Mécanique Quantique I, Corrigé 7

Assistants : joseph.saliba@epfl.ch & pierre.lugan@epfl.ch

Exercice 1 : Fonctions d'onde excitées de l'oscillateur harmonique

1. Le hamiltonien de l'oscillateur harmonique s'écrit :

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

Il s'agit d'un opérateur qui agit sur l'espace de Hilbert des vecteurs d'état $|\varphi\rangle$. Afin de trouver ses valeurs propres nous devons résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \tag{2}$$

Cette équation est une équation vectorielle. Afin de la résoudre on aimerait en faire une équation scalaire. Pour ce faire, on calcule sa projection sur l'espace des $|x\rangle$ qui satisfont $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$. On trouve donc :

$$\langle x|\hat{H}|\varphi\rangle = \langle x|E|\varphi\rangle \tag{3}$$

Comme E est un nombre le côté droit donne simplement $\langle x|E|\varphi\rangle = E\langle x|\varphi\rangle = E\varphi(x)$. La fonction $\varphi(x)$ est appelée fonction d'onde. Pour évaluer le côté gauche de l'équation, il suffit de connaître $\langle x|\hat{x}|\varphi\rangle$ et $\langle x|\hat{p}|\varphi\rangle$:

$$\langle x|\hat{x}|\varphi\rangle = x\varphi(x) \qquad \text{et} \qquad \langle x|\hat{p}|\varphi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x) \tag{4}$$

L'équation (3) s'écrit donc :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{5}$$

On est donc passé d'une équation aux valeurs propres ($\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$) à une équation différentielle ! Cette équation différentielle s'écrit donc :

$$H\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{6}$$

où H est donné par

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{7}$$

C'est ce que l'on a appelé le hamiltonien dans la représentation x. Notez que ce hamiltonien agit sur des fonctions $\varphi(x)$ tandis que le hamiltonien $\hat{H}$ agit sur des vecteurs d'état $|\varphi\rangle$; on rappelle que le lien entre ces deux notations est le suivant : les fonctions d'onde dont il est question sont justement les vecteurs d'un espace vectoriel (espace de Hilbert), ici l'espace de Hilbert des fonctions complexes de carré sommable, muni du produit scalaire complexe que l'on connaît. Pour cet exercice, on s'intéresse à la formulation "analytique" du problème sous forme d'équation différentielle. Avant de poursuivre, il est toutefois plus commode de rééchelonner x en utilisant la variable sans dimension

$$q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \qquad \to \qquad \frac{\partial}{\partial q} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\partial}{\partial x} \tag{8}$$

De cette façon la fonction d'onde du fondamental s'écrit simplement

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad \to \quad \varphi_0(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{q^2}{2}} \equiv \chi e^{-\frac{q^2}{2}} \tag{9}$$

Remarque : par la suite, $\varphi_0(q)$ n'est pas normée vis-à-vis de $\int dq\, \psi^*(q)\phi(q)$, du fait du choix $\chi = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$, mais on pourrait très bien introduire une $\tilde{\varphi}_0(q)$ ainsi normée.
Le hamiltonien est simplement modifié dû au jacobien du changement de variables :

$$H = -\frac{\hbar\omega}{2}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{\hbar\omega}{2}q^2 \tag{10}$$

2. En appliquant H à $\varphi_0(q)$ on obtient :

$$\begin{aligned}
H\varphi_0(q) &= \left(-\frac{\hbar\omega}{2}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{\hbar\omega}{2}q^2\right)\chi e^{-\frac{q^2}{2}} && (11)\\
&= \chi\left(-\frac{\hbar\omega}{2}\frac{\partial}{\partial q}\left(-qe^{-\frac{q^2}{2}}\right) + \frac{\hbar\omega}{2}q^2 e^{-\frac{q^2}{2}}\right) && (12)\\
&= \chi\left(-\frac{\hbar\omega}{2}q^2 e^{-\frac{q^2}{2}} + \frac{\hbar\omega}{2}e^{-\frac{q^2}{2}} + \frac{\hbar\omega}{2}q^2 e^{-\frac{q^2}{2}}\right) && (13)\\
&= \frac{\hbar\omega}{2}\chi e^{-\frac{q^2}{2}} && (14)\\
&= \frac{\hbar\omega}{2}\varphi_0(q) && (15)
\end{aligned}$$

On retrouve donc bien l'énergie du fondamental !

