

4 L'oscillateur harmonique

Dans ce paragraphe, nous nous proposons de déterminer les solutions stationnaires de l'oscillateur harmonique en une dimension. Il s'agit d'un des problèmes fondamentaux de la mécanique quantique, avec de profondes implications dans la théorie quantique des champs. Nous allons donc le résoudre par deux chemins différents : la solution directe de l'équation de Schrödinger, et l'introduction des opérateurs de « création » et d'« annihilation ».

4.1 Solution de l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique est donnée par

$$(21) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi$$

Il ne s'agit pas d'une équation linéaire standard car le coefficient de ψ dépend de x .

4.1.1 Solution

Pour simplifier, on introduit la notation $q = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, et on pose

$$(22) \quad \begin{aligned} \psi(x) &= \phi(q) \\ \frac{d\psi}{dx} &= \frac{d\phi}{dq} \frac{dq}{dx} = \frac{d\phi}{dq} \frac{1}{q} \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{d}{dx} \left(\frac{d\phi}{dq} \frac{1}{q} \right) = \frac{d}{dq} \left(\frac{d\phi}{dq} \frac{1}{q} \right) \frac{dq}{dx} = \frac{d}{dq} \left(\frac{d\phi}{dq} \frac{1}{q} \right) \frac{1}{q} \end{aligned}$$

L'équation différentielle s'écrit

$$(23) \quad \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi &= E\psi \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dq} \left(\frac{d\phi}{dq} \frac{1}{q} \right) \frac{1}{q} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar^2}{m\omega^2} \frac{q^2}{\hbar^2} \phi &= E\phi \\ \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dq^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar^2}{m\omega^2} q^2 \phi &= E\phi \end{aligned}$$

$$\text{soit } \frac{d^2\phi}{dq^2} + (\lambda - q^2)\phi = 0$$

où on a posé $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$. Lorsque $q \rightarrow \infty$, l'équation différentielle est approximativement donnée par

$$\begin{aligned} \frac{d^2\varphi}{dq^2} &\simeq q^2\varphi(q) \\ \varphi(q) &\propto e^{\pm\frac{1}{2}q^2} \end{aligned} \quad (24)$$

A ce stade, Schrödinger émet l'hypothèse que la solution doit être bornée et que seul le comportement asymptotique $e^{-\frac{1}{2}q^2}$ est acceptable. Cherchons donc la solution sous la forme

$$\begin{aligned} \varphi(q) &= H(q) e^{-\frac{1}{2}q^2} \\ \frac{d\varphi}{dq} &= \frac{dH}{dq} e^{-\frac{1}{2}q^2} + H(q) (-q) e^{-\frac{1}{2}q^2} \\ \frac{d^2\varphi}{dq^2} &= \frac{d^2H}{dq^2} e^{-\frac{1}{2}q^2} + 2\frac{dH}{dq} (-q) e^{-\frac{1}{2}q^2} - H(q) e^{-\frac{1}{2}q^2} + q^2 H(q) e^{-\frac{1}{2}q^2} \end{aligned} \quad (25)$$

L'équation différentielle en H s'écrit donc :

$$\frac{d^2H}{dq^2} - 2q\frac{dH}{dq} + (\lambda - 1)H = 0 \quad (26)$$

Cherchons la solution sous la forme d'un développement en série :

$$H(q) = \sum_{j=0}^{+\infty} a_j q^j \quad (27)$$

Il vient :

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dq} &= \sum_{j=1}^{+\infty} a_j j q^{j-1} = \sum_{j=0}^{+\infty} a_{j+1} (j+1) q^j \\ \frac{d^2H}{dq^2} &= \sum_{j=1}^{+\infty} a_{j+1} (j+1) j q^{j-1} = \sum_{j=0}^{+\infty} a_{j+2} (j+2) (j+1) q^j \\ q\frac{dH}{dq} &= \sum_{j=1}^{+\infty} a_j j q^j = \sum_{j=0}^{+\infty} a_j j q^j \\ \Rightarrow \sum_{j=0}^{+\infty} [a_{j+2} (j+2) (j+1) - 2a_j j + (\lambda - 1) a_j] q^j &= 0 \\ \Rightarrow a_{j+2} &= a_j \frac{2j + (1 - \lambda)}{(j+2)(j+1)} \end{aligned} \quad (28)$$

