Mécanique Quantique I, Corrigé 10

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

Exercice 1 : Oscillateur harmonique 2D

1. En partant du hamiltonien donné, le lagrangien associé se trouve en effectuant la transformée de Legendre inverse en p. On a donc $\dot{x} = \partial H/\partial p_x$ et $\dot{y} = \partial H/\partial p_y$ d'où :
$$p_x = m\dot{x} \quad , \quad p_y = m\dot{y} \tag{1}$$
ce qui conduit au lagrangien :
$$\mathcal{L} = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y - H = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2) \tag{2}$$
Le lagrangien étant indépendant du temps, la fonction hamiltonienne (énergie) :
$$h = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2) \tag{3}$$
est conservée. De plus, le lagrangien admet la symétrie suivante :
$$\begin{aligned} x &\rightarrow x(s) = \cos(s)x - \sin(s)y \\ y &\rightarrow y(s) = \cos(s)y + \sin(s)x \end{aligned} \tag{4}$$
ce qui conduit, par le théorème de Noether, à la conservation de la quantité suivante :
$$L_z = \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}\frac{\partial q_i(s)}{\partial s} = m(x\dot{y} - y\dot{x}) = p_y x - p_x y \tag{5}$$
que l'on identifie avec la composante $\hat{z}$ du moment cinétique.
2. On peut sans difficulté réécrire le hamiltonien sous la forme :
$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y \tag{6}$$
avec :
$$\hat{H}_x = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \quad , \quad \hat{H}_y = \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{y}^2 \tag{7}$$
Les opérateurs $\hat{x}$ et $\hat{p}_x$ commutant avec $\hat{y}$ et $\hat{p}_y$, ces deux parties commutent : $[\hat{H}_x, \hat{H}_y] = 0$.
3. Par pure analogie on peut introduire :
$$\begin{aligned} \hat{a}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{p}_x\right) \\ \hat{a}_y &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{y} + i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{p}_y\right) \\ \hat{a}_x^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} - i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{p}_x\right) \\ \hat{a}_y^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{y} - i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{p}_y\right) \end{aligned} \tag{8}$$
   (a) Pour chacun des oscillateur on a les relations habituelles :
$$[\hat{a}_i, \hat{a}_i] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i^\dagger] = 0 \quad , \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] = 1 \tag{9}$$
   et tous les termes croisés s'annulent.

(b) On obtient simplement :

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N}_x + \hat{N}_y + 1) \tag{10}$$

(c) De façon générale, si deux opérateurs $\hat{O}_1$ et $\hat{O}_2$ commutent, on peut définir une base dans laquelle les deux opérateurs sont diagonaux. Prenons $|\psi\rangle$, un des élément de cette base. Par définition nous aurons :

$$\begin{array}{rcl} \hat{O}_1|\psi\rangle & = & \lambda_\psi|\psi\rangle \\ \hat{O}_2|\psi\rangle & = & \Lambda_\psi|\psi\rangle \end{array} \tag{11}$$

Afin d'avoir une notation plus aisée à lire, on notera alors souvent :

$$|\psi\rangle = |\lambda_\psi, \Lambda_\psi\rangle \tag{12}$$

et ainsi de suite pour tous les autres éléments de la base.
Dans notre cas, $\hat{N}_x$ et $\hat{N}_y$ commutent. En suivant la même procédure, les états porteront donc deux indices relatifs à chacun de ces opérateurs, $|n_x, n_y\rangle$:

$$\begin{array}{rcl} \hat{N}_x|n_x, n_y\rangle & = & n_x|n_x, n_y\rangle \\ \hat{N}_y|n_x, n_y\rangle & = & n_y|n_x, n_y\rangle \\ \hat{H}|n_x, n_y\rangle & = & \hbar\omega(n_x + n_y + 1)|n_x, n_y\rangle \end{array} \tag{13}$$

