



# Introduction à la mécanique quantique-3

Les quatre cours qui constituent cette introduction à la mécanique quantique, font de larges emprunts au cours donné par Mr le Professeur F. Davoine à l'INSA de Lyon en 1966.  
Qu'il soit remercié pour le caractère pédagogique exceptionnel de son cours que je me suis efforcé de préserver dans l'exposé des extraits que j'en ai donné.

# Application des premiers résultats

## Oscillateur harmonique à une dimension

En mécanique classique, soit une masse ponctuelle  $m$  mobile sur l'axe  $Ox$ , subissant une force de rappel  $F$  vers le point  $O$ :

$$F = -k.x$$

L'équation classique du mouvement est :

$$m.x'' = -k.x$$

Le mouvement est une oscillation sinusoïdale de fréquence

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\left(\frac{k}{m}\right)}$$

En général on utilise la pulsation  $\omega = 2\pi\nu$  ce qui donne:

$$k = m.\omega^2$$

La force de rappel vaut alors:  $F = -m \omega^2.x$  elle dérive d'un potentiel:

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

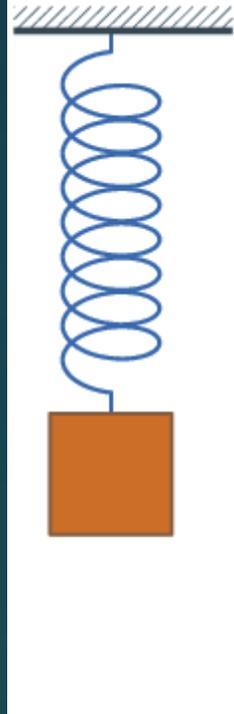
# Application des premiers résultats

## Oscillateur harmonique en mécanique quantique

Comme en mécanique classique, le potentiel pour l'oscillateur harmonique quantique est donné par :

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

On peut traiter le problème soit directement en résolvant l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde, ce qui n'est pas d'une complexité extrême mais est très laborieux (18 pages 21x29 de calculs dans un exemple de résolution) , soit en utilisant la « méthode de l'échelle » qui a été proposée par P. Dirac, soit encore, en utilisant la méthode des matrices d'Heisenberg qui permet de calculer les niveaux d'énergie sans avoir à calculer la fonction d'onde, voir annexe 1.



# Oscillateur harmonique

Les états propres sont donnés par:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \cdot \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Où  $H_n$  sont les polynômes d'Hermite

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left( e^{-x^2} \right)$$

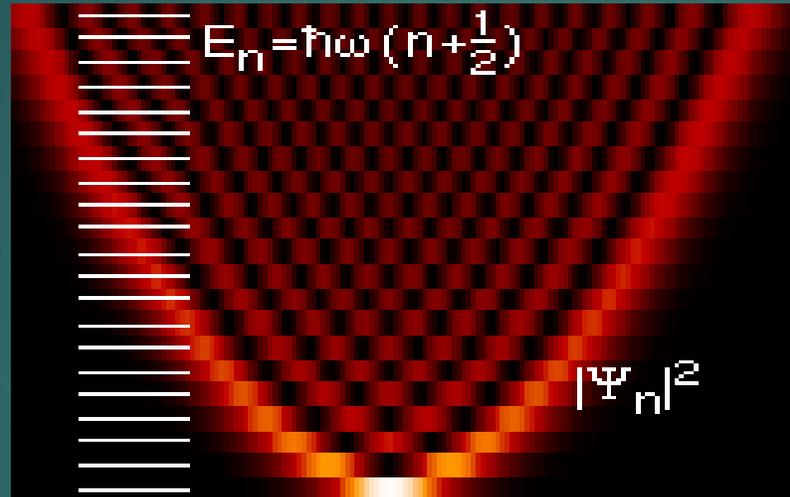
# Oscillateur harmonique

Et les niveaux d'énergie correspondants sont

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

Ceci est un exemple de référence qui illustre la quantification de l'énergie pour les états liés.

# Oscillateur harmonique



## Densité de probabilité

$|\psi_n(x)|^2$  pour les premières valeurs de l'énergie, en commençant par le fondamental ( $n = 0$ ) en bas puis en augmentant la valeur de l'énergie en montant. L'axe horizontal correspond à la coordonnée  $x$ , les couleurs plus claires indiquent une densité de probabilité plus forte.

# L'atome d'hydrogène (potentiel central)

- ▶ Il existe une solution analytique pour la mécanique quantique non relativiste.
- ▶ Ce cas, d'une certaine complexité opératoire, ne sera pas traité ici (Ce n'est pas hyper-compliqué, mais c'est long).
- ▶ Quelques résultats ci-après.
- ▶ Ceux qui veulent en savoir un peu plus peuvent regarder l'exposé plutôt bien fait sur wikipédia.
- ▶ [https://fr.wikipedia.org/wiki/Atome\\_d'hydrog%C3%A8ne](https://fr.wikipedia.org/wiki/Atome_d'hydrog%C3%A8ne)
- ▶ La solution pour l'atome d'Helium se traite de façon approchée par une méthode perturbative. Pour les autres il faut utiliser par exemple des résolutions numériques .