$$(32) \quad a_{j+2} = a_j \frac{(j+1)(j+2)}{2(j-n)}$$

Dans ce cas, la relation de récurrence sur les coefficients s'écrit :

$$(31) \quad \lambda = 2n + 1$$

Conclusion : il doit exister un entier n tel que $2n + 1 - \lambda = 0$, soit

Cette solution doit aussi être rejetée.

$$(30) \quad \begin{aligned} &\Leftrightarrow \phi(b) \propto b e^{\frac{1}{2}q^2} \\ &\Leftrightarrow \sum_{i=1}^j a_{2j+1+i} b_{2j+1+i} \approx b e^{\frac{1}{2}q^2} \\ &\Leftrightarrow \frac{j!}{1} a_{2j+1} = a_{2(j-1)+1} \frac{(2j)(2j+1)}{4j-2+1-\lambda} \propto \frac{j!}{a_{2j-1}} \text{ pour } j \text{ impair} \\ &H(b) = \sum_{i=1}^j a_{2j+1+i} b_{2j+1+i} \end{aligned}$$

Solutions impaires :

solution doit être rejetée.

D'après l'hypothèse selon laquelle les solutions doivent être bornées, cette

$$(29) \quad \begin{aligned} &\Leftrightarrow \phi(b) \propto e^{\frac{1}{2}q^2} \\ &\Leftrightarrow \sum_{i=1}^j a_{2j} b_{2j} \approx e^{\frac{1}{2}q^2} \\ &\Leftrightarrow \frac{j!}{1} a_{2j} = a_{2j-2} \frac{(2j)(2j-1)}{4j-3-\lambda} \propto \frac{j!}{a_{2j-2}} \text{ pour } j \text{ grand} \\ &H(b) = \sum_{i=1}^j a_{2j} b_{2j} \end{aligned}$$

Solutions paires :

ou impaires.

Supposons $2j+1-\lambda \neq 0$, et étudions le comportement asymptotique des solutions. Comme $V(b) \propto q^2$ est pair, on peut chercher des solutions paires

Solutions paires : n pair, $a_j = 0$ si j impair et $a_{n+2} = a_{n+4} = \dots = 0$

Solutions impaires : n impair, $a_j = 0$ si j pair et $a_{n+2} = a_{n+4} = \dots = 0$

Les solutions $H(q)$ sont donc des polynômes.

4.1.2 Récapitulation

Les énergies propres sont fixées par la condition $\lambda = 2n + 1$, $n = 0, 1, \dots$

$$\Rightarrow E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (33)$$

Les fonctions propres associées sont des fonctions du type $H(q) e^{-\frac{1}{2}q^2}$ avec

$$H_n(q) = \begin{cases} a_0 + a_2q^2 + \dots + a_nq^n & \text{si } n \text{ pair} \\ a_1q + a_3q^3 + \dots + a_nq^n & \text{si } n \text{ impair} \end{cases} \quad (34)$$

avec $a_{j+2} = a_j \frac{2(j-n)}{(j+1)(j+2)}$

Les polynômes $H_n(q)$ sont appelés *polynômes de Hermite*.

Le fondamental du problème original a donc pour fonction d'onde

$$\psi_0(x) \propto e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (35)$$

Cette fonction est non dégénérée, de même que les états excités : pour n donné, on peut construire un et un seul polynôme de Hermite.

