

Chapitre 7

Oscillateur harmonique

L'étude de l'oscillateur harmonique est un problème transversal à de nombreux domaines de la physique. Une des raisons d'une telle popularité est que l'étude d'un oscillateur harmonique modélise la situation très fréquente où le système est au voisinage de l'équilibre ; dans ce cas un développement de l'énergie potentielle autour de la position d'équilibre est de la forme

$$E_{\text{pot}} \propto +(\text{écart à l'équil.})^2 \quad (7.1)$$

i.e. conduit à l'étude d'un oscillateur, ou d'un ensemble d'oscillateurs couplés. En mécanique quantique, les résultats que nous allons obtenir pour l'oscillateur harmonique unidimensionnel pourront s'appliquer à l'étude des vibrations d'une molécule diatomique par exemple (le cas des vibrations de molécules plus complexes ou même des solides conduit à considérer des oscillateurs couplés ; cf. le cours de physique statistique pour le cas des solides, ou le complément III.E de [14]). Plus généralement, ils trouveront un intérêt pour chaque situation décrite par un hamiltonien s'exprimant comme la somme des carrés de deux variables canoniquement conjuguées¹ : $H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)$ lorsque le commutateur $[q, p] = i\text{Cste}$ est proportionnel à l'opérateur identité. Par exemple, l'hamiltonien du rayonnement électromagnétique $H_{\text{em}} = \frac{1}{2} \int d\vec{r} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2)$ peut s'écrire en fonction des composantes de Fourier du potentiel vecteur (dans la jauge de radiation) $H_{\text{em}} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \sigma} [(\partial_t \tilde{A}_{\vec{k}, \sigma})^2 + \vec{k}^2 (\tilde{A}_{\vec{k}, \sigma})^2]$, où l'indice $\sigma = \pm$ décrit les deux états de polarisation possibles. La quantification du champ électromagnétique conduit donc à considérer un ensemble d'oscillateurs harmoniques découplés associés aux différents modes du champ².

7.1 L'oscillateur harmonique classique

Considérons l'hamiltonien :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (7.2)$$

et commençons par rappeler la dynamique classique. Les équations du mouvement de Hamilton-Jacobi sont :

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad (7.3)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega^2 x \quad (7.4)$$

¹ Cf. la note de bas de page 9 de la page 58.

² On pourra consulter les ouvrages [38, 9, 30] pour en savoir davantage sur la quantification du champ électromagnétique.

Ces deux équations différentielles couplées peuvent être résolues aisément. Une manière particulièrement directe consiste à introduire une variable complexe combinant x et p :

$$A(t) \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{m\omega}{2}} x(t) + i \sqrt{\frac{1}{2m\omega}} p(t) \quad (7.5)$$

L'intérêt d'introduire cette nouvelle variable est double. D'une part nous pouvons interpréter l'espace des phases, le plan (x, p) , comme le plan complexe de la variable A . D'autre part la variable $A(t)$ obéit à une équation différentielle simplissime : en combinant (7.3,7.4) nous obtenons

$$\dot{A}(t) = -i\omega A(t) \quad (7.6)$$

dont la solution est immédiatement obtenue : $A(t) = A(0) e^{-i\omega t}$ (la trajectoire dans l'espace des phases est un cercle parcouru dans le sens inverse au sens trigonométrique).

En utilisant $x = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}(A + A^*)$ et $p = \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \frac{A - A^*}{i}$, nous pouvons exprimer l'énergie en fonction de cette nouvelle variable :

$$H = \frac{\omega}{2} (AA^* + A^*A) \quad (7.7)$$

Nous ne simplifions pas l'expression comme $\omega|A|^2$; en développant x^2 et p^2 nous avons fait attention à ne pas faire commuter A et A^* . En faisant cela nous anticipons sur la prochaine section dans laquelle nous verrons que la non commutativité de x et p en mécanique quantique induit que A et A^* ne commutent pas.

7.2 Le spectre de l'oscillateur harmonique

Différentes approches permettent de trouver le spectre de H ; l'une consiste à résoudre l'équation différentielle (2.8) [28], ce que nous discuterons brièvement plus tard. Nous lui préférons ici une approche algébrique présentée dans [8, 6] qui utilise la symétrie de l'hamiltonien³ [il s'agit de la symétrie $x \leftrightarrow p$ qui jouent des rôles similaires dans l'hamiltonien, $H = \frac{1}{2}(p^2 + x^2)$ si nous omettons les facteurs dimensionnés].