# L'atome d'hydrogène (potentiel central)

- ▶ Chaque électron est décrit, dans un atome, par un quadruplet de nombres quantiques  $(n, \ell, m_\ell, m_s)$  satisfaisant l'équation de Schrödinger et appelés respectivement :
  - ▶ - Nombre quantique principal  $n$ , définissant les couches électroniques ;
  - ▶ - Nombre quantique azimutal  $\ell$ , définissant les sous-couches électroniques ;
  - ▶ - Nombre quantique magnétique  $m_\ell$ , définissant l'orientation spatiale de l'orbitale atomique ;
  - ▶ - Nombre quantique magnétique de spin  $m_s$ , définissant l'orientation du moment angulaire intrinsèque de l'électron dans son orbitale.

## Nombres quantiques de l'électron dans le modèle de Hund-Mulliken

Nom	Symbole	Analogie classique	Intervalle de valeurs
<u>Nombre quantique principal</u>	$n$	<u>Niveau d'énergie</u> de l' <u>électron</u> dans l' <u>atome</u>	1, 2, 3, 4, etc.
<u>Nombre quantique azimutal</u>	$\ell$	<u>Moment angulaire</u> orbital de l'électron	0, 1, 2, ... $n - 1$
<u>Nombre quantique magnétique</u>	$m_\ell$	<u>Projection</u> du moment angulaire orbital sur un axe	$-\ell, \dots 0, \dots \ell$
<u>Nombre quantique magnétique de spin</u>	$m_s$	Projection du moment angulaire intrinsèque ( <u>spin</u> ) de l'électron	$-1/2$ ou $+1/2$

## Nombre quantique principal

Le nombre quantique principal, noté  $n$ , identifie la couche électronique et correspond au niveau d'énergie de l'électron dans l'atome. Les valeurs de  $n$  sont entières et strictement positives, c'est-à-dire que  $n = 1, 2, 3, 4, \text{etc.}$ .

Le nombre  $n$  est également le rang de la  $n$ -ième valeur propre de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, dite également « équation des états stationnaires » :  $H |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$ , où  $\varphi_n$  est l'état quantique associé et  $E_n$  est l'énergie correspondante en ignorant le terme dépendant du moment angulaire  $J^2$ .

Il n'est par conséquent lié qu'à la distance radiale  $r$  par rapport au noyau atomique, de sorte que l'éloignement moyen de l'électron croît avec  $n$  : on parle de couches électroniques successives.

## Nombre quantique azimutal $\ell$

Le nombre quantique azimutal, noté  $\ell$ , indique la sous-couche électronique et correspond au moment angulaire orbital de l'électron à travers la relation :

$$L^2 = \hbar^2 \ell (\ell + 1).$$

Les valeurs de  $\ell$  sont entières, positives, et strictement inférieures à  $n$ , c'est-à-dire que  $\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ .

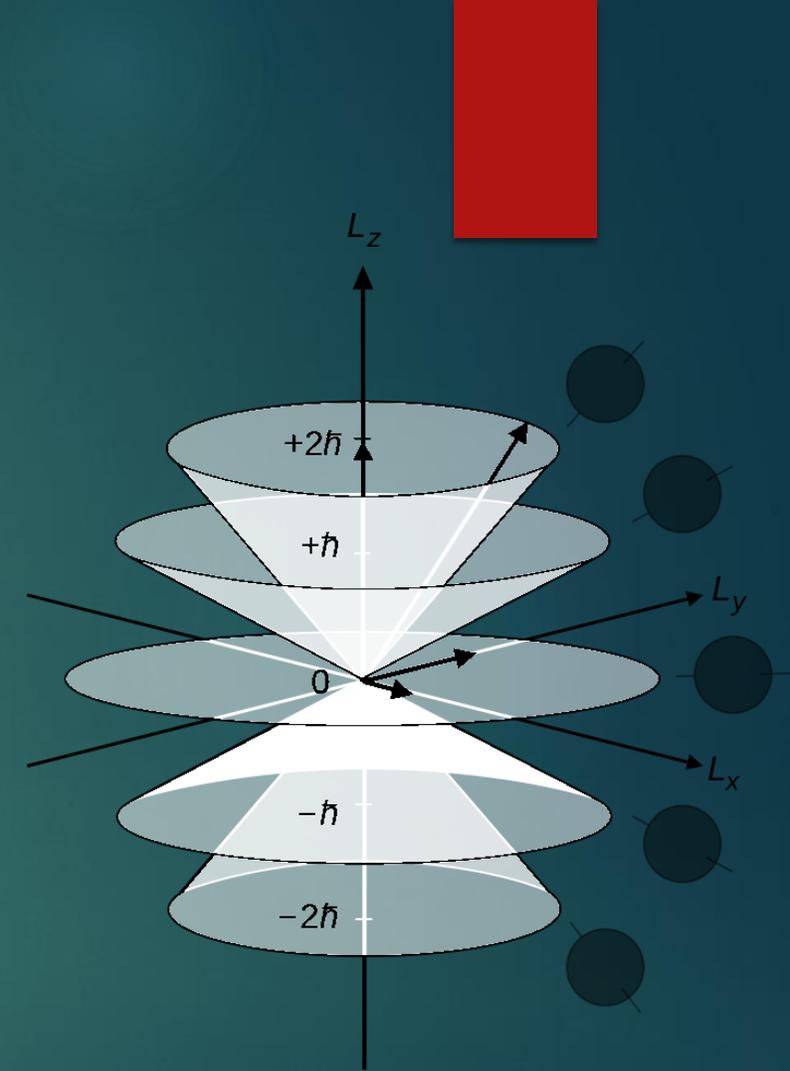
En chimie et en spectroscopie, les valeurs 0, 1, 2 et 3 de  $\ell$  correspondent respectivement à des sous-couches notées s, p, d et f. Ce nombre quantique est lié à la géométrie de la fonction d'onde de l'électron dans l'atome, ce qui influe sur les propriétés chimiques de cet atome ainsi que sur les angles de liaison avec d'autres atomes.