4.2 Opérateurs de création et d'annihilation

Les polynômes de Hermite représentent donc les solutions propres du problème de l'oscillateur harmonique en mécanique quantique. D'un point de vue strictement mathématique, il est utile de rappeler la relation de récurrence qui relie les polynômes de Hermite de degré différent

$$H_{n+1}(q) = 2qH_n(q) - 2nH_{n-1}(q),$$

$$\frac{dH_n(q)}{dq} = 2nH_{n-1}(q). \quad (36)$$

Le polynôme de degré $n+1$ s'obtient donc à partir du polynôme de degré n en lui appliquant l'opérateur $2q - \frac{d}{dq}$. Cet opérateur est une somme de l'opérateur de multiplication par la position et de l'opérateur différentiel, qui sont à leur

Elles ne sont pas dégénérées. L'état fondamental $|\varphi_0\rangle$ satisfait :

$$\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0 \quad (52)$$

Le vecteur propre de valeur propre E_n est donné par

$$|\varphi_n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|\varphi_0\rangle \quad (53)$$

Les vecteurs propres sont reliés entre eux par :

$$\hat{a}^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle \quad \text{et} \quad \hat{a}|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle \quad (54)$$

Remarque : C'est la solution *complète* du problème⁴. La valeur moyenne de n'importe quelle observable dans n'importe quel état s'obtient en exprimant l'observable à l'aide des \hat{a} , \hat{a}^\dagger et en utilisant la règle de commutation $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$.

Exemple : Essayons de calculer la valeur moyenne de \hat{x}^2 dans le fondamental $(\langle\varphi_0|\hat{x}^2|\varphi_0\rangle)$:

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2$$

$$(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 = (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger = (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^2 + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1$$

$$\langle\varphi_0|(\hat{a}^\dagger)^2|\varphi_0\rangle = \langle\varphi_0|\hat{a}^\dagger|\varphi_1\rangle = \sqrt{2}\langle\varphi_0|\varphi_2\rangle = 0$$

$$\langle\varphi_0|\hat{a}^2|\varphi_0\rangle = \langle\varphi_0|\hat{a}\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0 \quad (55)$$

$$\Rightarrow \langle\varphi_0|(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2|\varphi_0\rangle = \langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$$

$$\Rightarrow \langle\hat{x}^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

On voit donc que $\langle\hat{x}^2\rangle \neq 0$ dans l'état de plus basse énergie. Ce résultat est en contradiction manifeste avec le cas classique, où $x = 0$ (et donc $x^2 = 0$) dans le fondamental. Dans l'état de plus basse énergie, on dit qu'il y a des *fluctuations quantiques* appelées dans ce cas *fluctuations de point zéro*.

4. A part la non-dégénérescence des états propres

Proposition : si $|\varphi\rangle$ est vecteur propre de N de valeur propre n , $a^\dagger|\varphi\rangle$ est vecteur propre de N de valeur propre $n + 1$.

Démonstration :

$$N|n\rangle = n|n\rangle, \quad \text{par hypothèse}$$

$$Na^\dagger|\varphi\rangle = a^\dagger a a^\dagger|\varphi\rangle$$

$$(46) \quad \begin{aligned} &= a^\dagger(a^\dagger a + 1)|\varphi\rangle \\ &= a^\dagger a n|\varphi\rangle + a^\dagger|\varphi\rangle \\ &= a^\dagger n|\varphi\rangle + a^\dagger|\varphi\rangle \\ &= (n + 1)a^\dagger|\varphi\rangle \end{aligned}$$

Conséquence : $(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle$ est vecteur propre de N de valeur propre n .

Normalisation : Supposons $|\varphi_n\rangle$ normalisé.

$$\|a^\dagger\varphi_n\|_2^2 = \langle\varphi_n|a^\dagger a|a^\dagger\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|(a^\dagger a + 1)|\varphi_n\rangle = (n + 1)\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle$$

$$\Rightarrow \frac{a^\dagger}{\|a^\dagger\varphi_n\|_2} \text{ est normalisé}$$

$$\Rightarrow |a^\dagger\varphi_{n+1}\rangle = \frac{a^\dagger}{\|a^\dagger\varphi_n\|_2} |a^\dagger\varphi_n\rangle$$

Ainsi,

$$(48) \quad |\varphi_n\rangle = \frac{\sqrt{n!}}{(a^\dagger)^n} |\varphi_0\rangle$$

Enfinement, pour aller d'un état à l'autre, on a :

$$(49) \quad a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$$

Pour circuler dans l'autre sens, on remarque que :

$$\|a|\varphi_n\rangle\|_2^2 = \langle\varphi_n|a^\dagger a|\varphi_n\rangle = n\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = n$$

$$(50) \quad \Rightarrow a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle$$

a et a^\dagger sont souvent appelés *opérateurs de création et d'annihilation*.

