Chapitre IV : L'oscillateur harmonique (à une dimension)

I) Motivations et importance de l'oscillateur harmonique en physique

Développement d'un potentiel quelconque autour de la position d'équilibre

II) L'oscillateur harmonique en Mécanique classique

III) L'oscillateur harmonique en Mécanique quantique

Utilisation des règles de quantification et du principe de correspondance

IV) Etude des niveaux d'énergie: valeurs propres de $\hat{H}$

Les opérateurs création $\hat{a}^+$, annihilation $\hat{a}$ et $\hat{N}$

Dégénérescence des valeurs propres. Propriétés des vecteurs propres

Fonctions d'ondes correspondant aux états propres

V) Discussion physique

Relation d'incertitude.

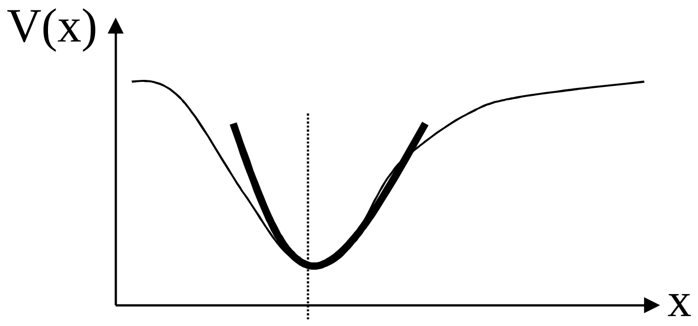
Annexes 1 et 2

Chapitre IV : L'oscillateur harmonique (à une dimension)

I) Motivations et importance de l'oscillateur harmonique en Physique

1) « Petits » mouvements par rapport à une position d'équilibre

$\longrightarrow$ Le potentiel (dans ce chapitre, on appellera par abus « potentiel » l'énergie potentielle du système) est localement assimilable à une parabole : Parabole « osculatrice »



position d'équilibre x_0

V(x) est localement (autour de x_0) approché par un potentiel harmonique

du type $V(x) \approx V(x_0) + \underbrace{V'(x_0)}_{0}\left(x - x_0\right) + \frac{1}{2}V''(x_0)\left(x - x_0\right)^2$ (développement limité)

On peut ainsi traiter les problèmes des petits mouvements de vibration :

→ des atomes au sein de la molécule : ex molécule diatomique

On fait alors apparaître les niveaux d'énergie quantifiés de vibration de la molécule

Mise en évidence expérimentale par spectroscopie infra-rouge

Ordre de grandeur : l'énergie entre deux niveaux de vibration correspond à une longueur d'onde de 12 µm

→ des atomes au sein d'un matériau solide cristallin

Mise en évidence expérimentale par ex par spectroscopie Raman

Écart entre niveaux de vibration dans GaAs correspond à une longueur d'onde de l'ordre de 35 µm

On introduit une quasi-particule appelée phonon dont le quantum d'énergie correspond à l'écart d 'énergie entre 2 niveaux successifs de vibration (voir plus loin)

2) Etude du champ électromagnétique

On peut montrer que le champ électromagnétique est d'un point de vue formel équivalent à un ensemble d'oscillateurs harmoniques indépendants

Lorsqu'on traite ces oscillateurs en mécanique quantique, on fait apparaître des niveaux d'énergie quantifiés pour chaque oscillateur.

On introduit un corpuscule appelé photon associé à chaque oscillateur
Le quantum d'énergie du photon est égal à l'écart d'énergie entre deux niveaux successifs de l'oscillateur en question

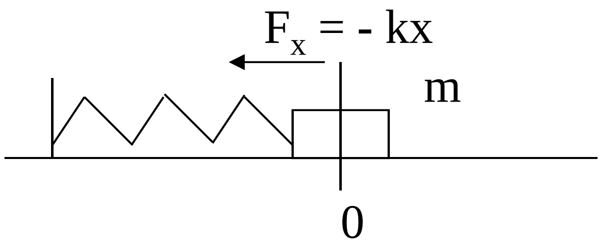
II) L'oscillateur harmonique en mécanique classique

Particule de masse m possédant une énergie potentielle de la forme $\boxed{V(x) = \frac{1}{2}kx^2}$

k est une constante réelle positive

La particule subit une force $\boxed{F_x = -\frac{dV}{dx} = -kx}$

Ex: masse m liée à un ressort (k est alors la raideur du ressort)



Lorsque l'on néglige les frottements, le système est conservatif, c'est à dire que l'énergie totale du système est constante au cours du temps.

Le mouvement de la particule est régi par le principe fondamental de la dynamique

$$\frac{dp_x}{dt} = m\frac{d^2x}{dt^2} = F_x = -kx$$

Équation différentielle du second ordre à coefficients constants solution $\longrightarrow$ $\boxed{x(t) = x_m \cos(\omega t - \varphi)}$ avec $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

x_m et φ sont déterminées par les conditions initiales (vitesse, position)

L'énergie totale vaut : $E = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} k x^2 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2 \boxed{= \frac{1}{2} m \omega^2 x_m^2}$

Plus l'amplitude du mouvement est grande, plus l'énergie totale est grande

III) L'oscillateur harmonique en mécanique quantique

Pour exprimer le Hamiltonien quantique de l'oscillateur, on remplace les grandeurs

p_X et x par les observables $\hat{P}_X$ et $\hat{X}$ qui vérifient $\left[\hat{X}, \hat{P}_X \right] = i\hbar \hat{I}d$

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{P}_X^2}{2m} + \frac{1}{2} k \hat{X}^2 = \frac{\hat{P}_X^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{X}^2}$$

Ce Hamiltonien est indépendant du temps

Cherchons les états stationnaires $|\varphi\rangle$

Cela revient à résoudre : $\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$

En représentation $|x^{1D}\rangle$, cela s 'écrit : $\langle x^{1D}|\hat{H}|\varphi\rangle = \langle x^{1D}|E|\varphi\rangle$

Principe de correspondance

$$\longrightarrow \boxed{\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\varphi(x) = E\varphi(x)}$$

Équation différentielle du second ordre à coefficients non constants

IV) Etude des niveaux d'énergie : valeurs propres de $\hat{H}$

1) Résolution: valeurs propres

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_X^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2$$

changement de variable: on définit les opérateurs sans dimension

$$\boxed{\hat{\aleph} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X} \quad \text{et} \quad \hat{\wp} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\hat{P}_X}$$

On a $\boxed{[\hat{\aleph}, \hat{\wp}] = i\hat{I}d}$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{\aleph}^2 + \hat{\wp}^2\right)$$

Idée: si $\hat{\aleph}$ et $\hat{\wp}$ étaient des opérateurs qui commutent, on pourrait écrire

$$\left(\hat{\aleph}^2 + \hat{\wp}^2\right) = \left(\hat{\aleph} - i\,\hat{\wp}\right)\left(\hat{\aleph} + i\,\hat{\wp}\right)$$

Comme $\left[\hat{\aleph}, \hat{\wp}\right] = i\hat{I}d$, on ne peut pas l’écrire mais on va voir que

l’introduction d’opérateurs proportionnels à $\left(\hat{\aleph} - i\,\hat{\wp}\right)$ et $\left(\hat{\aleph} + i\,\hat{\wp}\right)$

permet de simplifier considérablement la résolution de l ’équation aux valeurs propres

On pose donc :

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\aleph} + i\,\hat{\wp}\right) \\ \hat{a}^{+} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\aleph} - i\,\hat{\wp}\right) \end{aligned}}$$