## Nombre quantique magnétique $m_\ell$

Modèle vectoriel du nombre quantique magnétique  $m_\ell$  pour  $\ell = 2$ .

Le nombre quantique magnétique, noté  $m_\ell$ , identifie l'orbitale atomique et correspond à la projection du moment angulaire orbital sur un axe donné :  $L_z = m_\ell \hbar$ .

Les valeurs de  $m_\ell$  sont entières et comprises entre  $-\ell$  et  $+\ell$ . Ainsi les sous-couches s, identifiées par  $\ell = 0$ , n'ont qu'une seule orbitale, tandis que sous-couches p, identifiées par  $\ell = 1$ , comptent trois orbitales (pour  $m_\ell = -1, 0$  et  $1$ ), les sous-couches d, identifiées par  $\ell = 2$ , en comptent cinq (pour  $m_\ell = -2, -1, 0, 1$  et  $2$ ), etc.



. Modèle vectoriel du nombre quantique magnétique  $m_\ell$  pour  $\ell = 2$

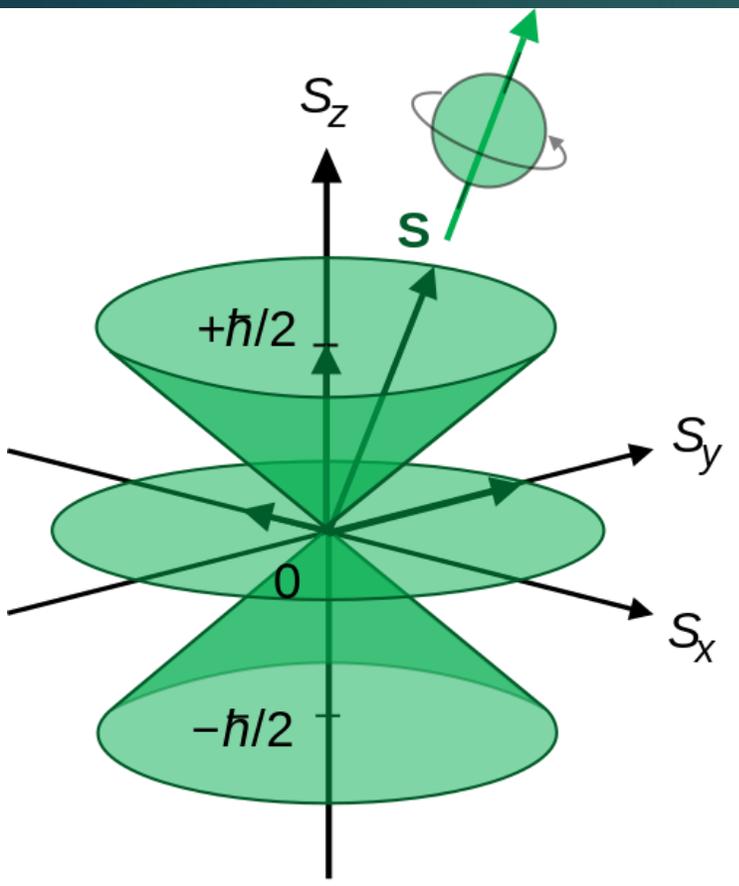
## Nombre quantique magnétique de spin $m_s$

Représentation d'électrons de spin up et down.