Analyse dimensionnelle.— La première question naturelle à laquelle nous pouvons tâcher de répondre est : quelles sont les échelles du problème ? L'hamiltonien fait apparaître deux paramètres : la masse m et la pulsation ω . Puisque nous discutons la théorie quantique de l'oscillateur harmonique, nous pouvons ajouter la constante de Planck \hbar . Avec les trois quantités de dimensions $[m] = M$, $[\omega] = T^{-1}$ et $[\hbar] = ML^2T^{-1}$ nous pouvons fabriquer une longueur :

$$\ell_\omega \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (7.8)$$

Cette échelle de longueur nous permet de définir une échelle d'impulsion $\sim m\omega\ell_\omega = \sqrt{m\hbar\omega}$ ou encore une échelle d'énergie $\sim m\omega^2\ell_\omega^2 = \hbar\omega$.

▣ **Exercice 7.1** : En utilisant l'inégalité de Heisenberg, montrer que l'énergie de l'état fondamental est de l'ordre de $\hbar\omega$ et que l'extension de la fonction d'onde associée est ℓ_ω .

▣ **Exercice 7.2** : Calculer la pulsation ω et l'énergie $\hbar\omega$ (en eV) correspondant à $\ell_\omega = 1 \text{ \AA}$ (pour un électron). Déduire la raideur $k = m\omega^2$ (en N/m puis en nN/Å).

³Notons toutefois qu'il n'y a pas de différence fondamentale entre les deux approches : l'équation différentielle est soluble car elle possède la symétrie exploitée dans "l'approche algébrique". L'algèbre des opérateurs annihilation-crédation introduite ci-dessous apparaît naturellement dans la résolution de l'équation hypergéométrique déduite de l'équation de Schrödinger.

Opérateurs d'annihilation et de création.— L'analyse de la dynamique classique nous a montré que la dynamique de l'oscillateur peut être analysée d'une manière extrêmement simple à l'aide de la variable A , combinaison linéaire de x et p . Ceci nous conduit à l'idée d'introduire deux opérateurs correspondants $A \rightarrow a = A/\sqrt{\hbar}$ et $A^* \rightarrow a^\dagger = A^\dagger/\sqrt{\hbar}$ qui vont se révéler utiles pour construire les états propres de H : l'opérateur d'annihilation (l'origine de cette dénomination est expliquée ci-dessous)

$$\hat{a} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} \quad (7.9)$$

et son opérateur conjugué

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} \quad (7.10)$$

appelé *opérateur de création*.

✎ **Exercice 7.3** : Vérifier que \hat{a} est sans dimension.

Puisque nous avons remplacé le couple (x, p) par le couple (a, a^\dagger) , une question venant naturellement est : par quoi est remplacée la relation de commutation canonique $[x, p] = i\hbar$?

✎ **Exercice 7.4 (important)** : Montrer que

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (7.11)$$

Puisque nous avons été attentifs à ne pas commuter A et A^* dans la section "oscillateur classique", nous pouvons faire $A \rightarrow \sqrt{\hbar}a$ dans (7.7) : $\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger)$, ou encore :

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (7.12)$$

Opérateur \hat{N} .— Nous introduisons l'opérateur

$$\hat{N} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{a}^\dagger\hat{a} \quad (7.13)$$

Construisons son spectre, qui est également le spectre de H d'après l'équation (7.12). Nous allons suivre la logique suivante : nous commençons par supposer que nous connaissons un état propre de N , noté $|\varphi_n\rangle$ pour une valeur propre n (le choix de la notation vient de ce que nous allons montrer que ces valeurs propres sont dans \mathbb{N}) :

$$\hat{N}|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle \quad (7.14)$$

puis nous allons montrer, qu'à partir d'un état $|\varphi_n\rangle$ supposé connu, les opérateurs \hat{a} et \hat{a}^\dagger nous permettent de construire de nouveaux états propres de l'opérateur \hat{N} . Finalement cela nous permettra de montrer que $\text{Spec}(\hat{N}) = \mathbb{N}$.