Operateur échelle annihilation

Operateur échelle création

$\hat{\aleph}$ et $\hat{\wp}$ étant hermitiques, $\hat{a}$ et $\hat{a}^{+}$ ne le sont pas, mais sont adjoints l’un de l’autre

On peut inverser les relations précédentes :

$$\hat{\aleph} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}^{+} + \hat{a}\right)$$

$$\hat{\wp} = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}^{+} - \hat{a}\right)$$

On a $\boxed{\left[\hat{a}, \hat{a}^{+}\right] = \hat{I}d}$

car : $\left[\hat{a}, \hat{a}^{+}\right] = \frac{1}{2}\left[\hat{\aleph} + i\,\hat{\wp}, \hat{\aleph} - i\,\hat{\wp}\right] = \frac{i}{2}\left[\hat{\wp}, \hat{\aleph}\right] - \frac{i}{2}\left[\hat{\aleph}, \hat{\wp}\right] = \frac{i}{2}(-i\hat{I}d) - \frac{i}{2}(i\hat{I}d)$

Nous allons exprimer $\frac{1}{2}(\hat{\aleph}^{2} + \hat{\wp}^{2})$ en fonction de $\hat{a}^{+}\hat{a}$; développons $\hat{a}^{+}\hat{a}$:

$$\hat{a}^{+}\hat{a} = \frac{1}{2}\left(\hat{\aleph} - i\,\hat{\wp}\right)\left(\hat{\aleph} + i\,\hat{\wp}\right) = \frac{1}{2}(\hat{\aleph}^{2} + \hat{\wp}^{2} + i\,\hat{\aleph}\,\hat{\wp} - i\,\hat{\wp}\,\hat{\aleph}) = \frac{1}{2}(\hat{\aleph}^{2} + \hat{\wp}^{2} - \hat{I}d)$$

$$\longrightarrow \quad \frac{1}{2}(\hat{\aleph}^{2} + \hat{\wp}^{2}) = \hat{a}^{+}\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{I}d$$

$$\longrightarrow \quad \hat{H} = \hbar\omega\,(\hat{a}^{+}\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{I}d)$$

On pose $\boxed{\hat{N} = \hat{a}^{+}\hat{a}}$

$\hat{N}$ est hermitique : $\hat{N}^{+} = \hat{N} \quad \left((\hat{a}^{+}\hat{a})^{+} = \hat{a}^{+}(\hat{a}^{+})^{+} = \hat{a}^{+}\hat{a} \right)$

$\hat{H}$ s'écrit alors $\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\,(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{I}d)}$

Les vecteurs propres de $\hat{H}$ sont aussi les vecteurs propres de $\hat{N}$

Les valeurs propres de $\hat{H}$ sont égales à $\hbar\omega$ fois celles de $\hat{N}$ (notées ν) auxquelles on ajoute $\dfrac{\hbar\omega}{2}$

$$\boxed{E_\nu = \hbar\omega(\nu + \frac{1}{2})}$$

ν est réel

On peut démontrer que (voir Annexe 1) :

Les valeurs propres de $\hat{N}$ sont entières et notées n

Les vecteurs propres sont notés $|\varphi_n\rangle$

$\hat{N}$ est souvent appelé « opérateur numéro »

$$\boxed{\hat{N}|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle}$$

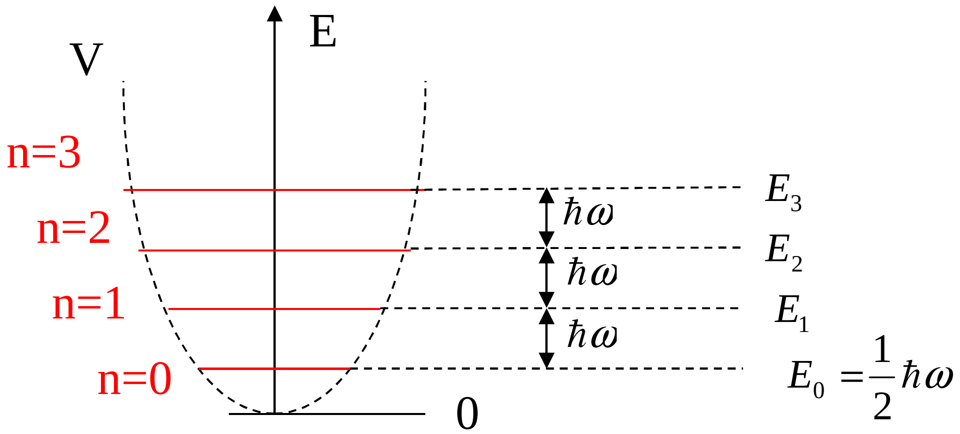
→ Les valeurs propres de $\hat{H}$ de l'oscillateur harmonique sont :

$$\boxed{E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})}$$

n est entier : 0,1,2…

On pourrait démontrer que ces valeurs propres sont **non-dégénérées**

$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \longleftrightarrow$ un seul vecteur propre $|\varphi_n\rangle$



2) Retour sur les opérateurs création et annihilation

- On peut également démontrer que (voir Annexe 2) :

$$\hat{a}^{+}\left|\varphi_n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|\varphi_{n+1}\right\rangle \quad \text{(a)}$$

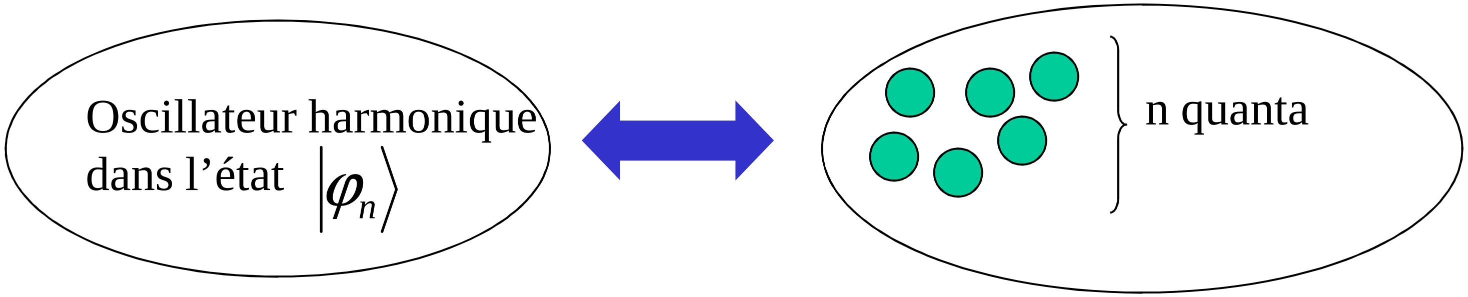
$$\hat{a}\left|\varphi_n\right\rangle = \sqrt{n}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle \quad \text{(b)}$$

$$\hat{a}\left|\varphi_0\right\rangle = 0 \quad \text{(c)}$$

- Image en terme de quanta d'énergie

Supposons le système dans un état $|\varphi_n\rangle$ associé à la valeur propre $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$

$\boxed{\text{L'énergie de l'oscillateur harmonique dans l'état } |\varphi_n\rangle \text{ est égale (à } \frac{\hbar\omega}{2} \text{ près) à celle d'un système comportant n quanta d'énergie } \hbar\omega}$