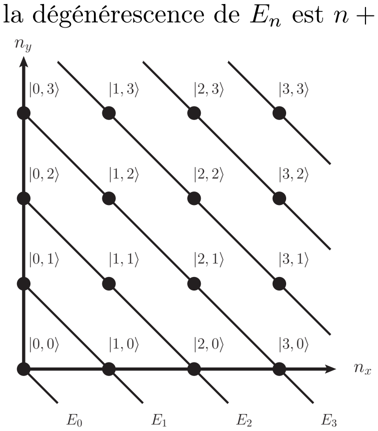
Pour avoir une description complète du système dans cette base il faut encore représenter l'ensemble des opérateurs que nous avons. Celle-ci est facile à trouver vu que nous connaissons l'action de ces opérateurs sur l'oscillateur harmonique unidimensionnel, et que les deux directions, $\hat{x}$ et $\hat{y}$, découplent :

$$\begin{array}{rclcrcl} \hat{a}_x|n_x, n_y\rangle & = & \sqrt{n_x}|n_x - 1, n_y\rangle & , & \hat{a}_y|n_x, n_y\rangle & = & \sqrt{n_y}|n_x, n_y - 1\rangle \\ \hat{a}_x^\dagger|n_x, n_y\rangle & = & \sqrt{n_x + 1}|n_x + 1, n_y\rangle & , & \hat{a}_y^\dagger|n_x, n_y\rangle & = & \sqrt{n_y + 1}|n_x, n_y + 1\rangle \end{array} \tag{14}$$

(d) Voici les trois premiers niveaux d'énergie :

Energie	Etats	Dégénérescence
$E_0 = 1\hbar\omega$	$\|0,0\rangle$	1
$E_1 = 2\hbar\omega$	$\|1,0\rangle$, $\|0,1\rangle$	2
$E_2 = 3\hbar\omega$	$\|2,0\rangle$, $\|1,1\rangle$, $\|0,2\rangle$	3

Plus généralement, les états forment une grille dans $\mathbb{N}^2$, et les états de même énergie se trouvent sur des droites de pente -1 et la dégénérescence de E_n est $n+1$.



4. Voyons maintenant écrire le moment cinétique en fonction des opérateurs $\hat{a}$ et $\hat{a}^\dagger$, ainsi que son commutateur avec le hamiltonien.

   (a) Il faut "simplement" insérer les définitions :

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z &= -i\sqrt{\tfrac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{\tfrac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}_x+\hat{a}_x^\dagger)(\hat{a}_y-\hat{a}_y^\dagger)+i\sqrt{\tfrac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{\tfrac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}_y+\hat{a}_y^\dagger)(\hat{a}_x-\hat{a}_x^\dagger) \\
&= -i\tfrac{\hbar}{2}(\hat{a}_x\hat{a}_y-\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger+\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y-\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y^\dagger-\hat{a}_y\hat{a}_x+\hat{a}_y\hat{a}_x^\dagger-\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_x+\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_x^\dagger) \\
&= -i\tfrac{\hbar}{2}(-\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger+\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y+\hat{a}_y\hat{a}_x^\dagger-\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_x) \\
&= i\hbar(\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_x-\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y)
\end{aligned} \tag{15}$$

   (b) Pour calculer le commutateur $[\hat{L}_z,\hat{H}]$, nous allons utiliser les formules de développement des commutateurs :

$$[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}]=[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{B},\hat{C}] \quad , \quad [\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B} \tag{16}$$

   Utiliser ces formules est (en général) beaucoup plus simple que développer brutalement L_zH-HL_z et le risque d'erreur de calcul est beaucoup plus faible.