Action de \hat{a} et \hat{a}^\dagger sur les $|\mathbf{n}\rangle$.— En utilisant la définition de \hat{N} et (7.11) on obtient

$$\hat{N}(\hat{a}|\varphi_n\rangle) = (n-1)\hat{a}|\varphi_n\rangle \quad (7.15)$$

$$\hat{N}(\hat{a}^\dagger|\varphi_n\rangle) = (n+1)\hat{a}^\dagger|\varphi_n\rangle \quad (7.16)$$

ce qui montre que $\hat{a}|\varphi_n\rangle = C|\varphi_{n-1}\rangle$ et $\hat{a}^\dagger|\varphi_n\rangle = C'|\varphi_{n+1}\rangle$. Les constantes de normalisation C et C' s'obtiennent facilement : $C^2\langle\varphi_{n-1}|\varphi_{n-1}\rangle = \langle\varphi_n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|\hat{N}|\varphi_n\rangle = n$, c'est-à-dire, à une phase près, $C = \sqrt{n}$:

$$\hat{a}|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle \quad (7.17)$$

Notons que cette équation définit la phase relative des deux vecteurs. Par un raisonnement analogue :

$$\boxed{\hat{a}^\dagger |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle} \quad (7.18)$$

Nous montrons que n est nécessairement entier. Pour cela nous raisonnons par l'absurde.

(i) Remarquons d'abord que, d'après sa définition, \hat{N} doit posséder un spectre de valeurs propres positives : $\langle \varphi_n | \hat{N} | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \varphi_n \rangle = \|\hat{a} | \varphi_n \rangle\|^2 \geq 0$.

(ii) Or, connaissant un état propre $|\varphi_n\rangle$ de \hat{N} , si $n \notin \mathbb{N}$ l'équation (7.15) nous permet de construire des états propres associés à des valeurs propres négatives : pour cela il suffit d'appliquer \hat{a} sur $|\varphi_n\rangle$, un nombre de fois au moins supérieur à la partie entière de n .

La seule manière d'éviter une contradiction entre (i) et (ii) est donc que

$$\boxed{n \in \mathbb{N}} \quad (7.19)$$

ce qui interdit d'accéder aux $n < 0$, grâce à l'équation (7.17) qui assure :

$$\boxed{\hat{a} |\varphi_0\rangle = 0} \quad (7.20)$$

$|\varphi_0\rangle$ est donc le vecteur⁴ associé à la plus petite valeur propre de \hat{N} , donc également de l'énergie. $|\varphi_0\rangle$ est donc **l'état fondamental de \hat{H}** . Puisque nous connaissons l'action de \hat{a} dans l'espace de Hilbert (ou plutôt l'action de \hat{x} et \hat{p}), cette équation définit le vecteur $|\varphi_0\rangle$.

Nous vérifions que nous avons bien construit tous les états propres⁵ de \hat{N} puisque $n \in \mathbb{N}$ est que les opérateurs \hat{a} et \hat{a}^\dagger permettent de sauter de n à $n \pm 1$.

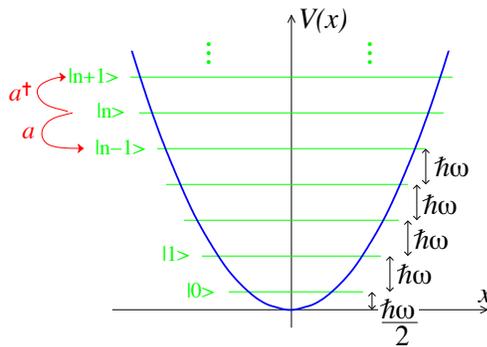


FIGURE 7.1 – Spectre du puits harmonique. Les opérateurs a et a^\dagger permettent de descendre et monter dans le spectre.

Spectre de \hat{H} . – Nous avons terminé la construction des états propres de H . Les valeurs propres de l'hamiltonien sont :

$$\boxed{E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)} \quad \text{pour } n \in \mathbb{N} \quad (7.21)$$

et les vecteurs propres sont définis par les relations (7.17,7.18). L'oscillateur harmonique unidimensionnel a donc un spectre très particulier de **niveaux d'énergie équidistants** (séparés de

⁴Attention à ne pas confondre les deux notations : $|\varphi_0\rangle$ est le vecteur propre de H décrivant un quanton dans l'état fondamental, tandis que, dans les notations de Dirac, 0 est le vecteur nul de l'espace de Hilbert décrivant l'absence de quanton.

⁵Rappelons une petite propriété [de l'équation différentielle $-\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$] : Dans un problème d'états liés en dimension $d = 1$ (potentiel confinant), les valeurs propres de l'énergie ne sont pas dégénérées.

