TD n^{o}3 Solution

Spectre de l'oscillateur Harmonique.
La force de Casimir du vide quantique.

1 Spectre de l'oscillateur Harmonique

1. Le modèle de l'oscillateur harmonique est important en physique, car il permet de décrire le comportement des particules près de leur position d'équilibre stable. En effet, à "basse" température, les particules se mettent près de leur état de plus basse énergie, et l'approximation à l'ordre 2, de l'énergie potentielle $V(x)$ près de son minimum est de la forme $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$, avec $k = \left(d^2V/dx^2\right)_{\min}$. Par exemple les petites oscillations d'un atome dans une molécule, ou dans un solide sont décrites par le modèle de l'oscillateur harmonique.
2. On calcule tout d'abord que $\left[\hat{Q}, \hat{P}\right] = i\hat{I}$. Puis

$$[a, a^+] = \frac{1}{2}\left(\left[\hat{Q}, -i\hat{P}\right] + \left[i\hat{P}, \hat{Q}\right]\right) = \frac{1}{2}(1+1) = \hat{I}$$

Soit $aa^+ = a^+a + \hat{I}$ donc

$$\left[\hat{N}, a\right] = a^+aa - (aa^+)\,a = a^+aa - \left(a^+a + \hat{I}\right)a = -a$$

et de même

$$\left[\hat{N}, a^+\right] = a^+\,(aa^+) - a^+a^+a = a^+\left(a^+a + \hat{I}\right) - a^+a^+a = a^+ \tag{1}$$

On a inversement $\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+)$,$\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^+ - a)$. On utilise $aa^+ = a^+a + \hat{I}$ et on obtient :

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2\right) = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(-\frac{1}{2}(a^+ - a)^2 + \frac{1}{2}(a + a^+)^2\right)\\ &= \frac{1}{4}\hbar\omega\left(-(a^+)^2 - a^2 + a^+a + aa^+ + a^2 + (a^+)^2 + a^+a + aa^+\right)\\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega\,(a^+a + aa^+) = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(2a^+a + \hat{I}\right) = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{I}\right)\end{aligned}$$

soit :

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{I}\right) \tag{2}$$

3. Cherchons la fonction notée $\psi_0(Q)$, définie par :

$$a\psi_0 = 0$$

(c'est à dire que ψ_0 est dans le **noyau** de l'opérateur a). On se rappelle que par définition des opérateurs $\hat{Q}, \hat{P}$, pour tout état ψ, on a $\langle Q|\hat{Q}\psi\rangle = Q\langle Q|\psi\rangle$ et $\langle Q|\hat{P}\psi\rangle = -i\frac{d}{dQ}\langle Q|\psi\rangle$. Cela donne :

$$0 =< Q|a\psi_0 >= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle Q|\left(\hat{Q} + i\hat{P}\right)\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q + \frac{d}{dQ}\right)\psi_0(Q), \quad \forall Q \in \mathbb{R}.$$

On obtient donc l'équation différentielle du premier ordre :

$$\frac{d\psi_0}{dQ} = -Q\psi_0$$

que l'on résoud en écrivant :

$$d\psi_0/\psi_0 = -QdQ \Leftrightarrow d\log\psi_0 = -d\left(\frac{1}{2}Q^2\right)$$
$$\Leftrightarrow \log\psi_0 = -\frac{1}{2}Q^2 + cste \Leftrightarrow \psi_0(Q) = Ce^{-\frac{1}{2}Q^2}$$

La constante C se trouve en cherchant une solution normalisée :

$$1 = \|\psi_0\|^2 = \int |\psi_0(Q)|^2 dQ = C^2 \int e^{-Q^2} dQ = C^2\sqrt{\pi}$$

donc $C = \pi^{-1/4}$,

$$\psi_0(Q) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right)$$

Notons que ψ_0 est vecteur propre de l'opérateur $\hat{N} = a^+a$ avec la valeur propre 0 :

$$\hat{N}\psi_0 = a^+(a\psi_0) = 0\,\psi_0$$

4. On cherche maintenant les autres vecteurs propres de $\hat{N}$. Pour un entier $n \geq 1$, on définit par récurrence l'état ψ_n par