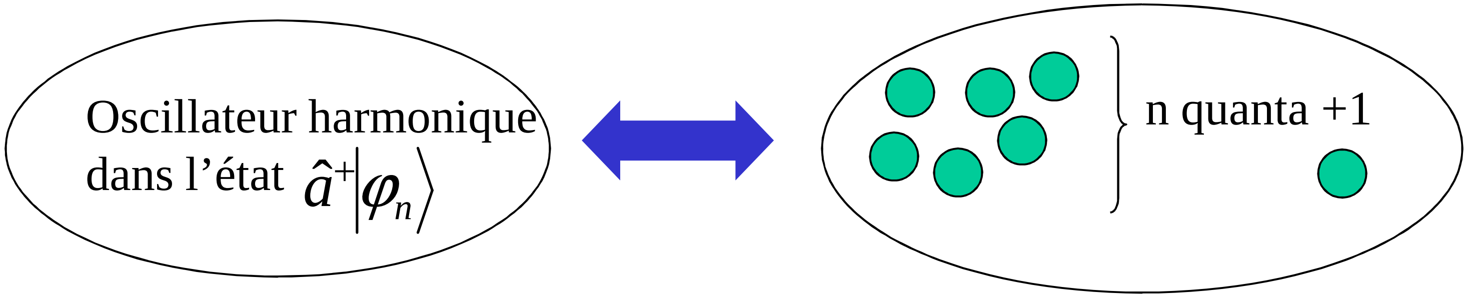


i) Rôle de l'opérateur création $\hat{a}^+$

Appliquons l'opérateur $\hat{a}^+$ au ket $|\varphi_n\rangle$

L'état $\hat{a}^+|\varphi_n\rangle$ est vecteur propre de $\hat{H}$ associé à la valeur propre $E_{n+1} = \hbar\omega\left[(n+1)+\frac{1}{2}\right]$

L'énergie de l'oscillateur harmonique dans l'état $\hat{a}^+|\varphi_n\rangle$ est égale (à $\frac{\hbar\omega}{2}$ près) à celle d'un système comportant n+1 quanta d'énergie $\hbar\omega$



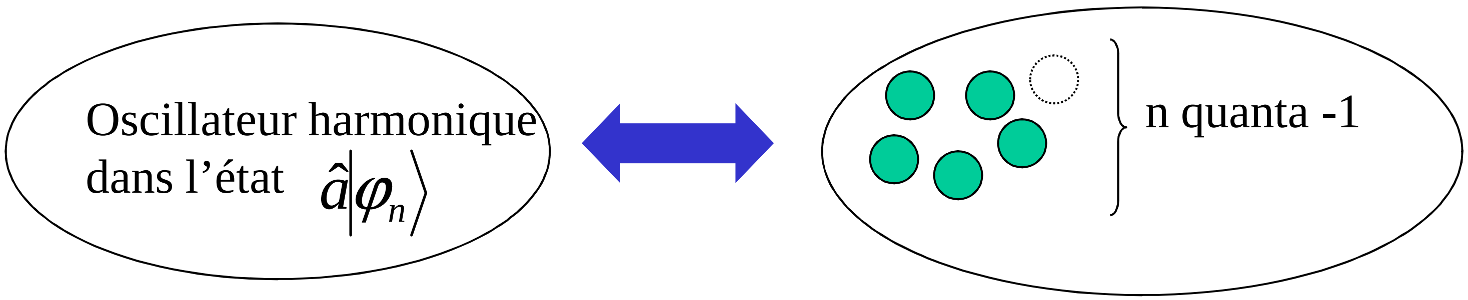
L'application de l'opérateur $\hat{a}^+$ correspond à la « création » d'un quantum d'énergie $\hbar\omega$

ii) Rôle de l'opérateur annihilation $\hat{a}$

Appliquons l'opérateur $\hat{a}$ au ket $|\varphi_n\rangle$

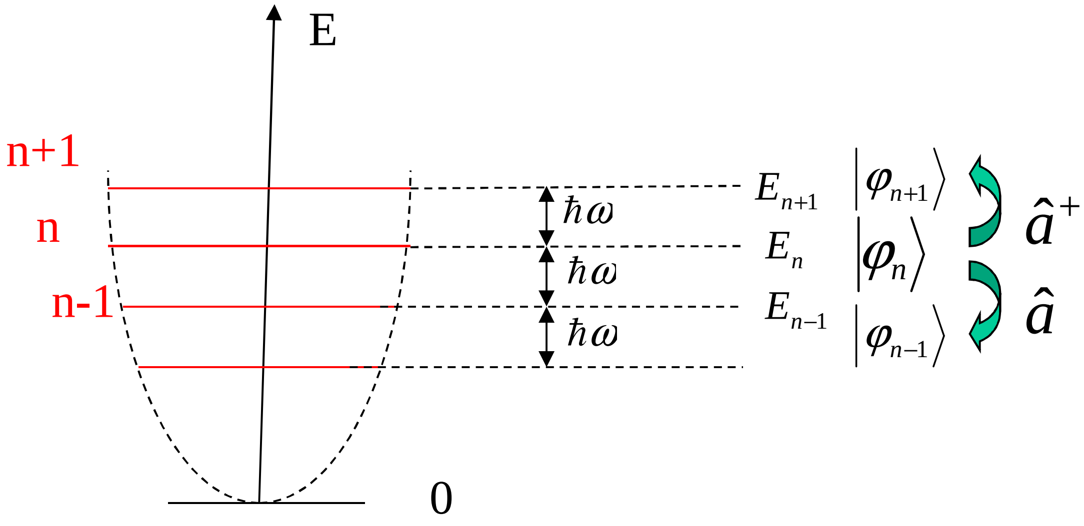
L'état $\hat{a}|\varphi_n\rangle$ est vecteur propre de $\hat{H}$ associé à la valeur propre $E_{n-1}=\hbar\omega\left[(n-1)+\frac{1}{2}\right]$

L'énergie de l'oscillateur harmonique dans l'état $\hat{a}|\varphi_n\rangle$ est égale (à $\frac{\hbar\omega}{2}$ près) à celle d'un système comportant n-1 quanta d'énergie $\hbar\omega$



L'application de l'opérateur $\hat{a}$ correspond à « l'annihilation» d'un quantum d'énergie $\hbar\omega$

Les opérateurs création et annihilation sont souvent appelés opérateurs « échelle »



Les opérateurs création et annihilation nous ont permis de trouver de manière simple les valeurs propres de $\hat{H}$

Ils jouent un rôle très important, par exemple dans le domaine de l'optique quantique et de la physique du solide

3) Etats propres de $\hat{H}$

a) Niveau fondamental $|\varphi_0\rangle$ associé à n = 0

D'après eq (c) p12, on a: $\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\hat{P}_X\right)|\varphi_0\rangle = 0$$

En représentation $|x^{1D}\rangle$ (travail à une dimension)

$$\hat{P}_X \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{X} \longrightarrow .x$$

$$|\varphi_0\rangle \longrightarrow \langle x^{1D}|\varphi_0\rangle = \varphi_0(x)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x+\hbar\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\frac{d}{dx}\right)\varphi_0(x)=0$$

Équa diff du premier ordre

(introduction de â et â$^+$ =>simplification du pb!)