$\hbar\omega$). Dans une expérience de spectroscopie, une telle structure régulière sera donc caractéristique de degrés de liberté de vibration : on montre un exemple de tel spectre sur la figure 7.2.

L'opérateur \hat{a} permet donc de passer de l'état d'énergie E_n à celui d'énergie E_{n-1} et l'opérateur \hat{a}^\dagger de l'état d'énergie E_n à celui d'énergie E_{n+1} . L'opérateur \hat{a} détruit une excitation de l'oscillateur et \hat{a}^\dagger en crée une. Ces deux opérateurs permettent de construire les états propres de H : connaissant le fondamental $|\varphi_0\rangle$, défini par l'équation (7.20), l'application de \hat{a}^\dagger nous donne tous les états excités :

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |\varphi_0\rangle \quad (7.22)$$

✎ **Exercice 7.5** (*) : Démontrer ce résultat.

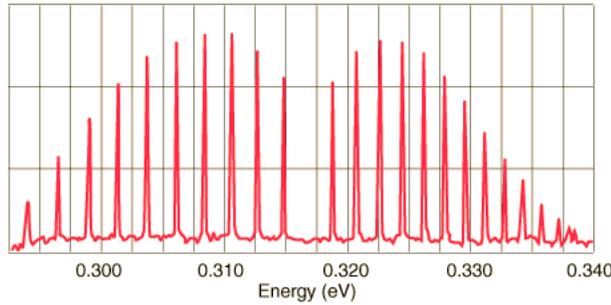


FIGURE 7.2 – Spectre de vibration d'une molécule HBr.

Fonctions d'onde.— Pour illustrer cette dernière remarque nous construisons les fonctions d'onde, notées $\varphi_n(x) = \langle x | \varphi_n \rangle$. L'état fondamental est donné par (7.20) :

$$\langle x | \hat{a} | \varphi_0 \rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \varphi_0(x) = 0 \quad (7.23)$$

Nous trouvons immédiatement que la fonction d'onde est une gaussienne :

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \quad (7.24)$$

L'application de l'opérateur de création, $\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \varphi_0(x) \propto \left(\frac{m\omega}{\hbar} - \frac{d}{dx} \right)^n \varphi_0(x)$, fait apparaître les polynômes d'Hermite⁶ $H_n(\xi)$. La fonction d'onde est :

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad \text{où} \quad \xi \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (7.25)$$

✎ **Exercice 7.6** : Utiliser les expressions de x et p en fonction de a et a^\dagger pour calculer les valeurs moyennes de x , p , x^2 et p^2 dans un état propre $|\varphi_n\rangle$. Calculer les fluctuations : Δx_{φ_n} et Δp_{φ_n} (on rappelle que $\Delta A_{\varphi}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \langle \varphi | A^2 | \varphi \rangle - \langle \varphi | A | \varphi \rangle^2$). En déduire le produit $\Delta x_{\varphi_n} \Delta p_{\varphi_n}$.

⁶La définition des polynômes d'Hermite est rappelée dans l'annexe A. Dans la variable ξ , la fonction d'onde du fondamental est $\tilde{\varphi}_0(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\xi^2/2}$. L'opérateur de création prend la forme $a^\dagger \rightarrow \xi - \frac{d}{d\xi}$. Si on écrit $\tilde{\varphi}_n(\xi) \propto H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$, avec $H_0(x) = 1$, il est facile de vérifier que $\tilde{\varphi}_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n}} (a^\dagger \tilde{\varphi}_{n-1})(\xi)$ conduit à la relation $H_n(\xi) = (2\xi - \frac{d}{d\xi}) H_{n-1}(\xi)$, qui est bien la récurrence entre polynômes d'Hermite donné dans l'annexe A page 257. QED.

