Série 8 - Equations différentielles ordinaires

La carrière d'un jeune physicien théoricien consiste à étudier l'oscillateur harmonique avec un niveau d'abstraction toujours croissant. - Sidney Coleman

1 Oscillateur harmonique classique

Objectif : résoudre l'équation différentielle de l'oscillateur harmonique à l'aide de la méthode de Frobenius.

Théorie : analyse réelle.

Difficulté : ★☆☆☆ obligatoire.

Une masse m est attachée à un ressort de constant élastique k qui oscille selon un axe horizontal.

(a) Ecrire l'équation du mouvement en termes du déplacement x par rapport à la position d'équilibre et déterminer la solution générale du mouvement harmonique oscillatoire.

(b) Résoudre l'équation différentielle du mouvement harmonique oscillatoire à l'aide de la méthode Frobenius avec le développement en série,

$$x\left(t\right)=\sum_{j=0}^{\infty}a_j\,t^{s+j}\qquad\text{où}\qquad s\geqslant 0\qquad\text{et}\qquad a_0\neq 0\,.$$

- Déterminer la relation de récurrence entre les coefficients a_j et exprimer ces coefficients en termes des coefficients a_0 et a_1.
- Montrer que la solution $x\left(t\right)$ est identique à la solution générale déterminée en (a) compte tenu des conditions initiales $x\left(0\right)=x_0$ et $\dot{x}\left(0\right)=v_0$.

2 Molécule décrite par des oscillateurs harmoniques couplés

Objectif : résoudre le système d'équations différentielle d'oscillateurs harmoniques couplés.

Théorie : analyse réelle.

Difficulté : ★★☆☆ facultatif.

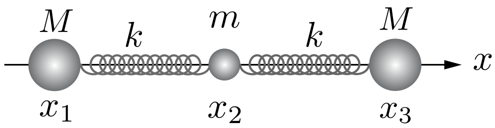

FIGURE 1 – Molécule de CO_2 avec des ions oxygène O^{2-} de masse M liés par des liaisons chimiques de constante élastique k à un ion carbone C^{4+} de masse m.

On décrit les vibrations internes d'une molécule de CO_2 à l'aide d'oscillateurs harmonique couplés : trois points matériels attachés par deux ressorts de constante élastique k et de longueur à vide négligeable oscillent le long de l'axe horizontal x. Les points matériels externes 1 et 3 ont des masses identiques M et le point matériel interne 2 a une masse m, où $m < M$ (Fig. 1).

(a) Ecrire les équations du mouvement couplés des trois points matériels en termes des déplacements x_1, x_2 et x_3 des trois ions par rapport à leur position d'équilibre.

(b) Déterminer les modes propres de vibration définis tels que toutes les masses oscillent avec la même pulsation ω. Pour ce faire, les trois solutions sont exprimées comme le produit d'un module et d'un phaseur,

$$x_i\,(t) = z_i\,e^{\,i\omega t} \qquad \text{où} \qquad z_i \in \mathbb{C} \qquad \text{pour} \qquad i = 1, 2, 3\,.$$

Mettre le système d'équations caractéristiques couplées sous forme matricielle,

$$A\,\boldsymbol{z} = \omega^2\,\boldsymbol{z} \qquad \text{où} \qquad \boldsymbol{z} = (z_1, z_2, z_3)\;,$$

déterminer la matrice A et en déduire ses valeurs propres ω^2, qui sont les modes propres.

(c) Pour chaque mode propre, determiner le vecteur propre et interpréter physiquement ce mode de vibration décrit par la valeur propre correspondante.

3 Oscillateur harmonique quantique

⦿ **Objectif** : résoudre l'équation différentielle de l'oscillateur harmonique quantique en l'exprimant en termes des polynômes d'Hermite.

📖 **Théorie** : analyse complexe.

✍ **Difficulté** : ★★★★ facultatif.