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} a^+\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}\left(a^\dagger\right)^2 \psi_{n-2} = \ldots = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n \psi_0$$

Supposons que $\hat{N}\psi_{n-1} = (n-1)\psi_{n-1}$. Alors utilisant (1), donnant $\hat{N}a^+ = a^+\hat{N} + a^+ = a^+\left(\hat{N} + \hat{I}\right)$ on a

$$\hat{N}\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{N}a^+\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}}a^+\left(\hat{N}+\hat{I}\right)\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}}a^+(n-1+1)\psi_{n-1} = n\psi_n$$

Calculons la norme de ψ_n. On utilise $aa^+ = a^+a + \hat{I}$:

$$\|\psi_n\|^2 = \langle\psi_n|\psi_n\rangle = \frac{1}{n}\langle\psi_{n-1}|aa^+\psi_{n-1}\rangle = \frac{1}{n}\langle\psi_{n-1}|\left(\hat{N}+\hat{I}\right)\psi_{n-1}\rangle = \frac{(n-1+1)}{n}\|\psi_{n-1}\|^2 = \|\psi_{n-1}\|^2$$

Par récurrence on déduit que $\|\psi_n\|^2 = 1$ (est normalisé) et que pour tout $n \in \mathbb{N}$, ψ_n est vecteur propre de $\hat{N}$ avec la valeur propre n :

$$\hat{N}\psi_n = n\psi_n$$

5. On a :

$$a\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}}aa^+\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}}\left(a^+a+\hat{I}\right)\psi_{n-1} = \sqrt{n}\psi_{n-1}.$$

6. Cherchons maintenant la fonction d'onde de l'état ψ_n :

$$\psi_n(Q) =< Q|\psi_n >= \frac{1}{\sqrt{n}} < Q|a^+\psi_{n-1} >= \frac{1}{\sqrt{2n}}\left(Q - \frac{d}{dQ}\right)\psi_{n-1}(Q) \tag{3}$$

La fonction d'onde $\psi_n(Q)$ s'obtient donc par une opération de dérivation à partir de la fonction $\psi_{n-1}(Q)$.

7. Pour simplifier l'écriture, on définit la fonction $H_n(Q)$ par l'écriture :

$$\psi_n(Q) = \langle Q|\psi_n\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right)\left(\frac{1}{n!2^n}\right)^{1/2} H_n(Q)$$

et connaissant $\psi_0(Q)$ ci-dessus, on observe que $H_0(Q) = 1$. La relation de récurrence (3) donne

$$\frac{1}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right)\left(\frac{1}{n!2^n}\right)^{1/2} H_n(Q) = \frac{1}{\sqrt{2n}}\left(Q-\frac{d}{dQ}\right)\left(\frac{1}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right)\left(\frac{1}{(n-1)!2^{n-1}}\right)^{1/2} H_{n-1}(Q)\right)$$
$$\Leftrightarrow \left(\frac{1}{2n}\right)^{1/2} H_n(Q) = \frac{1}{\sqrt{2n}}\left(Q\,H_{n-1} - (-Q)H_{n-1} - \frac{dH_{n-1}}{dQ}\right)$$

donc :

$$H_n(Q) = \left(2Q - \frac{d}{dQ}\right)H_{n-1}(Q)$$

et on déduit que $H_n(Q)$ est en fait un polynôme de degré n à coefficients entiers appelé **polynome d'Hermite**, dont les premiers termes sont :