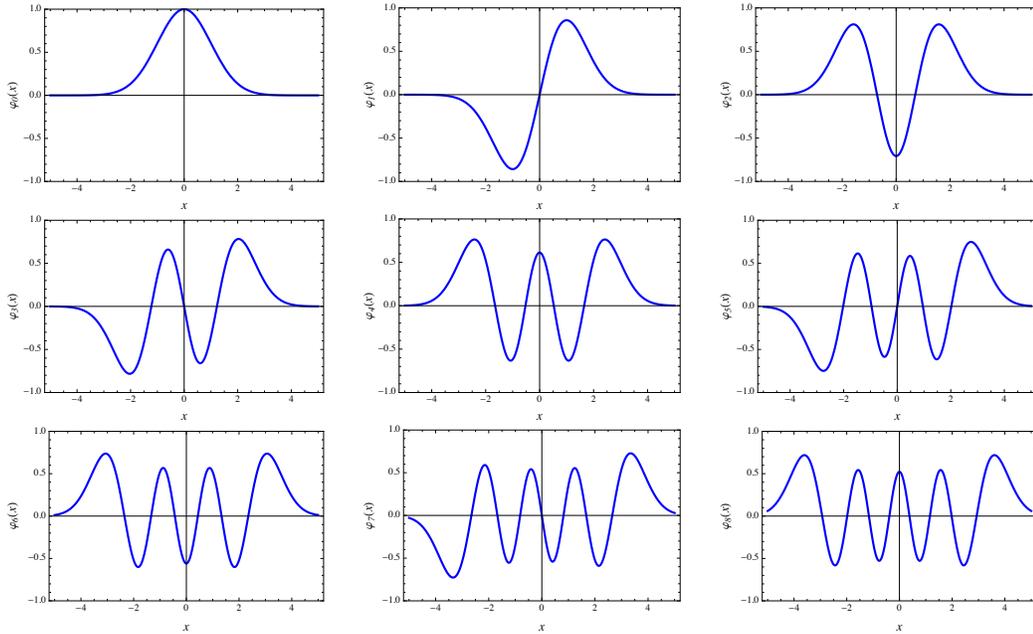


FIGURE 7.3 – *Fonctions d'onde des neuf premiers états. On vérifie que le nombre de nœuds coïncide avec le degré d'excitation (théorème de Sturm-Liouville).*

Résolution de l'équation de Schrödinger. – Il est intéressant de retrouver le spectre en partant de l'équation de Schrödinger :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (7.26)$$

Nous procédons par étapes (nous retrouverons la même logique dans l'étude de l'équation de Schrödinger pour le potentiel en $1/r$ au chapitre 12).

- **Étape 1** : Il est plus clair de travailler avec des variables adimensionnées : $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$ et $\tilde{E} = E/\hbar\omega$:

$$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right) \tilde{\varphi}(\xi) = 2\tilde{E} \tilde{\varphi}(\xi) \quad (7.27)$$

- **Étape 2** : On analyse les comportements asymptotiques de la solution. Pour $|\xi| \rightarrow \infty$, on peut négliger le membre de droite dans (7.27). On a alors : $\frac{d^2}{d\xi^2} \tilde{\varphi}(\xi) \simeq \xi^2 \tilde{\varphi}(\xi)$. En remarquant que $\frac{d^2}{d\xi^2} e^{-\xi^2/2} = (\xi^2 - 1)e^{-\xi^2/2}$, on déduit que le comportement dominant de la fonction d'onde à l'infini est gaussien : $\tilde{\varphi}(\xi) \sim e^{-\xi^2/2}$.

- **Étape 3** : On extrait le comportement dominant à l'infini en écrivant la fonction d'onde sous la forme $\tilde{\varphi}(\xi) = H(\xi) e^{-\xi^2/2}$. Un peu d'algèbre nous montre que la fonction $H(\xi)$ obéit à l'équation

$$H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (2\tilde{E} - 1)H(\xi) = 0 \quad (7.28)$$

Cette équation est un cas particulier d'équation hypergéométrique ; elle porte le nom d'équation d'Hermite (annexe A page 257). Elle n'admet de solutions normalisables au sens $\int d\xi H(\xi)^2 e^{-\xi^2} < \infty$ que si $(\tilde{E} - 1/2) = n \in \mathbb{N}$. Ces solutions sont polynomiales ; il s'agit précisément des polynômes d'Hermite $H_n(\xi)$.

▣ **Exercice 7.7 (**)** : **Densité de probabilité classique.** – L'équation du mouvement classique est $\ddot{x} = -\omega^2 x$. Nous notons $x_{cl}(t)$ la solution. Afin de définir une "densité de probabilité

classique", notée $\rho_{\text{cl}}(x)$, nous introduisons une moyenne temporelle. $\rho_{\text{cl}}(x)dx$ correspond à la probabilité de trouver la particule d'énergie E dans $[x, x + dx[$ si le système est observé pendant un temps très grand (ou pendant une période). On a donc $\rho_{\text{cl}}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^T \frac{dt}{T} \delta(x - x_{\text{cl}}(t))$, où T est la période. Montrer que pour la solution d'énergie E , la densité est : $\rho_{\text{cl}}(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{x_E^2 - x^2}}$ avec $E = \frac{1}{2}m\omega^2 x_E^2$.

