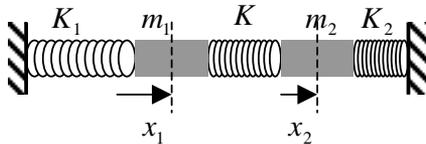


LP 54 Comportement dynamique des systèmes couplés:
Oscillateurs à deux degrés de liberté en mécanique classique,
Systèmes à deux niveaux d'énergie en physique quantique.
Analogie et différences.

A) Comportement classique: oscillateurs couplés:

1) Positions du problème:

On cherche à déterminer quel est le comportement dynamique de deux oscillateurs, à priori différents, couplés par un ressort:



Pour les oscillateurs libres, les deux équations différentielles s'écrivent:

$$m_1 \frac{d^2 x_1}{dt^2} = -K_1 x_1 \text{ et } m_2 \frac{d^2 x_2}{dt^2} = -K_2 x_2. \text{ On introduit}$$

alors les pulsations caractéristiques des deux oscillateurs

libres $\omega_1 = \sqrt{\frac{K_1}{m_1}}$ et $\omega_2 = \sqrt{\frac{K_2}{m_2}}$.

L'effet du couplage a pour effet d'introduire une force supplémentaire qui, dépendant à la fois de x_1 et de x_2 , transforme les équations découplées en un système d'équations couplées:

$$\begin{cases} m_1 \frac{d^2 x_1}{dt^2} + K_1 x_1 + K_{12} (x_1 - x_2) = 0 \\ m_2 \frac{d^2 x_2}{dt^2} + K_2 x_2 + K_{12} (x_2 - x_1) = 0 \end{cases}$$

2) Etude en régime harmonique:

Etudions le système, comme il est d'usage sous la forme $x_1 = A_1 e^{j\Omega t}$ et $x_2 = A_2 e^{j\Omega t}$.

L'introduction de ces expressions dans le système d'équations précédent donne:

$$\begin{cases} (-\Omega^2 m_1 + K_1 + K_{12}) A_1 - K_{12} A_2 = 0 \\ -K_{12} A_1 + (-\Omega^2 m_2 + K_2 + K_{12}) A_2 = 0 \end{cases}$$

Ce système n'admet des solutions non triviales ($A_p \neq 0$) que si son déterminant est nul.

Ainsi on obtient l'équation caractéristique:

$$(-\Omega^2 m_1 + K_1 + K_{12})(-\Omega^2 m_2 + K_2 + K_{12}) - K_{12}^2 = 0$$

Le développement de ce polynôme caractéristique fournit alors, après simplification:

$$\Omega^4 - \Omega^2 \left(\omega_1^2 + \omega_2^2 + \frac{K_{12}}{m_1} + \frac{K_{12}}{m_2} \right) + \frac{K_{12}}{m_2} \omega_1^2 + \frac{K_{12}}{m_1} \omega_2^2 + \omega_1^2 \omega_2^2 = 0$$

Sans entrer dans le détail de la solution, on voit que ce polynôme bicarré admet quatre racines, dont deux seulement sont positives, Ω_1 et Ω_2 .

Les solutions se mettent alors sous la forme d'une combinaison linéaire de ces deux pulsations, appelées *pulsations propres du système*:

$$x_1 = \sum_{p=1}^2 A_{1p} e^{j\Omega_p t}, \quad x_2 = \sum_{p=1}^2 A_{2p} e^{j\Omega_p t}$$

ou en notation réelle $x_1 = \sum_{p=1}^2 A_{1p} \cos(\Omega_p t + \phi_p)$ et $x_2 = \sum_{p=1}^2 A_{2p} \cos(\Omega_p t + \phi_p)$

Notons cependant que les valeurs des A_p ne sont pas indépendantes, car le système d'équations vu plus haut montre que $\frac{A_{21}}{A_{11}} = C_1 = \frac{-\Omega_1^2 m_1 + K_1 + K_{12}}{K_{12}}$ et

$$\frac{A_{22}}{A_{12}} = C_2 = \frac{-\Omega_2^2 m_2 + K_2 + K_{12}}{K_{12}}.$$

Il n'y a donc bien que quatre inconnues dans les solutions, celle-ci étant déterminées par les conditions initiales, au nombre de quatre (positions et vitesses initiales des deux masses).