$\longrightarrow$ Solution : $\varphi_0(x)=Ce^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$

On normalise : $\int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi_0(x)|^2dx=1$ $\Rightarrow$ $C=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$ $\Rightarrow$ $\boxed{\varphi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}$

b) Fonctions d'onde $\varphi_n(x)$ correspondant aux états propres $|\varphi_n\rangle$

D'après eq (a) p12 (pour n=0), on a:

$$|\varphi_1\rangle=\hat{a}^+|\varphi_0\rangle \xrightarrow[\text{en représentation } |x^{1D}\rangle]{} \varphi_1(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x-\hbar\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\frac{d}{dx}\right)\varphi_0(x)$$

$$\longrightarrow \varphi_1(x)=\left(\frac{4}{\pi}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)\right)^{1/4}xe^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

de même, on peut calculer $\varphi_2(x)$ $\quad \varphi_2(x)=\left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{1/4}(2\frac{m\omega}{\hbar}x^2-1)e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$

de même, on pourrait calculer $\varphi_n(x)$ …

Allure des fonctions d'ondes et des densités de probabilités correspondantes pour les niveaux n = 0, 1, 2, 10 (voir feuille)

- plus n est grand (plus l'énergie totale est grande), plus l'extension spatiale de la fonction d'onde est grande ⟷ En mécanique classique, une énergie totale élevée correspond à une grande amplitude

- Lorsque n est grand (donc lorsque l'énergie totale est grande), la probabilité de présence de la particule est plus forte aux deux extrémités de l'extension spatiale de la fonction d'onde

⟷ En mécanique classique, la vitesse de la particule est nulle aux extrémités du mvt :
Elle y « passe » plus de temps

V) Discussion physique

1) Valeur moyenne et écarts quadratiques moyens des observables $\hat{P}_X$ et $\hat{X}$ dans un état $\left|\varphi_n\right\rangle$

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\hat{\aleph} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^{+})$$

$$\hat{P}_X = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\hat{\wp} = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^{+}-\hat{a})$$

$$\left\langle\varphi_n\right|\hat{X}\left|\varphi_n\right\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\langle\varphi_n\right|\hat{a}+\hat{a}^{+}\left|\varphi_n\right\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\langle\varphi_n\right|\hat{a}^{+}\left|\varphi_n\right\rangle + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\langle\varphi_n\right|\hat{a}\left|\varphi_n\right\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar(n+1)}{2m\omega}}\left\langle\varphi_n\middle|\varphi_{n+1}\right\rangle + \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}}\left\langle\varphi_n\middle|\varphi_{n-1}\right\rangle = 0$$

(Rappel: les $\left|\varphi_n\right\rangle$ constituent une base orthonormée de l'espace)

$$\left\langle\varphi_n\right|\hat{P}_X\left|\varphi_n\right\rangle = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left\langle\varphi_n\right|\hat{a}^{+}-\hat{a}\left|\varphi_n\right\rangle = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left\langle\varphi_n\right|\hat{a}^{+}\left|\varphi_n\right\rangle - \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left\langle\varphi_n\right|\hat{a}\left|\varphi_n\right\rangle$$

$$=\frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar(n+1)}{2}}\langle\varphi_n|\varphi_{n+1}\rangle-\frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar n}{2}}\langle\varphi_n|\varphi_{n-1}\rangle=0$$

Récapitulons : $\boxed{\begin{array}{l}\langle\varphi_n|\hat{X}|\varphi_n\rangle=0\\ \langle\varphi_n|\hat{P}_X|\varphi_n\rangle=0\end{array}}$ Quelque soit l'état propre $|\varphi_n\rangle$ de l'oscillateur harmonique, la position moyenne et l'impulsion moyenne sont nulles

$$\Delta X=\sqrt{\langle\hat{X}^2\rangle-\langle\hat{X}\rangle^2}=\sqrt{\langle\hat{X}^2\rangle}$$

Calcul de $\langle\hat{X}^2\rangle$ $\quad\langle\hat{X}^2\rangle=\langle\varphi_n|\hat{X}^2|\varphi_n\rangle=\langle\varphi_n|\frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}^++\hat{a})(\hat{a}^++\hat{a})|\varphi_n\rangle$

$$=\langle\varphi_n|\frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}^{+2}+\hat{a}\hat{a}^++\hat{a}^+\hat{a}+\hat{a}^2)|\varphi_n\rangle$$

$$=\langle\varphi_n|\frac{\hbar}{2m\omega}(2\hat{a}^+\hat{a}+\hat{I}d)|\varphi_n\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$$

$$\longrightarrow\quad\boxed{\Delta X=\sqrt{\langle\hat{X}^2\rangle}=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2})}}$$

de même : $\Delta P_X = \sqrt{\langle \hat{P}_X^2 \rangle - (\langle \hat{P}_X \rangle)^2} = \sqrt{\langle \hat{P}_X^2 \rangle}$

Avec $\hat{P}_X^2 = \dfrac{-m\hbar\omega}{2}(\hat{a}^{+2} - \hat{a}\hat{a}^{+} - \hat{a}^{+}\hat{a} + \hat{a}^2)$

$$\longrightarrow \boxed{\Delta P_X = \sqrt{\langle \hat{P}_X^2 \rangle} = \sqrt{m\hbar\omega(n + \frac{1}{2})}}$$

$$\longrightarrow \boxed{\Delta X \Delta P_X = \hbar(n + \frac{1}{2})}$$

Ceci est compatible avec l'inégalité de Heisenberg $\Delta X \Delta P_X \geq \dfrac{\hbar}{2}$

La borne inférieure est atteinte pour n = 0

2) L'état fondamental de l'oscillateur harmonique

En mécanique classique, l'état fondamental de l'oscillateur possède une énergie nulle : la position et la vitesse de la particule sont nulles (particule positionnée en 0 et immobile)

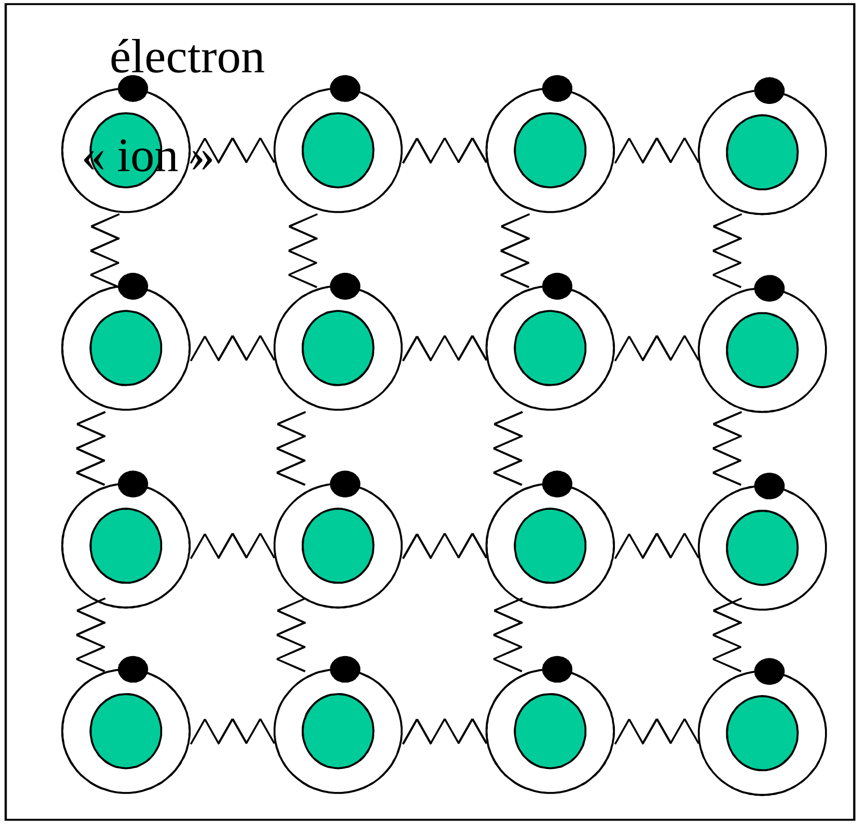
En mécanique quantique, la situation est très différente : l'état fondamental de l'oscillateur possède une énergie non nulle $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