3. Calculons maintenant les fonctions d'ondes obtenues en appliquant l'opérateur de création $\hat{a}^\dagger$ sur $\varphi_0(x)$ [la fonction d'onde]. Notez ici encore le double langage en termes d'une part d'opérateurs et de vecteurs d'état, d'autre part de fonctions d'onde et d'opérateurs différentiels : l'opérateur $\hat{a}^\dagger$ agit sur une fonction d'onde $x \mapsto \varphi(x)$, qui est un vecteur d'état ! On cherche maintenant la représentation de $\hat{a}^\dagger$ sous la forme d'une opérateur différentiel en x (ou q). On cherche donc $\langle x|\hat{a}^\dagger|\varphi_0\rangle = (a^\dagger\varphi_0)(x)$. Nous devons donc d'abord trouver la représentation x de l'opérateur $\hat{a}^\dagger$. Cette représentation x sera notée $a^\dagger$ (sans chapeau, pour faire ici la distinction). On trouve :

$$\begin{aligned}
\langle x|\hat{a}^\dagger|\varphi\rangle &= \langle x|\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}|\varphi\rangle && (16)\\
&= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right]\varphi(x) && (17)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q - \frac{\partial}{\partial q}\right)\varphi(q) && (18)
\end{aligned}$$

On a donc trouvé que l'opérateur $a^\dagger$ agissant sur les fonctions d'onde est donné par [1] :

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q - \frac{\partial}{\partial q}\right) \tag{19}$$

Les différents états excités de l'oscillateur harmonique sont reliés par la relation de récurrence :

$$\hat{a}^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\varphi_{n+1}\rangle \quad \to \quad a^\dagger\varphi_n(q) = \sqrt{n+1}\,\varphi_{n+1}(q) \tag{20}$$

Le premier état excité est donc donné par :

$$\begin{aligned}
\varphi_1(q) &= a^\dagger\varphi_0(q) && (21)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q - \frac{\partial}{\partial q}\right)\chi e^{-\frac{q^2}{2}} && (22)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(q+q)\,\chi e^{-\frac{q^2}{2}} && (23)\\
&= \sqrt{2}\,q\,\varphi_0(q) && (24)
\end{aligned}$$

1. Si toute cette gymnastique avec les opérateurs $\hat{H}$, H, les vecteurs d'état, les fonctions d'onde, etc, vous trouble, vous trouverez un très bon résumé aux pages 1 à 19 du livre "*Geometry, Topology and Physics*" de M. Nakahara.

Le second état excité est lui donné par :

$$\begin{aligned}
\varphi_2(q) &= \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger \varphi_1(q) && (25)\\
&= \frac{1}{2}\left(q - \frac{\partial}{\partial q}\right)\sqrt{2}\, q\, \chi e^{-\frac{q^2}{2}} && (26)\\
&= \frac{\chi}{\sqrt{2}}\left(q^2 e^{-\frac{q^2}{2}} - e^{-\frac{q^2}{2}} + q^2 e^{-\frac{q^2}{2}}\right) && (27)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(2q^2 - 1)\varphi_0(q) && (28)
\end{aligned}$$

4. La définition des polynômes de Hermite est donnée par :

$$H_n(q) = e^{\frac{q^2}{2}}\left(q - \frac{d}{dq}\right)^n e^{-\frac{q^2}{2}} \tag{29}$$

Voyons si l'on peut exprimer les fonctions d'onde $\varphi_n(q)$ en fonction de ces polynômes :

$$\begin{aligned}
\varphi_n(q) &= \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\varphi_0(q) && (30)\\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(q - \frac{\partial}{\partial q}\right)\right]^n \varphi_0(q) && (31)\\
&= \frac{\chi}{\sqrt{2^n n!}}\left(q - \frac{\partial}{\partial q}\right)^n e^{-\frac{q^2}{2}} && (32)\\
&= \frac{\chi}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{q^2}{2}} e^{\frac{q^2}{2}}\left(q - \frac{\partial}{\partial q}\right)^n e^{-\frac{q^2}{2}} && (33)\\
&= \frac{\chi}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{q^2}{2}} H_n(q) && (34)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(q)\varphi_0(q) && (35)
\end{aligned}$$

On trouve bien le résultat annoncé. De plus, on vérifie aisément que les fonctions d'onde $\varphi_0(q)$, $\varphi_1(q)$ et $\varphi_2(q)$ trouvées au point précédent satisfont bien à cette équation. En effet, les premiers polynômes de Hermite sont $H_0(q) = 1$, $H_1(q) = 2q$ et $H_2(q) = 4q^2 - 2$.

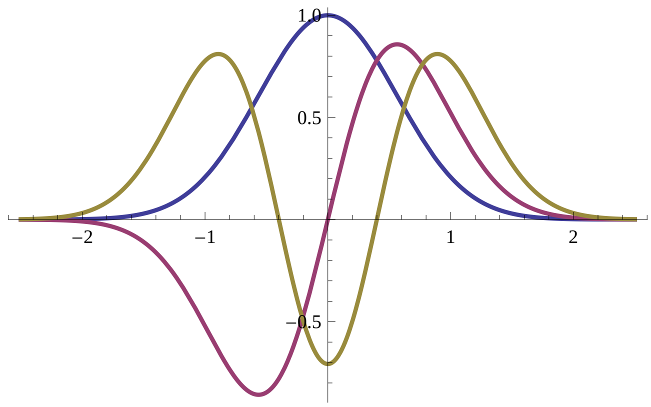
5. Nous voulons à présent tracer l'allure de ces fonctions d'onde. Commençons par calculer les $\varphi_i(q = 0)$, ainsi que les points où s'annulent ces fonctions. On trouve :

$$\begin{aligned}
\varphi_0(q = 0) &= \chi && (36)\\
\varphi_1(q = 0) &= 0 && (37)\\
\varphi_2(q = 0) &= -\frac{\chi}{\sqrt{2}} && (38)
\end{aligned}$$