3) Modes propres:

On appelle *modes propres* les états de vibration d'un système tels que ces modes soient *harmoniques*. Cette définition est extrêmement générale et s'applique à tout système linéaire à N degrés de libertés.

Ceci signifie concrètement sur l'exemple du système à deux degrés de libertés que seule l'une des deux contributions harmoniques est présente dans le système, autrement dit, qu'il existe un p tel que $A_{1p} = A_{2p} = 0$.

Pour illustrer cette notion, étudions le système précédent dans le cas où celui-ci est symétrique, c'est-à-dire $m_1 = m_2 = m$, et $K_1 = K_2 = K$

L'équation caractéristique devient alors:

$$\Omega^4 - 2\Omega^2 \left(\omega_0^2 + \frac{K_{12}}{m} \right) + \omega_0^4 + \frac{2K_{12}}{m} \omega_0^2 = 0, \text{ ce qui donne deux solutions:}$$

$$\Omega_1^2 = \omega_0^2 \text{ et } \Omega_2^2 = \omega_0^2 + \frac{2K_{12}}{m}.$$

Ceci implique donc que, dans ce cas $C_1 = 1$ et $C_2 = -1$

On voit alors, puisque les deux pulsations sont différentes, que le mouvement de chacune des masses n'est *à priori* pas harmonique. En effet; ces mouvements sont des combinaisons linéaires de deux mouvements harmoniques. Cependant, dans deux cas très précis, ils le deviennent, et ce sont ces cas que l'on appelle des modes.

a) Mode symétrique: $x_1(0) = x_2(0) = a, \quad v_1(0) = v_2(0) = 0$:

On obtient alors les conditions initiales:

$$\begin{aligned} a &= A_{11} \cos \phi_1 + A_{12} \cos \phi_2 & a &= A_{21} \cos \phi_1 + A_{22} \cos \phi_2 \\ 0 &= -\Omega_1 \sin \phi_1 - \Omega_2 \cos \phi_2 & 0 &= -\Omega_1 A_{21} \sin \phi_1 - \Omega_2 A_{22} \sin \phi_2 \end{aligned} \text{ et}$$

Or les coefficients sont reliés ici par les relations: $A_{21} = A_{11}$ et $A_{22} = -A_{12}$, ce qui donne alors

$$a = A_{11} \cos \phi_1 + A_{12} \cos \phi_2 \quad \text{et} \quad a = A_{11} \cos \phi_1 - A_{12} \cos \phi_2$$

$$0 = -\Omega_1 A_{11} \sin \phi_1 - \Omega_2 A_{12} \sin \phi_2 \quad \text{et} \quad 0 = -\Omega_1 A_{11} \sin \phi_1 + \Omega_2 A_{12} \sin \phi_2$$

On voit alors immédiatement que ceci implique $\phi_1 = \phi_2 = 0$, et que $A_{11} = a$ et $A_{12} = 0$. On a donc alors bien:

$$x_1 = a \cos(\Omega_1 t), \quad x_2 = a \cos(\Omega_1 t), \quad \text{soit } \boxed{x_1 = x_2}$$

Il s'agit bien là d'un mode, puisque les mouvements sont redevenus harmoniques malgré le couplage.

b) Mode antisymétrique: : $x_1(0) = -x_2(0) = a$, $v_1(0) = v_2(0) = 0$:

Le système d'équation est alors identique pour les dérivées, ce qui donne toujours $\phi_1 = \phi_2 = 0$, mais cette fois on trouve $A_{11} = 0$ et $A_{12} = a$, soit:

$$x_1 = a \cos(\Omega_2 t) \quad \text{et} \quad x_2 = -a \cos(\Omega_2 t), \quad \text{soit } \boxed{x_1 = -x_2}$$

Cette étude faite dans un cas particulier se généralise à toutes les situations, et on peut alors dire que tout système d'oscillateurs couplés présente deux modes propres.

4) Coordonnées normales:

Si il existe des modes propres, ceci signifie mathématiquement qu'il existe des variables, appelées *variables découplées* ou *coordonnées normales*, telles que les équations différentielles qui régissent leur mouvement soient découplées.