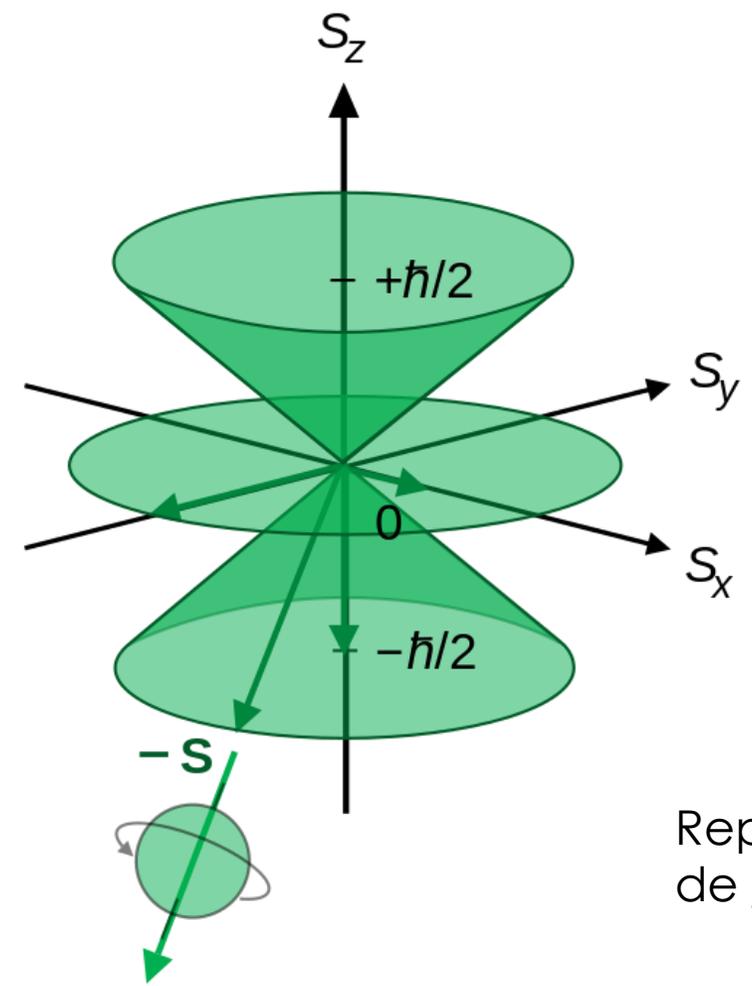
Le nombre quantique magnétique de spin, noté  $m_s$ , identifie l'électron dans son orbitale atomique et correspond à la projection du moment angulaire intrinsèque de l'électron sur un axe donné :  $S_z = m_s \hbar$ .

Ses valeurs sont comprises entre  $-s$  et  $+s$  avec un pas entier, où  $s$  est le spin de la particule ;  $s$  vaut  $1/2$  dans le cas de l'électron, dont il est une propriété intrinsèque, de sorte que  $m_s = \pm 1/2$ .

Dans la mesure où deux électrons ne peuvent avoir leurs quatre nombres quantiques égaux deux à deux en vertu du principe d'exclusion de Pauli, chaque orbitale atomique ne peut contenir que deux électrons, de nombres quantiques magnétiques de spin opposés.



$$|\uparrow\rangle \equiv \left| +\frac{1}{2} \right\rangle$$



$$|\downarrow\rangle \equiv \left| -\frac{1}{2} \right\rangle$$

Représentation d'électrons de spin up et down

# L'atome d'hydrogène (potentiel central)

- ▶ Le principe d'exclusion de Pauli stipule que deux fermions appartenant au même système de fermions (ici, au même atome) ne peuvent avoir tous leurs nombres quantiques égaux en même temps.
- ▶ Ce principe est fondamental car il est à l'origine de la configuration électronique des atomes : les électrons qui « s'empilent » dans l'atome doivent avoir chacun un état quantique distinct des autres, ce qui explique que toutes les orbitales atomiques sont progressivement occupées de la plus liée à la moins liée au noyau au fur et à mesure qu'on ajoute des électrons à l'atome ;
- ▶ C'est le principe d'Aufbau (« édification » en allemand) matérialisé par la règle de Klechkowski (appelée aussi règle de Madelung), qui sous-tend l'agencement du tableau périodique des éléments chimiques en blocs et en périodes



# L'atome d'hydrogène (potentiel central)

## Couche K

### 1 orbitale sphérique (1s)

C'est l'état fondamental, de symétrie sphérique 1s, un nœud de vibration sphérique, qu'on peut placer soit sur la périphérie, à l'infini, soit sur le noyau.

Les nombres quantiques correspondants sont :

Il n'y a qu'un mode de vibration car les valeurs  $m = +0 = m = -0$ .

En vertu du principe d'exclusion de Pauli, la couche K n'a qu'une seule orbitale et ne peut contenir que deux électrons au maximum.

Avec un électron, on a l'hydrogène.

Avec deux, on a l'hélium.