La fonction d'onde associée possède une certaine extension spatiale caractérisée par $\Delta X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$

La différence entre les résultats classiques et quantiques est due au principe d'incertitude de Heisenberg qui **interdit de minimiser à 0 simultanément énergie cinétique (liée à l'impulsion) et énergie potentielle (liée à la position)**
L'énergie de l'état fondamental résulte donc d'un compromis pour lequel la somme de ces deux énergies est la plus faible possible

Illustration: un exemple d 'utilisation du concept d'oscillateur harmonique en physique du solide : le phonon

A) Notion de phonon



Le solide :

Réseau cristallin

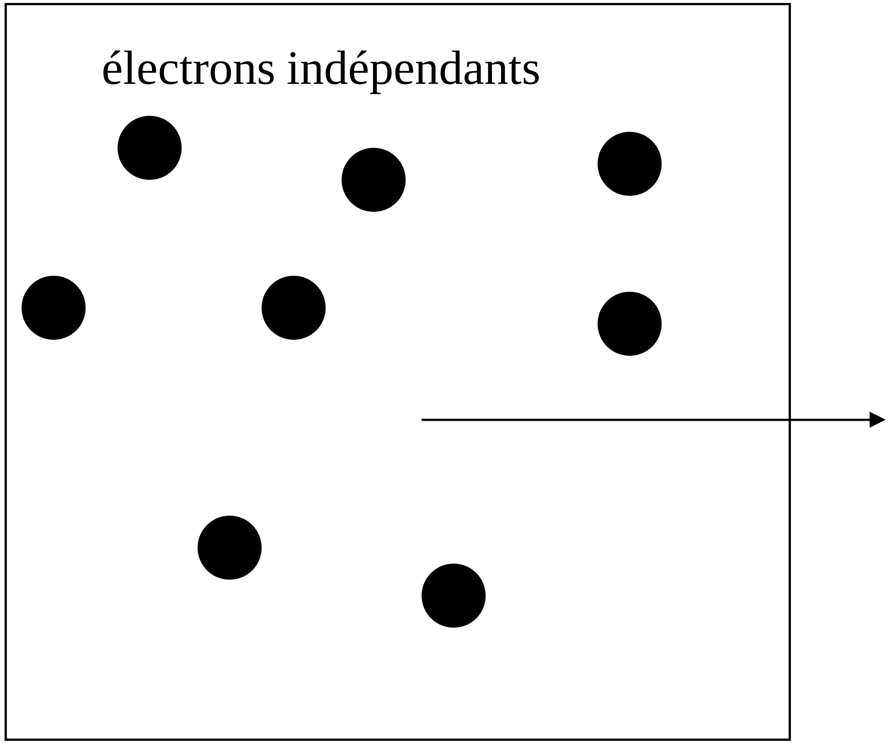
Electrons + « ions » en interaction
(« ions » = noyaux +électrons des couches profondes)

Le hamiltonien du système global s'écrit :

$$\boxed{\hat{H}=\hat{H}_e+\hat{H}_i+\hat{H}_{e-i}}$$

Description des électrons $\hat{H}_e$

En première approximation, $\hat{H}_e$ peut être vu comme décrivant un ensemble d'électrons indépendants sous l'influence d'un potentiel moyen dû aux autres électrons et aux ions du cristal, les ions du cristal étant considérés comme fixes par rapport à leur position d'équilibre



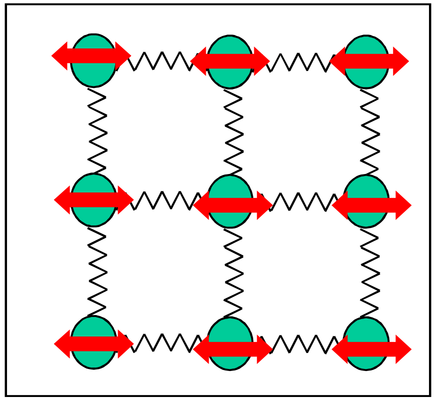
Zone dans laquelle le potentiel est périodique

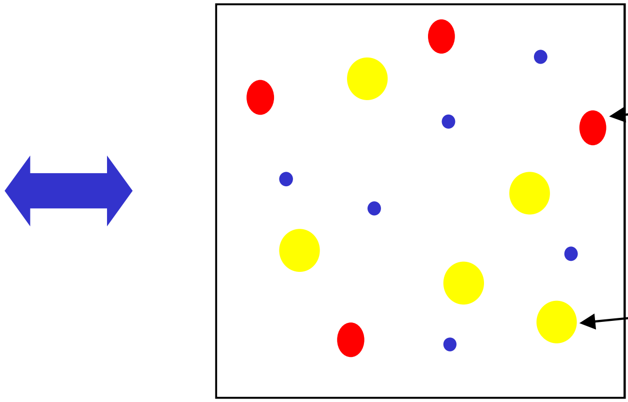
Description des ions (mouvements de vibrations couplés autour de leur position d'équilibre => ondes de vibration)

$\hat{H}_i$ décrit le système des ions en interaction. Ce système est un système d'oscillateurs harmoniques couplés. Il est possible re-écrire formellement le hamiltonien sous la forme de la somme d'hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques indépendants. Chaque oscillateur possède sa pulsation ω_α

$$\hat{H}_i = \hbar\omega_{\alpha 1}(\hat{a}^+_{\alpha 1}\hat{a}_{\alpha 1} + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_{\alpha 2}(\hat{a}^+_{\alpha 2}\hat{a}_{\alpha 2} + \frac{1}{2}) + \ldots$$

$$E_i = \hbar\omega_{\alpha 1}(n_{\alpha 1} + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_{\alpha 2}(n_{\alpha 2} + \frac{1}{2}) + \ldots$$





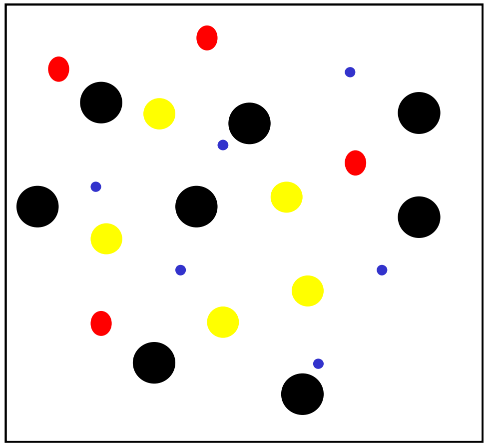
Cristal dans un état de vibration donné

L'énergie du cristal parcouru par des ondes de vibration (à gauche) est égale à une constante près à celle de l'ensemble des quanta d'énergie de la figure de droite. **Ces quanta d'énergie ou « excitations élémentaires » sont appelés phonons**

I4

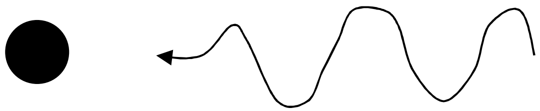
Description de l'influence des mouvements de vibration des ions (ondes de vibration) sur les électrons

$\hat{H}_{e-i}$



L'introduction des excitations élémentaires « phonons » permet de remplacer :

une vision électron-Onde de vibration



Électron

Onde de vibration

par

Vision entièrement corpusculaire : diffusion (« collision ») électron-phonon

Électron (corpuscule) ● Phonon (corpuscule)