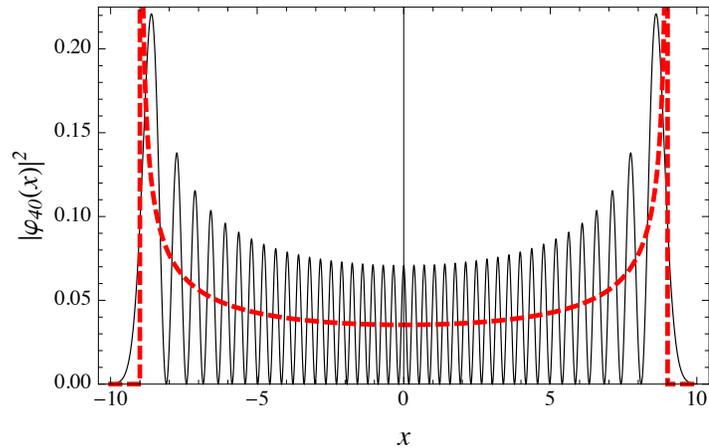


FIGURE 7.4 – Densité de probabilité $|\varphi_n(x)|^2$ pour $n = 40$. La courbe rouge en pointillés indique le résultat classique $\rho_{\text{cl}}(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{x_E^2 - x^2}}$ avec $E = \frac{1}{2}m\omega^2 x_E^2$, pour $E = E_{40}$ (cf. exercice).

Discutons les différences entre les deux courbes. Les oscillations de la densité quantique $|\varphi_n(x)|^2$ signalent un phénomène d'interférences (quantiques). On remarque que les oscillations sont plus serrées vers le centre, où la particule va plus vite, qu'au voisinage des points de rebroussement (cette remarque est liée à la relation de de Broglie $p = h/\lambda$). Sans surprise, nous constatons que la densité quantique pénètre dans la région interdite classiquement (effet tunnel).

7.3 L'oscillateur harmonique bidimensionnel

Il est intéressant de considérer le problème d'une particule en dimension 2 soumise à un potentiel harmonique (une paraboloïde), décrite par l'hamiltonien

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2 y^2 \quad (7.29)$$

où \vec{r} et \vec{p} sont deux vecteurs du plan. L'étude de ce problème est simple et nous permet d'illustrer la notion de produit tensoriel introduite à la fin du chapitre 3. L'espace de Hilbert du problème bidimensionnel est $\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y$.

Problème séparable.– L'hamiltonien (7.29) possède la structure :

$$H = H_x \otimes \mathbb{1}_y + \mathbb{1}_x \otimes H_y \quad (7.30)$$

où $H_x = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2$ et $H_y = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_y^2 y^2$ n'agissent respectivement que dans \mathcal{H}_x et \mathcal{H}_y . Puisque nous connaissons les spectres de valeurs propres et de vecteurs propres des hamiltonien H_x et H_y , il existe un moyen simple de construire une base d'états propres de H (notons que ce choix n'est pas toujours unique). En effet, si nous connaissons $|\varphi\rangle_x \in \mathcal{H}_x$ et $|\chi\rangle_y \in \mathcal{H}_y$

tels que $H_x|\varphi\rangle_x = E_x|\varphi\rangle_x$ et $H_y|\chi\rangle_y = E_y|\chi\rangle_y$, nous voyons immédiatement que l'état $|\Psi\rangle = |\varphi\rangle_x \otimes |\chi\rangle_y$ est état propre de H

$$H|\Psi\rangle = (H_x \otimes \mathbb{1}_y + \mathbb{1}_x \otimes H_y)|\varphi\rangle_x \otimes |\chi\rangle_y \quad (7.31)$$

$$= (H_x|\varphi\rangle_x) \otimes (\mathbb{1}_y|\chi\rangle_y) + (\mathbb{1}_x|\varphi\rangle_x) \otimes (H_y|\chi\rangle_y) = (E_x + E_y)|\Psi\rangle \quad (7.32)$$

avec la valeur propre $E_x + E_y$. Pour des hamiltoniens possédant la structure (7.30), où les variables x et y ne sont pas couplées, nous avons donc un moyen simple de fabriquer une base d'états propres. Du point de vue de la fonction d'onde, cela signifie qu'elle se factorise comme :

$$\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle = (\langle x | \otimes \langle y |)(|\varphi\rangle_x \otimes |\chi\rangle_y) = \langle x | \varphi \rangle_x \langle y | \chi \rangle_y = \varphi(x) \chi(y) \quad (7.33)$$