L'opérateur hamiltonien $\hat{H}$ de l'oscillateur harmonique quantique à une dimension de pulsation $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ pour un point matériel de masse m est écrit en termes de l'opérateur position $\hat{p}_x$ et de l'opérateur quantité de mouvement $\hat{x}$ comme,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}\,m\,\omega^2\hat{x}^2 = -\,\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\,m\,\omega^2 x^2\,.$$

où la relation de commutation canonique est $[\,\hat{x}, \hat{p}_x\,] = i\,\hbar\,\hat{1}$. En régime stationnaire, l'opérateur hamiltonien satisfait l'équation aux valeurs propres,

$$\hat{H}\,\varphi_n\left(x\right) = E_n\,\varphi_n\left(x\right)\,.$$

où $\varphi_n\left(x\right)$ sont les fonctions propres. Les opérateurs d'échelle, hermitiens conjugués et sans dimension physique, sont définis comme,

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\;\hat{x} + \frac{1}{\sqrt{2}}\;\frac{i}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{m\,\omega}}\;\hat{p}_x$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\;\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{2}}\;\frac{i}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{m\,\omega}}\;\hat{p}_x\,.$$

L'opérateur nombre $\hat{N}$ satisfait l'équation aux valeurs propres,

$$\hat{N}\,\varphi_n\left(x\right) = \hat{a}^\dagger\hat{a}\,\varphi_n\left(x\right) = n\,\varphi_n\left(x\right)\,.$$

(a) Ecrire l'équations aux valeurs propres en termes de la variable sans dimension physique définie comme,

$$x' = \sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\,x\,.$$

(b) Déterminer la relation de commutation entre les opérateurs d'échelle a et $\hat{a}^\dagger$. En déduire l'expression de l'opérateur hamiltonien $\hat{H}$ en termes de l'opérateur nombre $\hat{N}$ et les niveaux d'énergie E_n.

(c) Montrer que la fonction propre normée $\varphi_0\left(x'\right)$ du niveau fondamental s'écrit,

$$\varphi_0\left(x'\right) = \frac{1}{\pi^{1/4}}\,e^{-\,\frac{1}{2}\,x'^2}\,,$$

en établissant une relation de récurrence entre les fonctions propres $\varphi_n\left(x'\right)$ et $\varphi_{n+1}\left(x'\right)$ à l'aide des opérateurs $\hat{N}$ et a.

(d) Montrer que les fonctions propres normées sont liées par la relation,

$$\varphi_n\left(x'\right) = \frac{\left(\hat{a}^\dagger\right)^n}{\sqrt{n!}}\;\varphi_0\left(x'\right)\,.$$

en établissant une relation de récurrence entre les fonctions propres $\varphi_{n-1}\left(x'\right)$ et $\varphi_n\left(x'\right)$ à l'aide des opérateurs $\hat{N}$ et $\hat{a}^\dagger$.

(e) Montrer que les fonctions propres normées s'écrivent explicitement comme,

$$\varphi_n\left(x'\right) = \frac{1}{\sqrt{2^n\,\pi^{1/2}\,n!}}\left(x' - \frac{d}{dx'}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\,x'^2}\,.$$

(f) Montrer que les fonctions propres normées peuvent être mises sous la forme suivante,

$$\varphi_n\left(x'\right) = \frac{1}{\sqrt{2^n\,\pi^{1/2}\,n!}}\;H_n\left(x'\right)e^{-\frac{1}{2}\,x'^2}\,,$$

où les polynômes d'Hermite sont définis par la formule de Rodrigues,

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

à l'aide de l'identité,

$$-\,\frac{d}{dx'}\left(f\left(x'\right)e^{-\frac{1}{2}\,x'^2}\right) = e^{-\frac{1}{2}\,x'^2}\left(x' - \frac{d}{dx'}\right)f\left(x'\right)\,,$$

pour une fonction $f\left(x'\right) \in L^2\left(\mathbb{R}\right)$ bien choisie.