De plus, ces fonctions s'annulent aux points suivants :

$$\begin{aligned}
\varphi_0 &\to q = \pm\infty\\
\varphi_1 &\to q = 0,\, \pm\infty\\
\varphi_2 &\to q = \pm\frac{1}{\sqrt{2}},\, \pm\infty
\end{aligned}$$

Les courbes ont donc les allures suivantes, où nous avons posé $\chi = 1$.



φ_0 est la courbe qui ne présente pas de noeud, φ_1 un noeud et φ_2 deux noeuds.

6. Afin de voir à quoi correspondent les deux intégrales données, il suffit de les identifier comme les produits scalaires suivants :

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{m\omega}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\, e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} = \langle\varphi_0|\varphi_1\rangle = 0 \\ \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} = \langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = 1 \end{aligned} \tag{39}$$

En effet, les états propres de l'oscillateur harmonique sont orthonormés ! Notez qu'il s'agit bien du produit scalaire où l'on a utilisé la relation de fermeture :

$$\int dx|x\rangle\langle x| = \mathbb{1} \quad \rightarrow \quad \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \int dx\langle\varphi_n|x\rangle\langle x|\varphi_m\rangle = \int dx\, \varphi_n^*(x)\varphi_m(x) \tag{40}$$

Exercice 2 : Vecteurs propres de l'opérateur position et états propres de l'OH

1. En utilisant la définition de l'opérateur position en fonction des opérateurs d'échelle $\hat{a}$ et $\hat{a}^\dagger$, on trouve :

$$\hat{x}|\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|\varphi_n\rangle \tag{41}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle + \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle\right) \tag{42}$$

On en déduit immédiatement la valeur de $\langle x|\hat{x}|\varphi_n\rangle$ en utilisant que $\langle x|\varphi_n\rangle = \varphi_n(x)$:

$$\langle x|\hat{x}|\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\varphi_{n-1}(x) + \sqrt{n+1}\varphi_{n+1}(x)\right) \tag{43}$$

2. Sachant que $|x\rangle$ sont les vecteurs propres de $\hat{x}$ on trouve :

$$(\hat{x}|x\rangle)^\dagger = (x|x\rangle)^\dagger \tag{44}$$

$$(|x\rangle)^\dagger\hat{x}^\dagger = (|x\rangle)^\dagger x^\dagger \tag{45}$$

$$\langle x|\hat{x} = \langle x|x \tag{46}$$

car $\hat{x}$ est un opérateur hermitique et x est réel. Ainsi on a $\langle x|\hat{x}|\varphi_n\rangle = x\langle x|\varphi_n\rangle = x\varphi_n(x)$ et on trouve donc la relation de récurrence suivante :

$$x\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\varphi_{n-1}(x) + \sqrt{n+1}\varphi_{n+1}(x)\right) \tag{47}$$

En envoyant $n \to n-1$, on réécrit l'équation sous la forme :

$$\sqrt{n}\,\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\,\varphi_{n-1}(x) - \sqrt{n-1}\varphi_{n-2}(x) \tag{48}$$

3. En faisant le changement de variables $q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ ainsi que le changement de fonction $h_n(q) = \sqrt{2^n n!}\frac{\langle x|\varphi_n\rangle}{\langle x|\varphi_0\rangle}$, nous pouvons réexprimer la relation de récurrence.
Les trois termes de la relation précédente deviennent :

$$\sqrt{n}\,\varphi_n(q) = \sqrt{\frac{n}{2^n n!}}\,h_n(q)\varphi_0(q) \tag{49}$$

$$\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\,\varphi_{n-1}(q) = \sqrt{\frac{2}{2^{n-1}(n-1)!}}\,q\,h_{n-1}(q)\varphi_0(q) \tag{50}$$

$$\sqrt{n-1}\varphi_{n-2}(q) = \sqrt{\frac{n-1}{2^{n-2}(n-2)!}}\,h_{n-2}(q)\varphi_0(q) \tag{51}$$

En simplifiant par :

$$\frac{\varphi_0(q)}{\sqrt{2^n(n-1)!}} \tag{52}$$

on obtient finalement :

$$h_n(q) = 2qh_{n-1}(q) - 2(n-1)h_{n-2}(q) \tag{53}$$

Cette relation de récurrence est celle vérifiée par les polynômes de Hermite $H_n(q)$. On obtient donc que les coefficients $\langle x|\varphi_n\rangle = \varphi_n(x)$ sont de la forme :

$$\varphi_n(q) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n(q)\varphi_0(q) \tag{54}$$

en accord avec le résultat de l'exercice 1.