En effet, considérons les deux modes propres du système symétrique étudié plus haut, et introduisons les coordonnées normales correspondant aux deux modes:

$$\psi_1 = \frac{x_1 + x_2}{2} \quad \text{et} \quad \psi_2 = \frac{x_1 - x_2}{2}. \quad \text{On voit alors que si l'oscillateur vibre dans un des deux modes, l'une de ces deux coordonnées est nulle et l'autre coïncide avec } x_1(t).$$

Si on reprend alors les deux équations différentielles couplées du début et qu'on les additionne et les soustrait, on obtient:

$$m \frac{d^2(x_1 + x_2)}{dt^2} + K(x_1 + x_2) = 0 \quad \text{et} \quad m \frac{d^2(x_1 - x_2)}{dt^2} + K(x_1 - x_2) + 2K_{12}(x_1 - x_2) = 0, \quad \text{ce qui}$$

s'écrit en fonction des coordonnées normales:

$$\frac{d^2\psi_1}{dt^2} + \Omega_1^2\psi_1 = 0, \quad \text{et} \quad \frac{d^2\psi_2}{dt^2} + \Omega_2^2\psi_2 = 0$$

On voit alors bien que ces deux équations ne sont plus couplées, et que le comportement des coordonnées normales est celui d'un oscillateur harmonique de pulsation Ω_p .

De manière générale, lorsque l'on aura affaire à des systèmes couplés, on cherchera avant tout à déterminer les modes propres ainsi que les fréquences propres, le comportement des variables "physiques" s'en déduisant aisément.

4) Formalisme matriciel:

Pour la détermination directe des pulsations et des modes propres, il existe une méthode systématique et très avantageuse: le formalisme matriciel.

Il consiste à poser $X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$.

Le système d'équations algébriques du départ s'écrivent alors:

$$\Omega^2 X = \begin{bmatrix} \omega_1^2 + K_{12}/m_1 & -K_{12}/m_1 \\ -K_{12}/m_2 & \omega_2^2 + K_{12}/m_2 \end{bmatrix} X$$

Ainsi, la détermination de Ω apparaît comme la détermination des *valeurs propres* de la matrice. Cette méthode donne également, ce qui est moins évident, les *modes propres du système* qui correspondent aux *vecteurs propres* de cette même matrice. En effet, quelques notions d'algèbre linéaire montre que tout vecteur de l'espace à deux dimensions ainsi défini sera une combinaison linéaire des vecteurs propres de cette matrice, ceux-ci n'étant associés qu'à *une seule valeur propre* de la matrice.

Pour illustrer notre propos, reprenons toujours le cas simple mais très instructif du cas du système symétrique.

La matrice s'écrit alors $\begin{bmatrix} \omega_0^2 + W^2 & -W^2 \\ -W^2 & \omega_0^2 + W^2 \end{bmatrix}$, où $W^2 = \frac{K_{12}}{m}$, et la détermination des valeurs propres se fait en diagonalisant la matrice $\begin{bmatrix} \omega_0^2 + W^2 - \Omega^2 & -W^2 \\ -W^2 & \omega_0^2 + W^2 - \Omega^2 \end{bmatrix}$, ce qui donne les valeurs propres $\Omega_1 = \sqrt{\omega_0^2} = \omega_0$ et $\Omega_2 = \sqrt{\omega_0^2 + W^2}$. On retrouve bien les pulsations propres, et les vecteurs propres sont alors donnés par $\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ et

$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$. Ce sont les mêmes vecteurs propres, mais avec une constante de proportionnalité différente, puisqu'ici on a choisi de se placer dans le cas le plus général où les vecteurs sont normés. Précédemment nous avons fait un autre choix pour que les modes propres coïncident avec les variables réelles pour les pulsations propres.

Nous n'étudions pas ici le cas général, puisque formellement il sera identique à celui des systèmes à deux niveaux en physique quantique, bien que la forme du couplage donne une plus grande généralité des résultats.