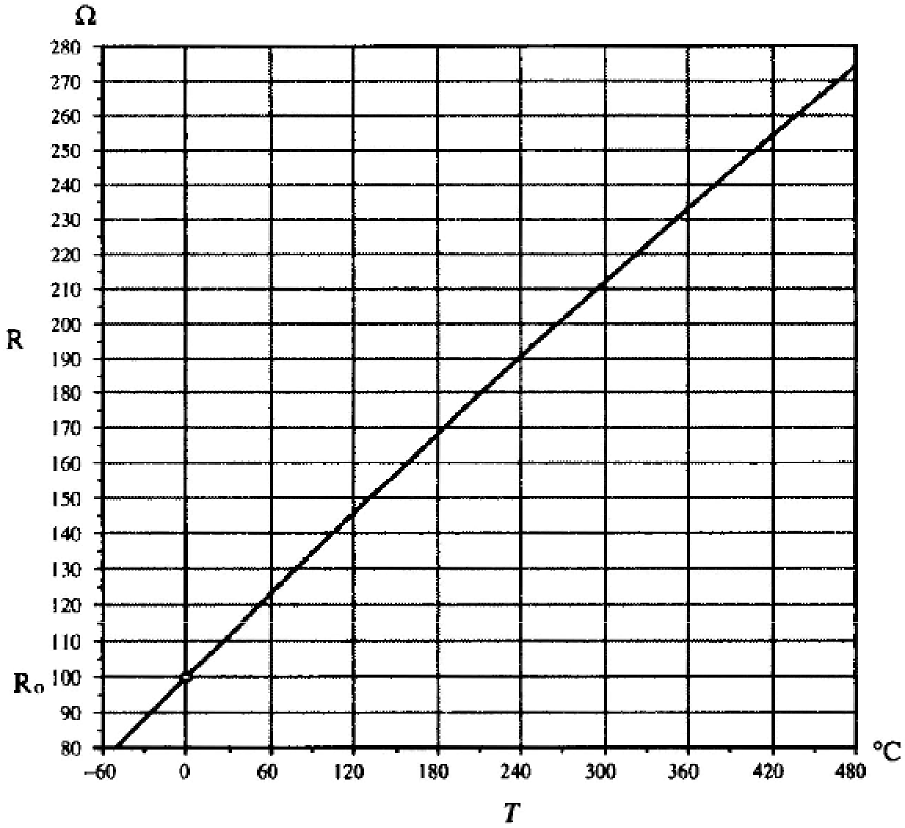
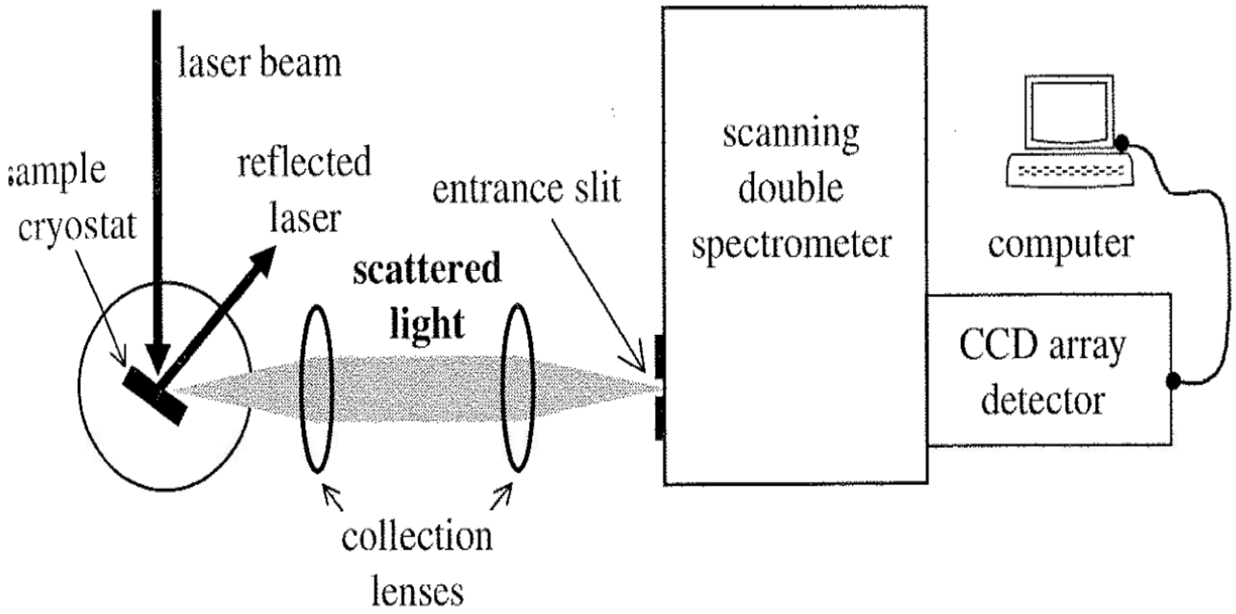


FIGURE 3.18. Resistance of platinum as function of temperature.

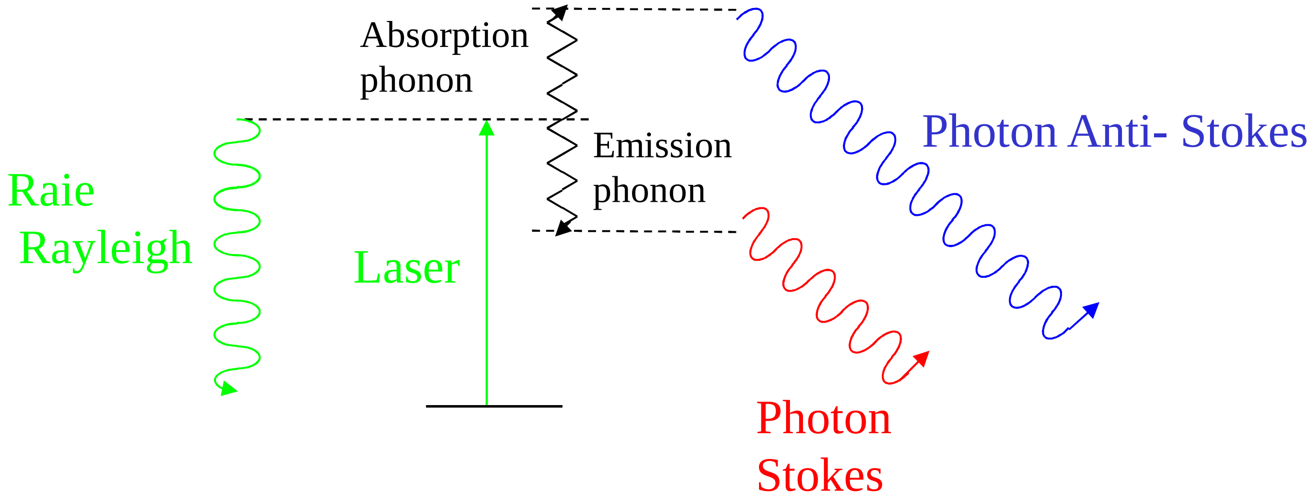
Ces diffusions sont par exemple responsables de l'augmentation de la résistivité des métaux avec la température (car augmentation de la probabilité des chocs du fait de l'augmentation du nombre de phonons avec la température)