# L'atome d'hydrogène (potentiel central)

## Couche L

### 1 orbitale sphérique (2s)

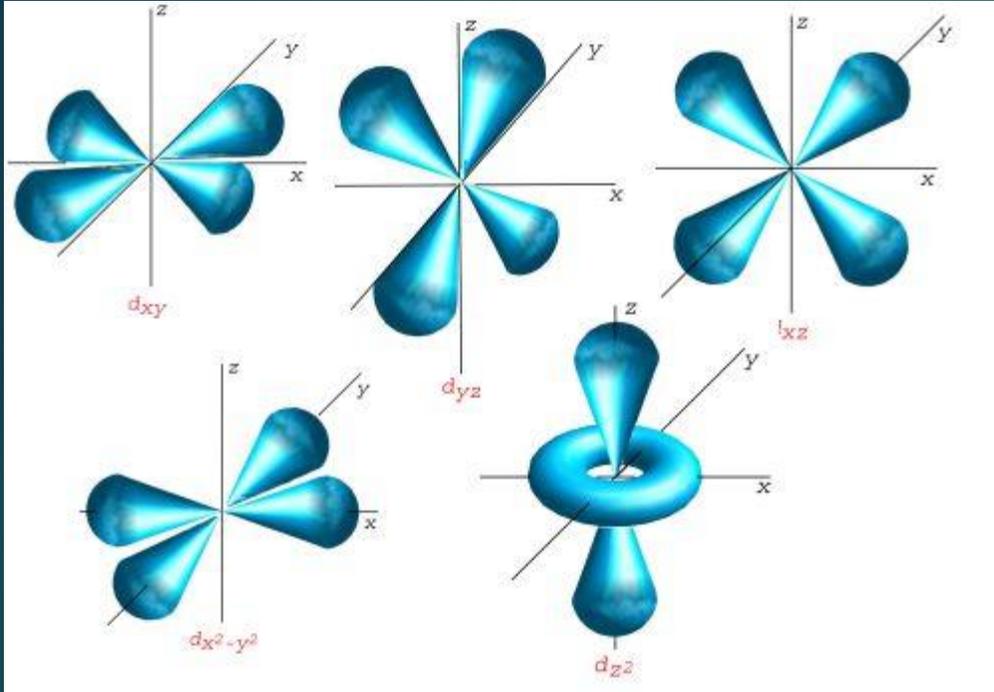
Elle comprend une orbitale sphérique 2s, soit un nœud de vibration sphérique et deux états quantiques, donc deux éléments (Li et Be) :

### 3 orbitales (2p)

Une orbitale de symétrie de révolution et deux autres avec un méridien, de symétrie axiale. Le méridien pouvant tourner dans un sens ou dans l'autre, il y a deux valeurs du nombre quantique magnétique  $m$  :

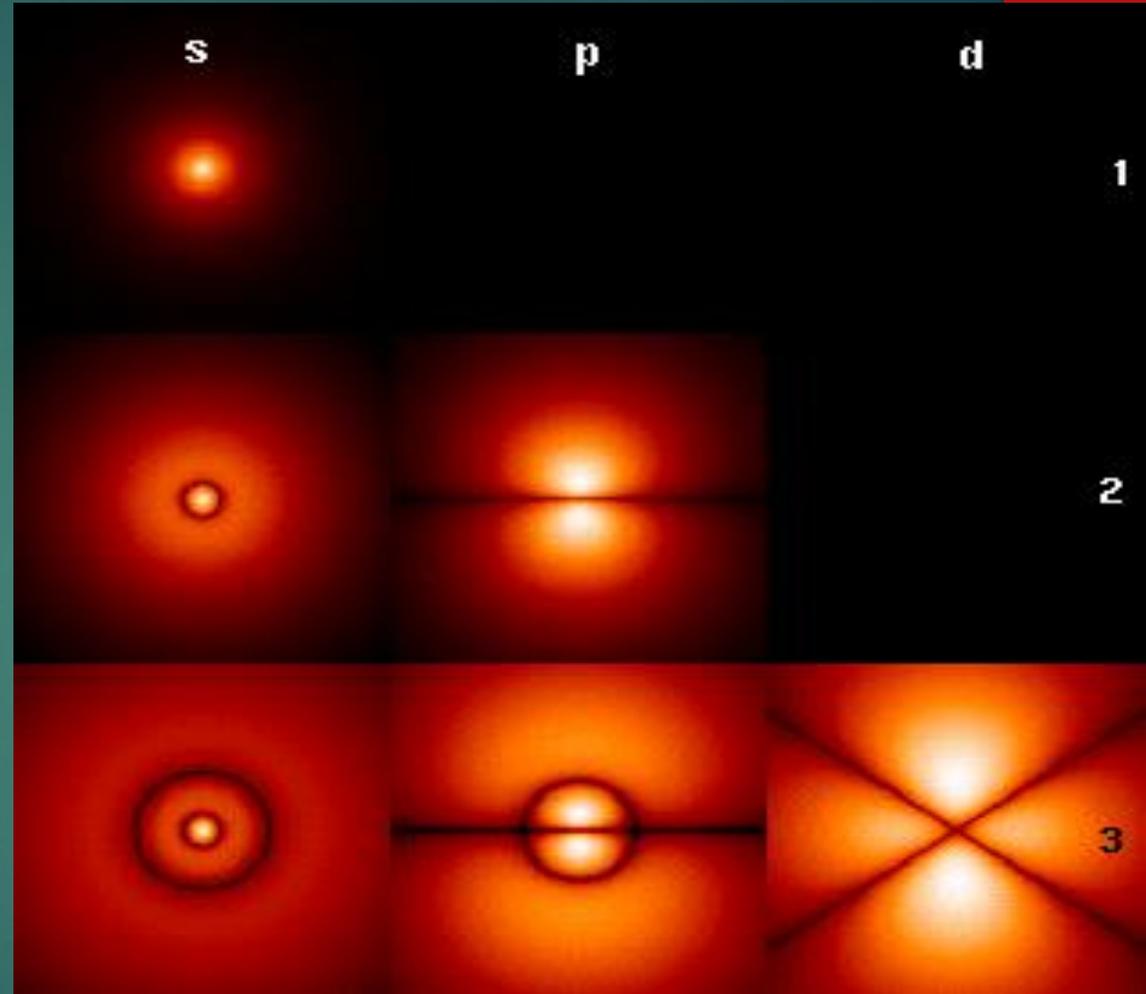
En additionnant les orbitales des couches K et L, on a 5 orbitales soit, en vertu du principe de Pauli, 10 électrons et un numéro atomique  $N=10$  correspondant au néon. Cela permet non seulement de comprendre l'atome d'hydrogène mais aussi de construire la [table de Mendeleiev](#).