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_z,\hat{H}] &= [i\hbar(\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y-\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger),\hbar\omega(\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x+\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y+1)] \\
&= i\hbar^2\omega\big\{[\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x]+[\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y,\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y]-[\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x]-[\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger,\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y]\big\} \\
&\quad +i\hbar\omega\underbrace{[\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y,1]}_{=0}-i\hbar\omega\underbrace{[\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger,1]}_{=0} \\
&= i\hbar^2\omega\left\{\hat{a}_x^\dagger\underbrace{[\hat{a}_y,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x]}_{=0}+[\hat{a}_x^\dagger,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x]\hat{a}_y\right\} \\
&\quad +i\hbar^2\omega\left\{\hat{a}_x^\dagger[\hat{a}_y,\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y]+\underbrace{[\hat{a}_x^\dagger,\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y]\hat{a}_y}_{=0}\right\} \\
&\quad -i\hbar^2\omega\left\{\hat{a}_x\underbrace{[\hat{a}_y^\dagger,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x]}_{=0}+[\hat{a}_x,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x]\hat{a}_y^\dagger\right\} \\
&\quad -i\hbar^2\omega\left\{\hat{a}_x[\hat{a}_y^\dagger,\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y]+\underbrace{[\hat{a}_x,\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y]\hat{a}_y^\dagger}_{=0}\right\} \\
&= i\hbar^2\omega\big\{[\hat{a}_x^\dagger,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x]\hat{a}_y+\hat{a}_x^\dagger[\hat{a}_y,\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y]-[\hat{a}_x,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x]\hat{a}_y^\dagger-\hat{a}_x[\hat{a}_y^\dagger,\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y]\big\}
\end{aligned} \tag{17}$$

   Il reste à évaluer les commutateurs $[\hat{a}_x^\dagger,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x]$, $[\hat{a}_y,\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y]$, $[\hat{a}_x,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x]$ et $[\hat{a}_y^\dagger,\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y]$, qui se calculent très simplement :

$$\begin{aligned}
[\hat{a}_x^\dagger,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x] &= \underbrace{[\hat{a}_x^\dagger,\hat{a}_x^\dagger]}_{=0}\hat{a}_x+\hat{a}_x^\dagger\underbrace{[\hat{a}_x^\dagger,\hat{a}_x]}_{=-1}=-\hat{a}_x^\dagger \\
[\hat{a}_x,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x] &= \underbrace{[\hat{a}_x,\hat{a}_x^\dagger]}_{=+1}\hat{a}_x+\hat{a}_x^\dagger\underbrace{[\hat{a}_x,\hat{a}_x]}_{=0}=+\hat{a}_x
\end{aligned} \tag{18}$$

   Nous avons bien sûr en changeant les indices $[\hat{a}_y^\dagger,\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y]=-\hat{a}_y^\dagger$ et $[\hat{a}_y,\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y]=+\hat{a}_y$. En remplaçant dans l'expression du commutateur on a finalement :

$$[\hat{L}_z,\hat{H}]=i\hbar^2\omega\big\{-\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y+\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y-\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger-\hat{a}_x(-\hat{a}_y^\dagger)\big\}=0$$

   donc $\hat{L}_z$ et $\hat{H}$ commutent.

(c) Survol : Le fait que les deux opérateurs commutent implique qu'il est possible de définir une base dans laquelle les deux sont diagonaux. Par contre nous n'avons aucune garantie que la base que nous avons définie, $\{|n_x, n_y\rangle\}$, diagonalise $\hat{L}_z$. Pour comprendre quelle est la situation, nous allons écrire $\hat{H}$ et $\hat{L}_z$ sous forme matricielle.

On notera encore que $[\hat{H}_{x,y}, \hat{L}_z] \neq 0$, on ne peut donc pas identifier les états par n_x, n_y et l_z.

— Avec la base $\{|n_x, n_y\rangle\}$ ordonnée comme suit :

$$\{|0,0\rangle, |1,0\rangle, |0,1\rangle, |2,0\rangle, |1,1\rangle, |0,2\rangle, \dots\} \tag{19}$$

la représentation matricielle des opérateurs est donnée par (voir la suite pour les détails) :

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\begin{array}{c|cc|ccc|c} 1 & & & & & & \\ \hline & 2 & 0 & & & & \\ & 0 & 2 & & & & \\ \hline & & & 3 & 0 & 0 & \\ & & & 0 & 3 & 0 & \\ & & & 0 & 0 & 3 & \\ \hline & & & & & & \ddots \end{array}\right) \tag{20}$$

$$\hat{L}_z = \hbar \left(\begin{array}{c|cc|ccc|c} 0 & & & & & & \\ \hline & 0 & -i & & & & \\ & i & 0 & & & & \\ \hline & & & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \\ & & & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{2} & \\ & & & 0 & i\sqrt{2} & 0 & \\ \hline & & & & & & \ddots \end{array}\right) \tag{21}$$

On observe que $\hat{L}_z$ n'est pas diagonale. Elle est diagonale par blocs, comme on pouvait s'y attendre vu qu'elle commute avec $\hat{H}$.