$$H_0(Q) = 1, \quad H_1(Q) = 2Q, \quad H_2(Q) = 4Q^2 - 2, \ldots$$

8. Le spectre de $\hat{H}$ s'obtient simplement de la relation $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}Id\right)$. Donc $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$.
9. Comme $\hat{N}$ est auto adjoint ($\hat{N}^{+} = \left(a^{+}a\right)^{+} = \hat{N}$), les vecteurs propres ψ_n forment un ensemble orthonormés de vecteurs (voir cours). Pour montrer que l'opérateur $\hat{N}$ n'a pas d'autres vecteurs propres, il faut montrer que ces états ψ_n forment une base de l'espace $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$. On cherche une fonction $\varphi(Q)$ orthogonale à toutes les fonctions ψ_n. Par hypothèse on a donc $\int \varphi(Q)\, e^{-Q^2/2} Q^n$ pour tout $n \geq 0$. On écrit la transformée de Fourier
$$\begin{aligned}\mathcal{F}\left(\varphi(Q)\, e^{-Q^2/2}\right)(P) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \varphi(Q)\, e^{-Q^2/2} e^{-iPQ} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \varphi(Q)\, e^{-Q^2/2} \left(1 - iPQ + \frac{1}{2}(-iPQ)^2 + \dots\right)\end{aligned}$$
Chaque terme du développement en série de e^{-iPQ} est un polynôme en Q. On permute la série et l'intégrale, et on déduit d'après l'hypothèse sur φ que chacun des termes est nul, donc $\mathcal{F}\left(\varphi(Q)\, e^{-Q^2/2}\right) = 0$, donc $\varphi(Q)\, e^{-Q^2/2} = 0, \forall Q$, donc $\varphi = 0$. Il n'y a donc pas de fonction orthogonale à l'espace engendré par les ψ_n. Conclusion : les vecteurs orthogonaux ψ_n engendrent tout l'espace $L^2(\mathbb{R})$ et forment donc une base orthonormée.

2 La force de Casimir (1948)

1. On a $\lambda_x = 2L/a$, $\lambda_y = 2L/b$, $\lambda_z = 2l/d$, avec $a, b, d \in \mathbb{N}^*$ entiers. Donc $k_x = \frac{2\pi}{\lambda_x} = \frac{\pi}{L}a$, etc.... La fréquence de ce mode (a, b, d) est
$$\begin{aligned}\omega_{a,b,d} = ck = c\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)^{1/2} &= \pi c \left(\frac{a^2}{L^2} + \frac{b^2}{L^2} + \frac{d^2}{l^2}\right)^{1/2} \\ &= \frac{\pi c}{\ell}\left(\left(\frac{\ell}{L}\right)^2 \left(a^2 + b^2\right) + d^2\right)^{1/2}.\end{aligned}$$
L'énergie du vide quantique dans la boite est alors (en pensant aux deux états de polarisations possibles)
$$\mathcal{E}(l) = 2 \sum_{a,b,d>0} \frac{1}{2}\hbar\omega_{a,b,d}$$
La divergence de $\mathcal{E}(l)$ est due aux hautes fréquences ω ; appelée **divergence ultraviolette**.
2. On a
$$\mathcal{E}(l) = \hbar \sum_{a,b,d>0} \omega e^{-\omega/\omega_c}$$
D'après l'expression $\omega = \frac{\pi c}{\ell}\left(\left(\frac{\ell}{L}\right)^2 \left(a^2 + b^2\right) + d^2\right)^{1/2}$, comme $(l/L) \ll 1$, on peut traiter a, b comme des variables continues dans la somme (approximation de Riemann d'une intégrale), et donc écrire
$$\mathcal{E}(l) \simeq \hbar \sum_{d>0} \int da\, db\, \omega e^{-\omega/\omega_c}$$
Ensuite, on utilise des coordonnées polaires $(a, b) \to (\rho, \theta)$, c'est à dire $\left(a^2 + b^2\right) = \rho^2$ et $dadb = \rho d\rho d\theta$, et $\theta = 0 \to \pi/2$. Alors
$$\mathcal{E}(l) \simeq \hbar\left(\frac{\pi}{2}\right) \sum_{d>0} \int_0^{\infty} d\rho\, \rho\, \omega e^{-\omega/\omega_c}$$
avec $\omega = \frac{\pi c}{l}\left(\left(\frac{l}{L}\right)^2 \rho^2 + d^2\right)^{1/2}$. Finalement, le changement de variable $\rho \to \omega = \frac{\pi c}{l}\left(\left(\frac{l}{L}\right)^2 \rho^2 + d^2\right)^{1/2}$,