# L'atome d'hydrogène (potentiel central)



## Couche M

On peut aussi représenter les orbitales  $d$ , de la couche M, en larmes d'eau



## Récapitulatif des couches K, L, M

Cette figure résume les modes de vibration qu'on rencontre dans les trois couches K, L, M. Chaque couche reprend la couche précédente avec un nœud de plus.

# L'atome d'hydrogène (potentiel central)

Les orbitales de gauche, sphériques, sont simples. Les orbitales p sont triples avec un nœud plan et les orbitales d quintuples avec deux nœuds plans.

Chaque couche contient les couches inférieures, par exemple en dessous de la sous-couche 3p, on a les sous-couches 1s, 2s, 2p et 3s. D'après le principe d'exclusion de Pauli, le nombre maximal d'électrons dans une sous-couche doit être pair.

Considérons le cas du sodium Na. Toutes les couches seront remplies jusqu'à la sous-couche 3s avec un électron célibataire.

# L'atome d'hydrogène (potentiel central)

Les orbitales de gauche, sphériques, sont simples. Les orbitales p sont triples avec un nœud plan et les orbitales d quintuples avec deux nœuds plans.

Chaque couche contient les couches inférieures, par exemple en dessous de la sous-couche 3p, on a les sous-couches 1s, 2s, 2p et 3s. D'après le principe d'exclusion de Pauli, le nombre maximal d'électrons dans une sous-couche doit être pair.

Considérons le cas du sodium Na. Toutes les couches seront remplies jusqu'à la sous-couche 3s avec un électron célibataire.

# L'atome d'hydrogène (potentiel central)

Les orbitales de gauche, sphériques, sont simples. Les orbitales p sont triples avec un nœud plan et les orbitales d quintuples avec deux nœuds plans.

Chaque couche contient les couches inférieures, par exemple en dessous de la sous-couche 3p, on a les sous-couches 1s, 2s, 2p et 3s. D'après le principe d'exclusion de Pauli, le nombre maximal d'électrons dans une sous-couche doit être pair.

Considérons le cas du sodium Na. Toutes les couches seront remplies jusqu'à la sous-couche 3s avec un électron célibataire.

# Annexe 1: L'oscillateur harmonique à une dimension

## Quelques rappels de mécanique classique

En mécanique classique, pour une masse  $m$  mobile sur un axe  $Ox$  subissant une force de rappel vers le point  $O$ :

$$f = - a.x = mx'' ,$$

l'équation du mouvement (4) est une oscillation sinusoïdale de pulsation

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{a}{m}} .$$

Soit  $p_x = mx'$ , où  $x' = dx/dt$  : Le hamiltonien  $H$  donnant l'énergie est:

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \quad (1)$$

Equations canoniques:  $dx/dt = p_x/m$  (2)

$$dp_x/dt = - m\omega_0^2 x \quad (3)$$

Equation du mouvement déduite de (3)  $\frac{d^2x}{dt^2} + \omega_0^2 x = 0$  (4)

# Annexe 1: L'oscillateur harmonique, par Heisenberg

Pour résoudre le problème en mécanique quantique, nous devons remplacer les grandeurs physiques classiques par les opérateurs associées qu'on appliquera à la fonction d'onde. Pour l'opérateur hamiltonien  $H$ , cela donne:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} (\partial_x)^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$$

Dans le formalisme d'Heisenberg, la fonction d'onde est un vecteur dans un espace de dimension infinie (espace de Hilbert). Afin de traiter le problème en géométrie analytique nous devons définir une base. Prenons comme base de cet espace les vecteurs propres de l'opérateur hamiltonien.

Dans ce formalisme, les opérateurs agissant sur la fonction d'onde sont des matrices de dimension infinie.

# Annexe 1-Rappels Cours 2

- ▶ Principe IV : Lorsqu'on effectue une mesure d'une grandeur  $A$  sur un système dont l'état n'est pas un état propre de l'observable  $A$ , le résultat de la mesure ne peut pas être prévu exactement. Les seuls résultats possibles sont les valeurs propres  $a_j$  de  $A$ . La probabilité de trouver la valeur  $a_j$  est  $|c_j|^2$ ,  $c_j$  étant le coefficient de  $\psi_j$  dans le développement de la fonction  $\psi$  en série des fonctions propres  $\psi_j$ .