— Pour avoir une base dans laquelle les deux opérateurs sont diagonaux il faut diagonaliser chaque espace propre, chaque bloc. Ceci sera fait en détails dans la suite, et le résultat est la base $\{|E_n, l_z\rangle\}$, que nous choisissons d'ordonner comme suit :

$$\{|E_0, 0\rangle, |E_1, +\hbar\rangle, |E_1, -\hbar\rangle, |E_2, +2\hbar\rangle, |E_2, 0\rangle, |E_2, -2\hbar\rangle, \dots\} \tag{22}$$

Représentés dans cette base, les deux opérateurs sont, par construction, simultanément diagonaux :

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\begin{array}{c|cc|ccc|c} 1 & & & & & & \\ \hline & 2 & 0 & & & & \\ & 0 & 2 & & & & \\ \hline & & & 3 & 0 & 0 & \\ & & & 0 & 3 & 0 & \\ & & & 0 & 0 & 3 & \\ \hline & & & & & & \ddots \end{array}\right) \tag{23}$$

$$\hat{L}_z = \hbar \left(\begin{array}{c|cc|ccc|c} 0 & & & & & & \\ \hline & +1 & 0 & & & & \\ & 0 & -1 & & & & \\ \hline & & & +2 & 0 & 0 & \\ & & & 0 & 0 & 0 & \\ & & & 0 & 0 & -2 & \\ \hline & & & & & & \ddots \end{array}\right) \tag{24}$$

En détail : ici nous explicitons les calculs nécessaires pour la procédure de diagonalisation définie ci-dessus.

— Pour le premier niveau d'énergie c'est trivial, vu qu'il n'y a qu'un état :

$$\hat{L}_z|0,0\rangle = 0 \tag{25}$$

— Pour E_1 nous avons :

$$\begin{aligned} \hat{L}_z|1,0\rangle &= i\hbar|0,1\rangle \\ \hat{L}_z|0,1\rangle &= -i\hbar|1,0\rangle \end{aligned} \tag{26}$$

On peut essayer de combiner ces états à la main, mais la façon systématique est de transcrire ce problème sous forme de matrice à diagonaliser. En choisissant comme base $\{|1,0\rangle, |0,1\rangle\}$, l'action de $\hat{L}_z$ sur ce sous-espace propre est donc définie par la matrice :

$$L_z\big|_{E_1} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{27}$$

Les vecteurs propres sont :

$$\begin{aligned} |E_1, L_z = +\hbar\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0\rangle + i|0,1\rangle\right) \\ |E_1, L_z = -\hbar\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0\rangle - i|0,1\rangle\right) \end{aligned} \tag{28}$$

— Finalement, pour E_2 :

$$\begin{aligned} \hat{L}_z|2,0\rangle &= i\hbar\sqrt{2}|1,1\rangle \\ \hat{L}_z|1,1\rangle &= -i\hbar\sqrt{2}|2,0\rangle + i\hbar\sqrt{2}|0,2\rangle \\ \hat{L}_z|0,2\rangle &= -i\hbar\sqrt{2}|1,1\rangle \end{aligned} \tag{29}$$

et donc, avec $\{|2,0\rangle, |1,1\rangle, |0,2\rangle\}$ comme base :

$$L_z\big|_{E_2} = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \tag{30}$$

ce qui conduit aux vecteurs propres :

$$\begin{aligned} |E_2, L_z = +2\hbar\rangle &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -i \\ \sqrt{2} \\ i \end{pmatrix} &= \ldots \\ |E_2, L_z = 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} &= \ldots \\ |E_2, L_z = -2\hbar\rangle &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} i \\ \sqrt{2} \\ -i \end{pmatrix} &= \ldots \end{aligned} \tag{31}$$

