$[p,H] = [p,\frac{p^2}{2m}] + [p,V(x)] = [p,V(x)] = -i\hbar\frac{dV(x)}{dx}$$

[x, H] $\neq 0 \Rightarrow |n\rangle$ n'est pas vecteur propre de x. Si on mesure x on aura à priori n'importe quelle valeur propre de x lors de la mesure. Même chose pour p.

2. Calculer <x> et <p> sur les états propres $|n\rangle$ et H.

   Sur la base $\{|n\rangle\}$. Les éléments diagonaux des matrices x et p sont nul $\Rightarrow$<x> = 0 et <p>=0.

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a + a^+\right) \quad p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(a^+ - a\right) a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \; et \; a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \Rightarrow$$

$$x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}|n-1\rangle + \sqrt{n+1}|n+1\rangle\right) \Rightarrow \langle n|x|n\rangle = 0 \; et \; \langle n|p|n\rangle = 0$$

3. Calculer <Δx> et <Δp> sur les états propres $|n\rangle$ et H. Conclusion

$$\langle n|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|a^2 + a^{+2} + aa^+ + a^+a|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|2N+1|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$$

   Car $\langle n|a^2|n\rangle = \langle n|a^{+2}|n\rangle = 0$. De même

$$\langle n|p^2|n\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}(2n+1) \Rightarrow \Delta x\Delta p \geq (2n+1)\frac{\hbar}{2} \geq \frac{\hbar}{2}$$

4. A la date t, le vecteur d'état $|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$

   Calculer $|\psi(t)\rangle$, puis <x> et <p> à la date t.

   Vérifier dans ce cas le théorème d'Ehrenfest

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}}|n\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}}\sum_n c_n e^{-in\omega t}|n\rangle \equiv \sum_n c_n e^{-in\omega t}|n\rangle$$

$$< x >_t = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sum_k\sum_n c_n c_k^* e^{i(k-n)\omega t}\left(\sqrt{n}\langle k|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\langle k|n+1\rangle\right)$$

$$< x >_t = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sum_n c_n c_{n-1}^* e^{-i\omega t}\sqrt{n} + c_n c_{n+1}^* e^{i\omega t}\sqrt{n+1}$$

$$< x >_t = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sum_n (c_n c_{n-1}^* e^{-i\omega t} + c_n^* c_{n-1} e^{i\omega t})\sqrt{n}$$

$$< x >_t = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sum_n (c_n c^*_{n-1} + c^*_n c_{n-1})\sqrt{n}\cos\omega t \ + i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sum_n (-c_n c^*_{n-1} + c^*_n c_{n-1})\sqrt{n}\sin\omega t$$

$$< x >_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sum_n (c_n c^*_{n-1} + c^*_n c_{n-1})\sqrt{n}$$

De même :

$$< p >_t = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\sum_n (c_n c^*_{n-1} + c^*_n c_{n-1})\sqrt{n}\sin\omega t \ + i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sum_n (-c_n c^*_{n-1} + c^*_n c_{n-1})\sqrt{n}\cos\omega t$$

$$< p >_0 = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\sum_n (-c_n c^*_{n-1} + c^*_n c_{n-1})\sqrt{n}\cos\omega t$$

$< x >_t =< x >_o \cos\omega t + \dfrac{< p >_0}{m\omega}\sin\omega t$ et $< p >_t =< p >_o \cos\omega t - m\omega < x >_0 \sin\omega t$

Les valeurs moyennes en MQ redonnent les résultats classiques. En effet :

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \Rightarrow x(t) = A\cos\omega t + B\sin\omega t \ avec\ A = x_O \ et\ \dot{x}(t) = -A\omega\sin\omega t + B\omega\cos\omega t$$

$$\dot{x}_{\dot{a}} = B\omega \Rightarrow B = \frac{p_o}{m\omega} \Rightarrow x(t) = x_o\cos\omega t + \frac{p_{\ 0}}{m\omega}\sin\omega t \ et\ p(t) = p_o\cos\omega t - m\omega x_0\sin\omega t$$

Vérifier dans ce cas le théorème d'Ehrenfest.

$$\frac{d < x >}{dt} = \frac{< p >}{m}$$

$$\frac{d < p >}{dt} = - < \frac{dV(x)}{dx} >$$

$$\Rightarrow \mathrm{m}\frac{d^2 < x >}{d^2 t} = - < F(x) >$$

Exercice 2 :

Un oscillateur harmonique à uns dimension porte une charge q. Dans le champ électrique $\vec{E}$ constant et uniforme, parallèle à Ox, son énergie potentielle totale est : $\frac{1}{2}kx^2 - qEx$. Déterminer ses niveaux d'énergie. Montrer que les fonctions d'onde correspondantes sont $\psi_n\left(x - \frac{qE}{k}\right)$, où $\psi_n(x)$ est la fonction d'onde du niveau n de l'oscillateur en champ nul ; interpréter ce résultat. Calculer la polarisation de l'oscillateur soit directement, soit à l'aide de l'énergie. (On rappelle qu'un système de polarisation α acquiert dans le champ E l'énergie $-\alpha\varepsilon_0 \frac{E^2}{2}$).