$$\psi = \sum_0^{\infty} c_j \psi_j$$

# Annexe 1-Rappels Cours 2

- ▶ 1- L'équation: 
$$\psi = \sum_0^{\infty} c_j \psi_j$$
- ▶ montre que la fonction d'onde  $\psi$  peut être considérée comme un vecteur, d'un espace vectoriel de dimension  $N$  où  $N =$  l'infini (dénombrable) qu'on appelle espace de Hilbert, , dont une base de  $N$  vecteurs indépendants est constitué par les  $\psi_j$ , les fonctions propres.
- ▶ 2-Le résultat de la mesure  $a$  d'une grandeur physique  $A$ , (d'un état d'une particule représentée par la fonction d'onde  $\psi$ ), par l'observable associée à l'opérateur hermitien  $A$ , s'exprime de façon générique par :
  - ▶ 
$$a = \int \psi^* (A \psi) d\tau$$
- ▶ Pour une valeur  $a_{jk}$  donnée celà s'écrit:
  - ▶ 
$$a_{jk} = \int \psi_j^* (A \psi_k) d\tau$$

# Annexe 1: L'oscillateur harmonique, par Heisenberg

Les éléments de la matrice associée à l'opérateur  $\mathbf{x}$  sont alors définis par:

$$x_{jk} = \int \psi_j^* \mathbf{x} \psi_k d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^* \mathbf{x} \psi_k dx$$

La deuxième équation résulte du fait que  $\psi$  ne dépend que de  $x$  et de  $t$ .

De notre choix de la base,  $\psi_j$  et  $\psi_k$  correspondent à des états stationnaires. Dans ce cas les variables  $x$  et  $t$  se séparent et on a:

$$\begin{aligned}\psi_j &= \varphi_j(x) e^{-i\omega_j t} \\ \psi_j^* &= \varphi_j^*(x) e^{i\omega_j t} \\ \psi_k &= \varphi_k(x) e^{-i\omega_k t}\end{aligned}$$

Où  $\omega_j = 2\pi \frac{E_j}{h}$  et  $\omega_k = 2\pi \frac{E_k}{h}$ , de ces relations on déduit:

# Annexe 1: L'oscillateur harmonique, par Heisenberg

$$x_{jk} = \int_{-\infty}^{\infty} x \varphi_j^* \varphi_k e^{i(\omega_j - \omega_k)t} dx = e^{i\omega_{jk}t} \int_{-\infty}^{\infty} x \varphi_j^* \varphi_k dx = a_{jk} e^{i\omega_{jk}t} \quad (5)$$

En supposant l'intégrale finie et égale à  $a_{jk}$  où  $\omega_{jk} = \omega_j - \omega_k$

On suppose connu les règles du calcul matriciel, l'équation (4) du mouvement qu'on va appliquer à la matrice  $x$  s'applique à chaque élément de la matrice.

$$\frac{d^2 x_{jk}}{dt^2} + \omega_0^2 x_{jk} = 0 \quad (6)$$

De (5) et (6) on déduit:

$$x_{jk}(\omega_0^2 - \omega_{jk}^2) = 0$$

D'où  $x_{jk} = 0$  sauf pour  $\omega_{jk} = \pm \omega_0$

# Annexe 1: L'oscillateur harmonique, par Heisenberg

La plupart des éléments  $x_{jk}$  sont nuls sauf pour ceux dont la valeur absolue de  $\omega_{jk}$  est égale à  $\omega_0$ . L'ordre dans lequel on considère les fonctions propres  $\psi_j$  donc les valeurs propres correspondantes  $E_j$  n'ayant pas été imposé dans la démonstration, on peut classer les éléments de la matrice de manière à ce que la fréquence  $\omega_{jk} = \omega_0$  corresponde au passage de l'état  $j$  à l'état  $j-1$ , donc de l'énergie  $E_j$  à l'énergie  $E_{j-1}$ . En conséquence  $x_{jk}$  ne sera différent de 0 que pour  $k = j \pm 1$ . Avec l'indice 0 pour la première ligne et la première colonne cela donne:

$$\mathbf{x} = \begin{vmatrix} 0 & x_{01} & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ x_{10} & 0 & x_{12} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & x_{21} & 0 & x_{23} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & x_{32} & 0 & x_{34} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{vmatrix}$$

# Annexe 1: L'oscillateur harmonique, par Heisenberg

Utilisons la même méthode pour la matrice associée à l'opérateur  $p_x$ .

Appliquons l'équation (2),  $p_x = m dx/dt$  à la matrice  $x$ , pour chaque élément on a:

$p_{jk} = m dx_{jk}/dt$ , comme selon (5) on a  $dx_{jk}/dt = i\omega_{jk} x_{jk}$  et  $\omega_{jk} = \omega_0$  si  $k = j - 1$  et  $\omega_{jk} = -\omega_0$  si  $k = j + 1$  alors cette matrice  $p_x$  s'écrit:

$$p_x = \begin{vmatrix} 0 & -x_{01} & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ x_{10} & 0 & -x_{12} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & x_{21} & 0 & -x_{23} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & x_{32} & 0 & -x_{34} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{vmatrix}$$

# Annexe 1: L'oscillateur harmonique, par Heisenberg

Exprimons les niveaux d'énergie  $E_0, E_1, E_2, \dots, E_j, \dots$ . Par suite du choix de la base que nous avons fait, la matrice associée à cet opérateur doit être diagonale.