4.2.1 Récapitulation

Les valeurs propres de l'oscillateur harmonique sont données par

$$(51) \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{N}$$

tout reliés aux opérateurs de position \hat{x} et de quantité de mouvement \hat{p} respectivement. C'est à partir de cette remarque qu'il est possible de développer la méthode alternative de solution du problème que nous allons proposer par la suite. L'importance de cette méthode ne sera pas immédiatement claire : elle a l'avantage d'introduire un formalisme opératoire, dit de la « seconde quantification », qui est indispensable dans la théorie quantique des champs.

La méthode est simplement basée sur la règle de commutation de Heisenberg $[x, p] = i\hbar$. Nous allons montrer que cette règle conduit effectivement au spectre $\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$ pour l'Hamiltonien de l'oscillateur harmonique H . Notre point de départ est donc

$$(37) \quad H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad [x, p] = i\hbar$$

La remarque sur les relations de récurrence entre polynômes de Hermite nous suggère d'introduire les combinaisons linéaires suivantes des opérateurs \hat{x} et \hat{p} :

$$(38) \quad \begin{aligned} a &\equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i \sqrt{\frac{2m\omega\hbar}{1}} \hat{p} \\ a^\dagger &\equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - i \sqrt{\frac{2m\omega\hbar}{1}} \hat{p} \end{aligned}$$

Ces relations s'inversent en :

$$(39) \quad \begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) \\ \hat{p} &= i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (a^\dagger - a) \end{aligned}$$

Calculons le commutateur de $[a, a^\dagger]$. D'après leurs expressions, il vient :

$$(40) \quad \begin{aligned} [a, a^\dagger] &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} [x, p] + i \frac{2\hbar}{\sqrt{2\hbar}} [\hat{p}, x] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} [x, p] + i \frac{2\hbar}{\sqrt{2\hbar}} [p, x] \\ &= [a, a^\dagger] = 1 \end{aligned}$$

Par ailleurs, l'hamiltonien s'écrit :

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{m\omega\hbar}{2}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 \frac{1}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 \\
&= \frac{\hbar\omega}{4} \left[-(\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 + (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 \right] \\
&= \frac{\hbar\omega}{4} \left[-(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger) + (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \right] \\
&= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \\
&= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) \\
\Rightarrow \hat{H} &= \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)
\end{aligned} \tag{41}$$

Étudions désormais le spectre de l'opérateur $N = \hat{a}^\dagger \hat{a}$.

1. Les valeurs propres de $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ sont positives ou nulles.

Supposons en effet que $\hat{a}^\dagger \hat{a}|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$, avec $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$. On a :

$$\lambda = \langle\varphi|\hat{a}^\dagger \hat{a}|\varphi\rangle = \|\hat{a}|\varphi\rangle\|^2 \geq 0 \tag{42}$$

2. Si $|\varphi_\lambda\rangle$ est vecteur propre de $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ de valeur propre λ , alors $\hat{a}|\varphi_\lambda\rangle$ est vecteur propre de $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ de valeur propre $\lambda - 1$.

Démonstration :

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger \hat{a}|\varphi_\lambda\rangle &= \lambda|\varphi_\lambda\rangle \text{ par hypothèse.} \\
(\hat{a}^\dagger \hat{a})\hat{a}|\varphi_\lambda\rangle &= (\hat{a} \hat{a}^\dagger - 1)\hat{a}|\varphi_\lambda\rangle \\
&= \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a}|\varphi_\lambda\rangle - \hat{a}|\varphi_\lambda\rangle \\
&= \hat{a} \lambda|\varphi_\lambda\rangle - \hat{a}|\varphi_\lambda\rangle \\
&= (\lambda - 1)\hat{a}|\varphi_\lambda\rangle.
\end{aligned} \tag{43}$$

Conséquences : Partant d'un vecteur propre $|\varphi_\lambda\rangle$ de $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ de valeur propre $\lambda > 0$, on engendre des vecteurs propres de valeurs propres $\lambda - 1, \lambda - 2, \dots$ par applications successives de \hat{a} . Deux cas de figure sont à distinguer.