Oscillateur harmonique bidimensionnel.— Si nous appliquons cette procédure à l'hamiltonien (7.29) nous déduisons immédiatement que son spectre de valeurs propres est donné par :

$$E_{n,n'} = \hbar\omega_x \left(n + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_y \left(n' + \frac{1}{2} \right) \quad \text{pour } n, n' \in \mathbb{N} \quad (7.34)$$

Les fonctions d'onde correspondantes sont $\Psi_{n,n'}(\vec{r}) = \varphi_n^{\omega_x}(x) \varphi_{n'}^{\omega_y}(y)$ où la fonction $\varphi_n^{\omega}(x)$ est donnée par (7.25). Si le rapport $\omega_x/\omega_y \notin \mathbb{Q}$, le spectre ne présente aucune dégénérescence.

Dégénérescences accidentelles : $\omega_x/\omega_y \in \mathbb{Q}$.— Des dégénérescences peuvent toutefois apparaître lorsque le rapport des pulsations est un rationnel : $\omega_x/\omega_y = p/q$ où $p, q \in \mathbb{N}^*$. Écrivons dans ce cas $\omega_x = p\omega_0$ et $\omega_y = q\omega_0$. Les énergies prennent la forme :

$$E_{n,n'} = \hbar\omega_0(np + n'q) + \text{cste} \quad (7.35)$$

Nous notons la dégénérescence des niveaux : $E_{kq,k'p} = E_{k'q,kp}$, avec $k, k' \in \mathbb{N}$. De telles dégénérescences sont dites *accidentelles* car elles ne résultent de l'existence d'aucune symétrie particulière dans le problème.

Dégénérescences résultant d'une symétrie : le cas $\omega_x = \omega_y \equiv \omega$.— Dans ce cas les énergies prennent la forme $E_{n,n'} = \hbar\omega(n + n' + 1)$. Les états propres de l'hamiltonien $|n\rangle_x \otimes |n'\rangle_y$ sont repérés par deux indices mais les niveaux d'énergie peuvent être indicés par un unique entier

$$E_N = \hbar\omega(N + 1) \quad \text{pour } N \in \mathbb{N} \quad (7.36)$$

à chacune de ces énergies sont donc associés tous les états $|n\rangle_x \otimes |n'\rangle_y$ tels que $N = n + n'$. La dégénérescence de E_N est donc donnée par le nombre de façons de partitionner l'entier N comme la somme de deux entiers : $d_N = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n'=0}^{\infty} \delta_{N,n+n'} = N + 1$. Contrairement au cas $\omega_x/\omega_y \in \mathbb{Q}$, ces dégénérescences résultent d'une symétrie du problème (la symétrie de rotation dans le plan xOy).

Au lieu de considérer les états propres de H sous la forme $|n\rangle_x \otimes |n'\rangle_y$, il peut se révéler plus intéressant de construire des états propres communs à H et l'opération de symétrie⁷ (c'est ce qui sera fait dans le problème de l'annexe 15). Les nouveaux états propres sont des combinaisons linéaires des $|n\rangle_x \otimes |n'\rangle_y$, et n'ont plus cette forme factorisée, cependant la nouvelle classification (en fonction du moment orbital) montre explicitement la relation entre l'invariance par rotation et les dégénérescences.

Exercice 7.8 (*) : Donner le spectre des énergies et les dégénérescences des niveaux d'énergie d'un oscillateur harmonique isotrope en trois dimensions.

⁷Toute combinaison linéaire des états propres associés à la valeur propre dégénérée E_N est encore état propre avec la même valeur propre.

☺ Les idées importantes :

- Connaître le spectre d'énergie (7.21).
- Savoir jouer avec les relations (7.11,7.17,7.18) : savoir faire l'exercice 7.6.
- Produit tensoriel. La notion de problème séparable.
- Dégénérescences résultant d'une symétrie ou dégénérescences accidentelles.