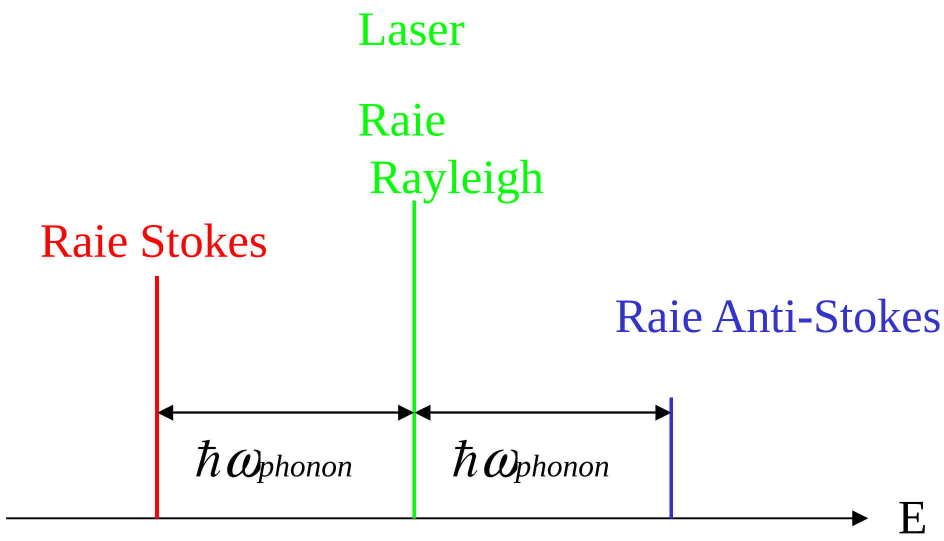
B) Comment mesurer l'énergie d'un phonon?

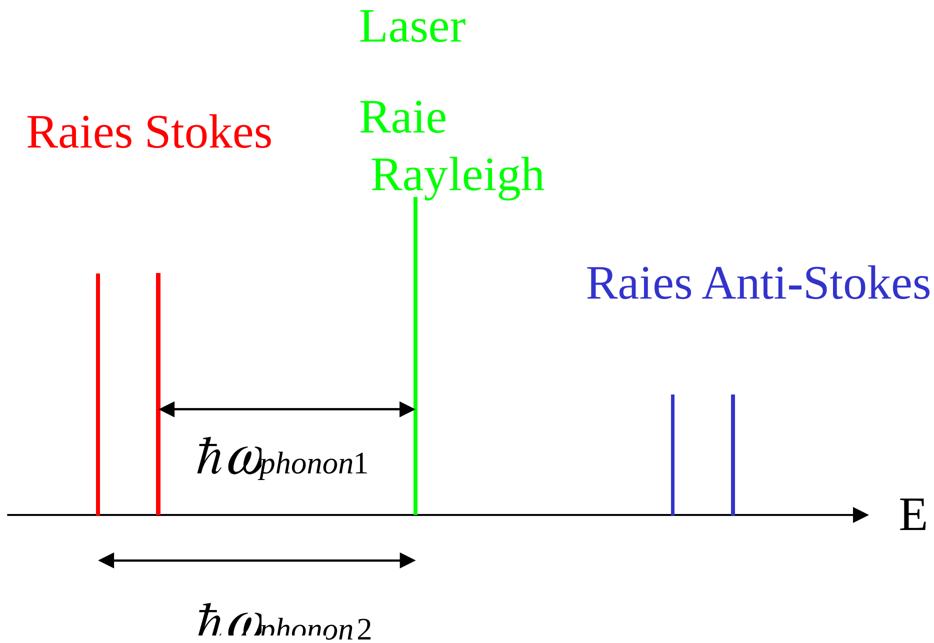
Spectroscopie Raman



Principe


Absorption
phonon
Emission
phonon
Photon Anti- Stokes
Raie
Rayleigh
Laser
Photon
Stokes


Laser
Raie
Rayleigh
Raie Stokes
Raie Anti-Stokes
$\hbar\omega_{phonon}$
$\hbar\omega_{phonon}$
E



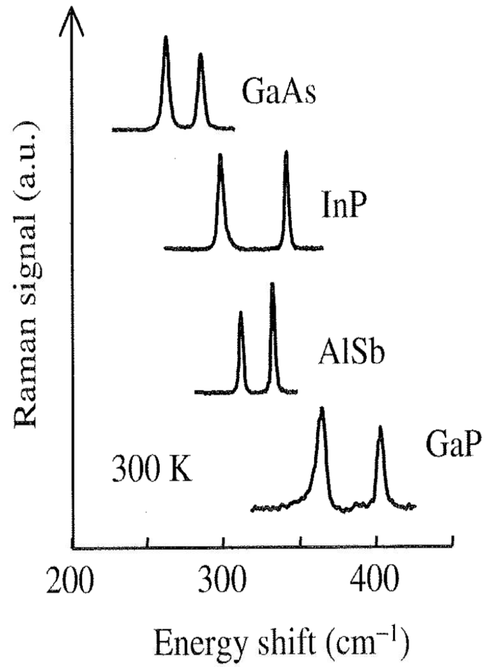


Fig. 10.11 Raman spectra for the TO and LO phonons of GaAs, InP, AlSb and GaP at 300 K using a Nd:YAG laser at 1.06 μm. The spectra are plotted against the wave number shift: 1 cm^{-1} is equivalent to an energy shift of 0.124 meV. The LO mode is the one at higher frequency. After [4], copyright 1972 Excerpta Medica Inc., reprinted with permission.

A1

Annexe1: Démonstration : valeurs propres de $\hat{H}$ de l'oscillateur harmonique :

$$\boxed{E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})}$$

n est entier : 0,1,2…

$\hat{H}$ s'écrit

$$\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\,(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{I}d)}$$

Les vecteurs propres de $\hat{H}$ sont aussi les vecteurs propres de $\hat{N}$

Les valeurs propres de $\hat{H}$ sont égales à $\hbar\omega$ fois celles de $\hat{N}$ (notées ν) auxquelles on ajoute $\dfrac{\hbar\omega}{2}$

$$\boxed{E_\nu = \hbar\omega(\nu+\frac{1}{2})}$$

ν est réel

Etude du spectre de $\hat{N}$ et de $\hat{H}$

i) **Les valeurs propres de $\hat{N}$ sont positives $\nu \geq 0$**

Soit $|\varphi_\nu\rangle$ ket propre associé à ν

Démonstration :

$$\langle\varphi_\nu|\hat{a}^+\hat{a}|\varphi_\nu\rangle = \langle\varphi_\nu|\hat{N}|\varphi_\nu\rangle = \nu\langle\varphi_\nu|\varphi_\nu\rangle = \nu\underbrace{\||\varphi_\nu\rangle\|^2}_{\geq 0}$$

$$= \left(\langle\varphi_\nu|\hat{a}^+\right)\left(\hat{a}|\varphi_\nu\rangle\right) = \underbrace{\left|\hat{a}|\varphi_\nu\rangle\right|^2}_{\geq 0}$$

$\longrightarrow \nu \geq 0$

A3

(ii) Soit $|\varphi_\nu\rangle$ ket propre non nul et soit ν valeur propre de $\hat{N}$

(*) Si ν = 0 $\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0$

(**) Si ν ≠ 0 Si $|\varphi_\nu\rangle$ ket propre de $\hat{N}$ associé à la valeur propre ν

Alors $\hat{a}|\varphi_\nu\rangle$ ket propre de $\hat{N}$ associé à la valeur propre ν-1

Démonstration :

(*) $$\left(\langle\varphi_\nu|\hat{a}^+\right)\left(\hat{a}|\varphi_\nu\rangle\right) = \left|\hat{a}|\varphi_\nu\rangle\right|^2 = \nu\left\||\varphi_\nu\rangle\right\|^2 \quad \nu = 0 \longrightarrow \hat{a}|\varphi_0\rangle = 0$$