$\boxed{\lambda \notin \mathbb{N}}$ Pour ν suffisamment grand, $\lambda - \nu < 0$. On engendre un vecteur propre de valeur propre négative par application de \hat{a}^ν . Mais on a démontré que les valeurs propres de N sont positives. Cette possibilité doit être écartée.

$\boxed{\lambda \in \mathbb{N}}$ Considérons un vecteur propre $|\varphi_n\rangle$ de valeur propre $n \in \mathbb{N}$. L'application successive de \hat{a} engendre des vecteurs de valeurs propres $n - 1,$

$n - 2, \dots$ jusqu'à l'opérateur \hat{a}^n pour lequel

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger \hat{a}(\hat{a}^n|\varphi_n\rangle) &= (n - n)|\varphi_n\rangle = 0 \\
\text{Mais } \langle\varphi|N|\varphi\rangle = 0 &\Rightarrow \|\hat{a}|\varphi\rangle\|^2 = 0
\end{aligned} \tag{44}$$

$$\Rightarrow \hat{a}^{n+1}|\varphi_n\rangle = 0 \Rightarrow \hat{a}^p|\varphi_n\rangle = 0 \text{ si } p \geq n + 1$$

On n'engendre pas de vecteur propre de valeur propre négative si n est entier.

Conclusion : Les valeurs propres possibles de N sont les **entiers positifs** et donc les valeurs propres possibles de \hat{H} sont $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$. Nous retrouvons donc le même spectre que celui obtenu de la solution de l'équation de Schrödinger. L'opérateur $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ est appelé l'opérateur *nombre*, et il est souvent noté \hat{N} .

Essayons de construire explicitement les vecteurs propres, et étudions si ce spectre est dégénéré.

Partant d'un état $|\varphi_n\rangle$ de valeur propre n , on arrive à un vecteur propre $\hat{a}^n|\varphi_n\rangle$ satisfaisant $\hat{a}(\hat{a}^n|\varphi_n\rangle) = 0$. Sans hypothèse supplémentaire sur \hat{x} et \hat{p} , il est impossible de décider s'il y a un seul état satisfaisant $\hat{a}|\varphi\rangle = 0$. Nous verrons que dans le cadre de l'approche de Schrödinger, le fondamental est non dégénéré. Supposons donc qu'il n'y ait qu'un seul vecteur satisfaisant $\hat{a}|\varphi\rangle = 0$, et notons-le $|\varphi_0\rangle$.

Étape suivante : Les autres états sont-ils dégénérés? Démontrons que non par récurrence.

Hypothèse : La valeur propre n est non dégénérée. Soient $|\varphi_{n+1}\rangle$ et $|\psi_{n+1}\rangle$ deux vecteurs propres de valeurs propres $n + 1$. Comme $\hat{a}|\varphi_{n+1}\rangle$ et $\hat{a}|\psi_{n+1}\rangle$ sont vecteurs propres de N de valeur propre n , et que par hypothèse n est non dégénéré, il existe λ tel que :

$$\begin{aligned}
\hat{a}|\varphi_{n+1}\rangle &= \lambda\hat{a}|\psi_{n+1}\rangle \Leftrightarrow \\
\hat{a}^\dagger \hat{a}|\varphi_{n+1}\rangle &= \lambda\hat{a}^\dagger \hat{a}|\psi_{n+1}\rangle \Leftrightarrow \\
(n + 1)|\varphi_{n+1}\rangle &= \lambda(n + 1)|\psi_{n+1}\rangle \Leftrightarrow \\
|\varphi_{n+1}\rangle &= \lambda|\psi_{n+1}\rangle \\
\Rightarrow n + 1 &\text{ est non dégénérée.}
\end{aligned} \tag{45}$$

Dernière étape : Comment construire les vecteurs propres de valeur propre n quelconque?