5. On commence par chercher les relations de commutation, qui sont données par

$$\begin{aligned} [\hat{a}_d, \hat{a}_d^\dagger] &= \tfrac{1}{2}(\underbrace{[\hat{a}_x, \hat{a}_x^\dagger]}_{=1} + i\underbrace{[\hat{a}_x, \hat{a}_y^\dagger]}_{=0} - i\underbrace{[\hat{a}_y, \hat{a}_x^\dagger]}_{=0} - i\underbrace{[\hat{a}_y, \hat{a}_y^\dagger]}_{=+1}) = +1 \\ [\hat{a}_g, \hat{a}_g^\dagger] &= \tfrac{1}{2}(\underbrace{[\hat{a}_x, \hat{a}_x^\dagger]}_{=1} - i\underbrace{[\hat{a}_x, \hat{a}_y^\dagger]}_{=0} + i\underbrace{[\hat{a}_y, \hat{a}_x^\dagger]}_{=0} - i^2\underbrace{[\hat{a}_y, \hat{a}_y^\dagger]}_{=+1}) = +1 \end{aligned} \tag{32}$$

Et les termes croisés s'annulent : $[\hat{a}_g, \hat{a}_d^\dagger] = [\hat{a}_g, \hat{a}_d] = 0$. On se retrouve donc à nouveau avec deux oscillateurs harmoniques indépendants.

On peut exprimer $\hat{H}$:

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \hbar\omega(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1) \\
&= \frac{\hbar\omega}{2}((a_d^\dagger + a_g^\dagger)(a_d + a_g) + (-ia_d^\dagger + ia_g^\dagger)(ia_d - ia_g) + 2) \\
&= \frac{\hbar\omega}{2}(a_d^\dagger a_d + a_g^\dagger a_g + a_d^\dagger a_d + a_g^\dagger a_g + 2) \\
&= \hbar\omega(\hat{N}_d + \hat{N}_g + 1)
\end{aligned} \tag{33}$$

et $\hat{L}_z$:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z &= i\hbar(a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y) \\
&= \frac{i\hbar}{2}((a_d + a_g)(-ia_d^\dagger + ia_g^\dagger) - (a_d^\dagger + a_g^\dagger)(ia_d - ia_g)) \\
&= \frac{\hbar}{2}(a_d a_d^\dagger - a_g a_g^\dagger + a_d^\dagger a_d - a_g^\dagger a_g) \\
&= +\hbar(\hat{N}_d - \hat{N}_g)
\end{aligned} \tag{34}$$

en fonction de $\hat{N}_g$ et $\hat{N}_d$.
En introduisant :

$$\hat{N} = \hat{N}_g + \hat{N}_d \quad , \quad \hat{\Delta} = \hat{N}_d - \hat{N}_g \tag{35}$$

on peut encore simplifier ces expressions :

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + 1) \quad , \quad \hat{L}_z = \hbar\hat{\Delta} \tag{36}$$

Dès lors, le plus naturel est d'identifier les états en fonction de $\hat{N}$ et $\hat{\Delta}$, $|n, d\rangle$. n est un nombre entier, et d peut prendre toutes les valeurs entre $-n$ et n par pas de 2. La dégénérescence du niveau n est donnée par $n+1$. Pour les trois premiers niveaux d'énergie on a donc :
— $n = 0$, $d = 0$, $E_0 = \hbar\omega$
— $n = 1$, $d = -1, +1$, $E_1 = 2\hbar\omega$
— $n = 2$, $d = -2, 0, +2$, $E_2 = 3\hbar\omega$
Ce réarrangement des états propres du hamiltonien permet donc une lecture facilitée de l'énergie et de la dégénérescence de chaque espace propre. Il n'est pas sans rappeler ce qui se fait pour l'atome d'Hydrogène, ou chaque état d'énergie (s,p,d,f,...) a une dégénérescence que l'on qualifie également par $\hat{L}_z$ (en plus, il y a évidemment le spin de l'électron).

On notera encore que $\hat{a}_g$ et $\hat{a}_d$ qui ont été introduits ici sont les analogues des polarisations gauche et droite du champ électromagnétique. Ceci n'a rien d'étonnant vu que l'hélicité est la projection du moment cinétique sur une direction particulière.