donne $\omega d\omega = \rho d\rho \left(\frac{\pi c}{L}\right)^2$ et

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}(l) &\simeq \hbar\left(\frac{\pi}{2}\right)\left(\frac{L}{\pi c}\right)^2 \sum_{d>0}\int_{\omega_0}^{\infty} d\omega\, \omega^2 e^{-\omega/\omega_c} \\
&= \frac{\hbar L^2}{2\pi c^2}\sum_{d>0}\frac{d^2}{d\alpha^2}\int_{\omega_0}^{\infty} d\omega\, e^{-\alpha\omega} \\
&= \frac{\hbar L^2}{2\pi c^2}\sum_{d>0}\frac{d^2}{d\alpha^2}\left(\frac{1}{\alpha}e^{-\alpha\omega_0}\right)
\end{aligned}$$

avec $\omega_0 = \frac{\pi c}{l}d$, et $\alpha = 1/\omega_c$. Ensuite $\sum_{d>0} e^{-\alpha\omega_0} = \sum_{d>0}\left(e^{-\alpha\frac{\pi c}{l}}\right)^d = \frac{-e^{-\alpha\frac{\pi c}{l}}}{1-e^{-\alpha\frac{\pi c}{l}}} = \frac{1}{e^{\alpha\frac{\pi c}{l}}-1}$ (suite géométrique). Donc

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}(l) &= \frac{\hbar L^2}{2\pi c^2}\frac{d^2}{d\alpha^2}\left(\frac{1}{\alpha}\frac{1}{e^{\alpha\frac{\pi c}{l}}-1}\right) \\
&= \frac{\hbar c\pi^2 L^2}{2l^3}\frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{1}{x\left(e^x-1\right)}\right)
\end{aligned}$$

avec $x = \alpha\pi c/l = \pi c/(\omega_c l)$.

3. Ensuite

$$\frac{1}{x\left(e^x-1\right)} = \frac{1}{x^2} - \frac{1}{2x} + \frac{1}{12} - \frac{1}{30\times 24}x^2 + O\left(x^3\right)$$

donc

$$\frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{1}{x\left(e^x-1\right)}\right) = \frac{6}{x^4} - \frac{1}{x^3} - \frac{1}{15\times 24} + O\left(x\right)$$

et

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}(l) &= \frac{\hbar c\pi^2 L^2}{2l^3}\left(6\left(\frac{\omega_c l}{\pi c}\right)^4 - \left(\frac{\omega_c l}{\pi c}\right)^3 - \frac{1}{15\times 24} + O(1/\omega_c)\right) \\
&= \frac{\hbar c\pi^2 L^2}{2}\left(6\left(\frac{\omega_c}{\pi c}\right)^4 l - \left(\frac{\omega_c}{\pi c}\right)^3 - \frac{1}{15\times 24}\frac{1}{l^3} + O(1/\omega_c)\right)
\end{aligned}$$

4. On a

$$\begin{aligned}
U(l) &= \mathcal{E}(l) + \mathcal{E}(L-l) = \frac{\hbar c\pi^2 L^2}{2}\left(6\left(\frac{\omega_c}{\pi c}\right)^4 L - \frac{1}{15\times 24}\left(\frac{1}{l^3} + \frac{1}{(L-l)^3}\right) + ...\right) \\
&\simeq \frac{\hbar c\pi^2 L^2}{2}\left(6\left(\frac{\omega_c}{\pi c}\right)^4 L - \frac{1}{15\times 24}\left(\frac{1}{l^3}\right) + ...\right),
\end{aligned}$$

pour $L \gg l$. Donc $F_{Casimir}(l) = -\frac{dU}{dl} = -\frac{\hbar c\pi^2 L^2}{2}\left(\frac{3}{15\times 24}\frac{1}{l^4} + ...\right)$ et pour $\omega_c \to \infty$, les termes suivants s'annullent, donc

$$F_{Casimir}(l) = -\frac{\hbar c\pi^2 L^2}{240}\frac{1}{l^4}$$