V(x) = $\frac{1}{2}kx^2 - qEx$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_n(x)}{d^2x}+(\frac{kx^2}{2}-qEx)\varphi_n(x)= E_n\varphi_n(x)$$. On pose : $X=x-\frac{qE}{k}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_n(X)}{d^2X}+(\frac{k\left(X+\frac{qE}{k}\right)^2}{2}-qE\left(X+\frac{qE}{k}\right))\varphi_n(X)= E_n\varphi_n(X)$$

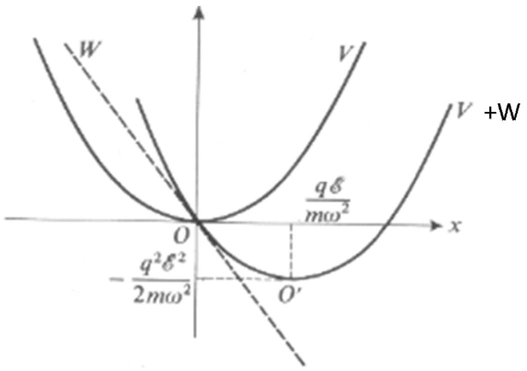
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_n(X)}{d^2X}+(\frac{kX^2}{2}-\frac{q^2E^2}{2})\varphi_n(X)= E_n\varphi_n(X)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_n(X)}{d^2X}+\frac{kX^2}{2}\varphi_n(X)= (E_n+\frac{q^2E^2}{2k})\varphi_n(X)$$

Or cette équation ressemble à l'équation sans champ électrique

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n(X)}{d^2X}+\frac{kX^2}{2}\psi_n(X)=E'_n\,\psi_n(X)\ avec\,\varphi_n(X)=\psi_n(X)=\psi_n(x-\frac{qE}{k})$$

$$E'_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega=E_n+\frac{q^2E^2}{2k}\Rightarrow E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{q^2E^2}{2k}$$



En appliquant un champ E on a déplacé la position d'équilibre de x=0 à $x=\frac{qE}{k}$

Calculer la polarisation de l'oscillateur soit directement, soit à l'aide de l'énergie. (On rappelle qu'un système de polarisation α acquiert dans le champ E l'énergie $-\alpha\varepsilon_0\frac{E^2}{2}$).

Calcul à partir de L'énergie acquise :

$$-\alpha\frac{E^2}{2}=\frac{-q^2E^2}{2k}\Rightarrow\alpha=\frac{q^2}{k}$$

Calcul directe :

$$\vec{D}=\alpha\vec{E}=q\vec{x}\Rightarrow D=qx$$

<u>Quand E=0</u>⇒

$$\langle n|D|n\rangle=q\langle n|x|n\rangle=0$$

<u>Quand E≠0</u>

$$< D >= q\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x-\frac{qE}{k})x\psi_n(x-\frac{qE}{k})dx = q\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(u)\left(u+\frac{qE}{k}\right)\psi_n(u)du =$$

$$q\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(u)u\psi_n(u)du\right]+\frac{qE}{k}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(u)\psi_n(u)du = q\langle n|x|n\rangle+\frac{q^2E}{k}=\frac{q^2E}{k}\Rightarrow \alpha=\frac{q^2}{k}$$

Exercice 3 :

Un oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions est une particule de masse m dont l'énergie dont l'énergie potentielle est, avec une origine convenable, $\frac{1}{2}k\left(x^2+y^2+z^2\right)$. Montrer qu'on peut résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps en séparant les variables, c'est-à-dire en cherchant des fonctions d'onde de la forme : $\psi(\vec{r})=\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$. Déterminer les niveaux d'énergie de la particule et leur dégénérescence.

On peut résoudre ce problème en utilisant les propriétés du PT.
En cherchant des fonctions d'onde de la forme : $\psi(\vec{r})=\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)}{d^2x}+-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)}{d^2y}+-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)}{d^2z}+$$
$$\frac{1}{2}k\left(x^2+y^2+z^2\right)\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)=E\ \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$$

$$\left(\psi_2(y)\psi_3(z)\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1(x)}{d^2x}+\left(\psi_1(x)\psi_3(z)\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2(y)}{d^2y}+\left(\psi_1(x)\psi_2(y)\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_3(z)}{d^2x}+$$
$$\frac{1}{2}k\left(x^2+y^2+z^2\right)\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)=E\ \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$$

On divisant par
$\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)\Rightarrow$

$$\frac{[\frac{1}{2}kx^2-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d^2x}]\psi_1(x)}{\psi_1(x)}+\frac{[\frac{1}{2}ky^2-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d^2y}]\psi_2(y)}{\psi_2(y)}+\frac{[\frac{1}{2}kz^2-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d^2z}]\psi_3(z)}{\psi_3(z)}=\mathrm{E}$$

Ceci est vrai quelque soit x, y et z$\Rightarrow$

$$\frac{[\frac{1}{2}kx^2-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d^2x}]\psi_1(x)}{\psi_1(x)}=E_x\Rightarrow H_x\psi_1(x)=E_x\psi_1(x)$$

$$\frac{[\frac{1}{2}ky^2-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d^2y}]\psi_2(y)}{\psi_2(y)}=E_y\Rightarrow H_y\psi_2(y)=E_y\psi_2(y)$$

$$\frac{[\frac{1}{2}kz^2-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d^2z}]\psi_3(z)}{\psi_3(z)}=E_z\Rightarrow H_z\psi_3(z)=E_z\psi_3(z)$$

$$E = E_x + E_y + E_z = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

<u>Calcul de la dégénérescence d'une valeur propre :</u> $n=n_x+n_y+n_z \Rightarrow n-n_x=n_y+n_z$, on cherche le nombres de couples $(n_y, n_z) = (0,n-n_x)$, $(1, n-n_x-1)$ …….$(n-n_x, 0)$. Il y'a $n-n_x+1$ couples (n_y, n_z). $\Rightarrow$

$$g_n = \sum_{n_x=0}^{n}\left(n - n_x + 1\right) = \left(n+1\right)\sum_{n_x=0}^{n}1 - \sum_{n_x=0}^{n}n_x = \left(n+1\right)^2 - \frac{n(n+1)}{2} = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$