(g) Montrer que les polynômes d'Hermite satisfont l'équation différentielle,

$$H''_n\left(x'\right) - \,2x'\,H'_n\left(x'\right) + 2n\,H_n\left(x'\right) = 0\,.$$

(h) Montrer que les fonctions propres normées s'écrivent explicitement en termes de la coordonnée de position x comme,

$$\varphi_n\left(x\right) = \frac{1}{\sqrt{2^n\,\pi^{1/2}\,n!}}\left(\frac{m\,\omega}{\hbar}\right)^{1/4} H_n\left(\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\,x\right)\exp\left(-\,\frac{1}{2}\,\frac{m\,\omega}{\hbar}\,x^2\right)\,.$$

4 Polynômes d'Hermite

⦿ **Objectif** : résoudre l'équation différentielle d'Hermite pour déterminer les polynômes d'Hermite et étudier leurs propriétés.

📖 **Théorie** : analyse réelle.

✍ **Difficulté** : ★★★☆ obligatoire.

Les polynômes d'Hermite $H_n\left(x\right)$ définis par la formule de Rodrigues,

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

satisfont l'équation différentielle,

$$H''_n\left(x\right) - \,2x\,H'_n\left(x\right) + 2n\,H_n\left(x\right) = 0\,.$$

(a) Montrer la relation de récurrence,

$$H_{n+1}(x) - 2x\, H_n(x) + 2n\, H_{n-1}(x) = 0\,,$$

en calculant $H_n'(x)$ et en montrant par récurrence que,

$$H_n'(x) = 2n\, H_{n-1}(x)\ .$$

(b) Evaluer les 6 polynômes d'Hermite de plus petit degré : $H_0(x)$, $H_1(x)$, $H_2(x)$, $H_3(x)$, $H_4(x)$ et $H_5(x)$ et déterminer la parité des polynômes d'Hermite $H_{2n}(x)$ et $H_{2n+1}(x)$.

(c) A l'aide des fonctions propres normées $\varphi_n(x)$ de l'exercice précédent, qui satisfont la relation d'orthonormalité,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m(x)\, \varphi_n(x)\, w(x)\, dx = \delta_{mn}\,,$$

montrer que la relation d'orthogonalité entre les polynômes d'Hermite s'écrit,

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x)\, H_n(x)\, w(x)\, dx = \delta_{mn}\, 2^n \sqrt{\pi}\, n!\,,$$

où la fonction poids $w(x) = e^{-x^2}$ sera définie dans le cours suivant.

(d) Résoudre l'équation d'Hermite à l'aide de la méthode de Frobenius,

$$H_n(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j\, x^{s+j} \qquad \text{où} \qquad s \geqslant 0 \qquad \text{et} \qquad a_0 \neq 0\,.$$

Montrer que le développement en série de puissance des polynômes d'Hermite s'écrit,

$$H_n(x) = a_n \sum_{j=0}^{[n/2]} (-1)^j\, \frac{n!}{2^{2j}\, j!\, (n-2j)!}\, x^{n-2j}\,,$$

où la partie entière de $n/2$ est définie comme,

$$\left[\frac{n}{2}\right] = \begin{cases} n/2 & \text{si } n \text{ est pair} \\ (n-1)/2 & \text{si } n \text{ est impair} \end{cases}$$

(e) Montrer que les polynômes d'Hermite pairs $H_{2n}(x)$ et impairs $H_{2n+1}(x)$ s'écrivent,

$$H_{2n}(x) = (-1)^n \sum_{k=0}^{n} (-1)^k\, \frac{(2n)!}{(2k)!\,(n-k)!}\, (2x)^{2k}\,,$$

$$H_{2n+1}(x) = (-1)^n \sum_{k=0}^{n} (-1)^k\, \frac{(2n+1)!}{(2k+1)!\,(n-k)!}\, (2x)^{2k+1}\,.$$