L'équation du hamiltonien entre matrices (lettres en gras) s'écrit:

$$\mathbf{E} = \mathbf{p}_x^2 / 2m + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \mathbf{x}^2$$

Les règles de multiplication entre matrices permettent de calculer  $\mathbf{x}^2$  et  $\mathbf{p}_x^2$ .

$$\mathbf{x}^2 = \begin{vmatrix} \mathbf{x}_{10} \mathbf{x}_{01} & 0 & \mathbf{x}_{01} \mathbf{x}_{12} & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \mathbf{x}_{10} \mathbf{x}_{01} + \mathbf{x}_{12} \mathbf{x}_{21} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \mathbf{x}_{21} \mathbf{x}_{10} & 0 & \mathbf{x}_{21} \mathbf{x}_{12} + \mathbf{x}_{23} \mathbf{x}_{32} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{vmatrix}$$

$$\mathbf{p}^2 = m^2 \omega_0^2 \begin{vmatrix} \mathbf{x}_{10} \mathbf{x}_{01} & 0 & -\mathbf{x}_{01} \mathbf{x}_{12} & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \mathbf{x}_{10} \mathbf{x}_{01} + \mathbf{x}_{12} \mathbf{x}_{21} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ -\mathbf{x}_{21} \mathbf{x}_{10} & 0 & \mathbf{x}_{21} \mathbf{x}_{12} + \mathbf{x}_{23} \mathbf{x}_{32} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{vmatrix}$$

# Annexe 1: L'oscillateur harmonique, par Heisenberg

D'où:

$$\mathbf{E} = \mathbf{p}_x^2/2m + 1/2 m \omega_0^2 \mathbf{x}^2$$

$$\mathbf{E} = m\omega_0^2 \begin{vmatrix} x_{10} & x_{01} & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & x_{10}x_{01} + x_{12}x_{21} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & x_{21}x_{12} + x_{23}x_{32} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{vmatrix}$$

On trouve bien une matrice diagonale comme escompté et on sait qu'elle doit être égale à:

$$\mathbf{E} = \begin{vmatrix} E_0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & E_1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & E_2 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{vmatrix}$$

# Annexe 1: L'oscillateur harmonique, par Heisenberg

En identifiant on a:

$$E_0 = m.\omega_0^2 (x_{10} x_{01}) \quad (7)$$

$$E_1 = m.\omega_0^2 (x_{10} x_{01} + x_{12} x_{21}) \quad (8)$$

.....

$$E_n = m.\omega_0^2 (x_{n,n-1} x_{n-1,n} + x_{n,n+1} x_{n+1,n})$$

On peut remarquer que ces produits,  $x_{10} x_{01}$ , par exemple, sont des constantes, en effet:

$$x_{01} = a_{01} \cdot e^{i.\omega_{01}.t}$$

$$x_{10} = a_{10} \cdot e^{i.\omega_{10}.t}$$

Comme  $\omega_{01} = -\omega_{10}$  on a  $x_{01} \cdot x_{10} = a_{01} \cdot a_{10} = \text{constante}$ .

# Annexe 1: L'oscillateur harmonique, par Heisenberg



Pour calculer ces produits, nous allons utiliser la loi de commutation entre les opérateurs  $x$  et  $p_x$ , qui rappelle, sont des matrices.

$$[p_x, x] = \hbar/i \quad \rightarrow \quad p_x \cdot x - x \cdot p_x$$

Le résultat est:

$$[p_x, x] = -2i.m.\omega_0 \begin{vmatrix} x_{10} & x_{01} & 0 & \dots \\ 0 & x_{12}x_{21} - x_{10}x_{01} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & x_{23}x_{32} - x_{21}x_{12} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = -i.\hbar \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}$$

En identifiant on obtient:  $2m.\omega_0 (x_{10} x_{01}) = \hbar \quad \rightarrow \quad x_{10} x_{01} = \frac{\hbar}{2m\omega_0}$  (9)

$2m.\omega_0 (x_{12}x_{21} - x_{10} x_{01}) = \hbar \quad \rightarrow \quad x_{12} x_{21} = \frac{\hbar}{2m\omega_0} + x_{10} x_{01} = \frac{\hbar}{2m\omega_0} + \frac{\hbar}{2m\omega_0} = \frac{\hbar}{m\omega_0}$  (10)

etc .....

# Annexe 1: L'oscillateur harmonique, par Heisenberg

En reportant la valeur de  $x_{01} \cdot x_{10}$  donnée par (9) dans (7) et (8) plus celle de  $x_{12} \cdot x_{21}$  donnée par (10) dans (8) on obtient :

$$E_0 = \frac{1}{2} \omega_0 \hbar = \frac{1}{2} h \nu_0$$

et

$$E_1 = \frac{1}{2} \omega_0 \hbar + \omega_0 \hbar = \frac{3}{2} (\omega_0 \hbar) = \frac{3}{2} (h \nu_0)$$

Et ainsi de suite, par récurrence:

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) h \nu_0$$

Ceci montre que cette méthode ne nécessite pas de calculer la fonction d'onde pour obtenir les états d'énergie possibles. Elle nous dispense de calculs fastidieux. Le résultat montre bien que le niveau d'énergie le plus bas n'est nul, ce qui était prévisible compte tenu de la relation d'incertitude de la mécanique quantique;