(**)

$$\hat{N}\left(\hat{a}|\varphi_\nu\rangle\right) = (\hat{a}^+\hat{a})\hat{a}|\varphi_\nu\rangle = (\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{I}d)\hat{a}|\varphi_\nu\rangle = \hat{a}\hat{a}^+\hat{a}|\varphi_\nu\rangle - \hat{a}|\varphi_\nu\rangle$$

$$= \hat{a}\hat{N}|\varphi_\nu\rangle - \hat{a}|\varphi_\nu\rangle = \hat{a}\,\nu|\varphi_\nu\rangle - \hat{a}|\varphi_\nu\rangle = (\nu - 1)\hat{a}|\varphi_\nu\rangle$$

A4

(iii) Si $\nu \neq 0$ Si $|\varphi_\nu\rangle$ ket propre de $\hat{N}$ associé à la valeur propre ν

Alors $\hat{a}^+|\varphi_\nu\rangle$ ket propre de $\hat{N}$ associé à la valeur propre $\nu+1$

Démonstration :

$$\hat{N}\left(\hat{a}^+|\varphi_\nu\rangle\right) = (\hat{a}^+\hat{a})\hat{a}^+|\varphi_\nu\rangle = \hat{a}^+(\hat{a}\hat{a}^+)|\varphi_\nu\rangle = \hat{a}^+(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{I}d)|\varphi_\nu\rangle = \hat{a}^+(\hat{N} + \hat{I}d)|\varphi_\nu\rangle$$

$$= (\nu+1)\hat{a}^+|\varphi_\nu\rangle$$

(iv) Montrons que **ν est entier**

démonstration par l'absurde

Supposons que $\nu \notin$ N, alors $\exists$ n $\in$ N n < ν < n+1

En appliquant l'opérateur â (n+1) fois au ket $|\varphi_\nu\rangle$

$|\varphi_\nu\rangle$ est ket propre de $\hat{N}$ associé à la valeur propre ν

$\longrightarrow$ $\hat{a}|\varphi_\nu\rangle$ est ket propre associé à la valeur propre ν-1

A5

On l'applique une deuxième fois

$\hat{a}\left(\hat{a}\left|\varphi_\nu\right\rangle\right)$ est ket propre associé à la valeur propre ν-2

On l'applique une n+1 ième fois

$(\hat{a})^{n+1}\left|\varphi_\nu\right\rangle$ est ket propre associé à la valeur propre ν-(n+1)

Or ν-(n+1)< 0 : c'est impossible!!!

$\longrightarrow$ ν est entier

Conséquence : Les valeurs propres de $\hat{N}$ sont entières et notées n
Les vecteurs propres sont notés $\left|\varphi_n\right\rangle$
$\hat{N}$ est souvent appelé « opérateur numéro »

$$\boxed{\hat{N}\left|\varphi_n\right\rangle = n\left|\varphi_n\right\rangle}$$

$\longrightarrow$ Les valeurs propres de $\hat{H}$ de l'oscillateur harmonique sont :

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)}$$

Annexe2: Construction et propriétés des $|\varphi_n\rangle$ kets propres normés de $\hat{H}$

on sait que

$$\boxed{\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}$$

Q: comment construire les états propres suivant pour n > 1 ? par récurrence

$|\varphi_0\rangle$ est connu et normé : $\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$

on sait que $\hat{a}^+|\varphi_0\rangle$ est vecteur propre de $\hat{H}$ associé à la valeur propre correspondant à n = 1

Or les valeur propres de $\hat{H}$ sont non-dégénérées, donc $|\varphi_1\rangle$ est nécessairement proportionnel à $\hat{a}^+|\varphi_0\rangle$

B2

$\Rightarrow$ $$|\varphi_1\rangle = D\hat{a}^+|\varphi_0\rangle$$ avec D tel que $\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = 1$

$$\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = |D|^2\langle\varphi_0|\hat{a}\hat{a}^+|\varphi_0\rangle = |D|^2\langle\varphi_0|\hat{I}d + \hat{a}^+\hat{a}|\varphi_0\rangle$$

$$= |D|^2\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle + |D|^2\langle\varphi_0|\hat{a}^+\hat{a}|\varphi_0\rangle = |D|^2 + |D|^2\underbrace{\langle\varphi_0|\hat{N}|\varphi_0\rangle}_{0}$$

$$= |D|^2 = 1$$ $\Rightarrow$ D = 1 (à un facteur de phase près)

$\Rightarrow$ $$|\varphi_1\rangle = \hat{a}^+|\varphi_0\rangle$$

On peut refaire le même raisonnement à l'ordre n: on suppose que l'on connaît $|\varphi_{n-1}\rangle$ et que cet état est normé $\langle\varphi_{n-1}|\varphi_{n-1}\rangle = 1$

Alors $|\varphi_n\rangle = K\hat{a}^+|\varphi_{n-1}\rangle$ avec K tel que $\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = 1$

$$\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = |K|^2\langle\varphi_{n-1}|\hat{a}\hat{a}^+|\varphi_{n-1}\rangle = |K|^2 + |K|^2\langle\varphi_{n-1}|\hat{N}|\varphi_{n-1}\rangle$$

$$= |K|^2 + |K|^2(n-1) = n|K|^2$$ $\Rightarrow$ K = $1/n^{1/2}$ (à un facteur de phase près)

$\Rightarrow$ $$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^+|\varphi_{n-1}\rangle$$

B3

(i) $\left|\varphi_n\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^+\left|\varphi_{n-1}\right\rangle$ $\longrightarrow$ (ii) $\left|\varphi_{n-1}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n-1}}\hat{a}^+\left|\varphi_{n-2}\right\rangle$

(ii) dans (i) $\longrightarrow$ $\left|\varphi_n\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}\sqrt{n-1}}\hat{a}^+\hat{a}^+\left|\varphi_{n-2}\right\rangle$

Etc… $\longrightarrow$ $\left|\varphi_n\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^+\right)^n\left|\varphi_0\right\rangle$

Récapitulons :

$$\boxed{\begin{aligned} \left|\varphi_n\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^+\left|\varphi_{n-1}\right\rangle \quad (\alpha) \\ \left|\varphi_n\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^+\right)^n\left|\varphi_0\right\rangle \quad (\beta) \end{aligned}}$$

Donc, connaissant $\left|\varphi_0\right\rangle$, on peut calculer tous les états propres $\left|\varphi_n\right\rangle$

B4

Complément : Application des opérateurs â et $\hat{a}^{+}$ sur les états $\left|\varphi_n\right\rangle$

→ Application de l'opérateur $\hat{a}^{+}$:

D'après (α), en remplaçant n par n+1 : $\hat{a}^{+}\left|\varphi_n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|\varphi_{n+1}\right\rangle$

→ Application de l'opérateur â :

$$\hat{a}\ \left|\varphi_n\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}\ \hat{a}^{+}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}(\hat{a}^{+}\hat{a}\ +\hat{I}_d)\left|\varphi_{n-1}\right\rangle$$

d'après (α)

$$= \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{N}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{n}}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle = \frac{[(n-1)+1]}{\sqrt{n}}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle = \sqrt{n}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle$$

Récapitulons :

$$\hat{a}^{+}\left|\varphi_n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|\varphi_{n+1}\right\rangle \quad (\gamma)$$

$$\hat{a}\left|\varphi_n\right\rangle = \sqrt{n}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle \quad (\delta)$$