Remarquons cependant déjà une chose, sur laquelle nous reviendrons dans le cadre de l'étude quantique. Le couplage intervient uniquement par le fait qu'il existe des termes non diagonaux non nuls dans la matrice à diagonaliser. En effet, si ceux-ci étaient nuls, alors x_1 et x_2 seraient des valeurs propres de la matrice et l'effet du couplage ne se ferait sentir que par un déplacement des pulsations propres par rapport au pulsation des deux oscillateurs libres.

B) Etude des systèmes à deux niveaux en physique quantique:

1) Notions sur le formalisme quantique.

En mécanique quantique, les notions de position et de vitesse perdent complètement leur signification. En fait, les systèmes étudiés dans le cadre de la mécanique quantique sont purement probabiliste, et sont donc caractérisés par une *fonction d'onde* ψ , dont le module au carré représente une *densité de probabilité*, c'est-à-dire que la probabilité de trouver une particule, par exemple dans un volume dV s'écrit $|\psi|^2 dV$.

L'équation d'évolution d'une fonction d'onde est donnée par l'équation de Schrödinger qui est:

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t)|\psi(t)\rangle, \text{ où } |\psi(t)\rangle \text{ est un vecteur appelé } \textit{ket} \text{ qui dépend à priori du temps et}$$

où $H(t)$ est l'opérateur hamiltonien, qui est formellement une matrice associée à l'énergie totale du système, lui aussi à priori dépendant du temps.

Ici nous allons considérer uniquement des hamiltoniens ne dépendant pas du temps. Par ailleurs, comme H est associé à une grandeur physique, on peut montrer que celui-ci est diagonalisable, et que ses valeurs propres caractérisent les *énergies propres du système*.

Ecrivons donc la relation qui relie H , ses vecteurs propres et ses valeurs propres:

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle.$$

Comme H ne dépend pas du temps, celui-ci n'intervient ni dans les énergies, ni dans les kets. Les états correspondant, qui ne varient pas avec le temps, sont donc appelés *états stationnaires*.

En utilisant alors les résultats d'algèbre linéaire, on écrit que tout ket s'écrit comme une combinaison linéaire des états stationnaires, soit:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\varphi_n\rangle, \text{ les } |\varphi_n\rangle \text{ constituant une base orthogonale par définition et que l'on}$$

supposera orthonormée.

Multiplions alors scalairement l'équation de Schrödinger par l'un des $|\varphi_n\rangle$. Ceci s'écrit, dans le formalisme quantique:

$$i\hbar \frac{d\langle\varphi_n|\psi(t)\rangle}{dt} = \langle\varphi_n|H|\psi(t)\rangle = \langle\varphi_n|H \sum_n c_n(t)|\varphi_n\rangle = c_n(t)E_n$$

On en déduit donc que $c_n(t) = c_n(t_0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)}$, qui caractérise l'évolution temporelle de la projection d'un état quelconque sur un ket propre de l'hamiltonien.

2) Système à deux niveaux.

Un système à deux niveaux est caractérisé, par définition, par un hamiltonien n'admettant que deux valeurs propres E_1 et E_2 , et donc par deux états propres $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$. En appelant H_0 l'hamiltonien correspondant au système physique où ces deux états ne sont pas couplés, on a alors:

$$H_0|\varphi_1\rangle = E_1|\varphi_1\rangle$$

$$H_0|\varphi_2\rangle = E_2|\varphi_2\rangle$$

Le couplage est alors formellement décrit par une matrice 4x4 W , l'hamiltonien décrivant le système couplé s'écrivant:

$$H = H_0 + W.$$

Le but de l'étude est alors de déterminer les nouveaux états stationnaires du système, puisque ceux-ci nous permettent d'exprimer, comme on l'a vu, n'importe quel état du système.

Exprimons alors la matrice représentant H dans la base des états propres de H_0 :

$(H) = \begin{bmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{bmatrix}$, avec $W_{21} = \overline{W_{12}}$, et pour déterminer les états propres du système il nous faut résoudre l'équation aux valeurs propres $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, ce qui revient à diagonaliser la matrice $\begin{bmatrix} E_1 + W_{11} - E & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} - E \end{bmatrix}$

On reconnaît donc directement la forme obtenue pour les oscillateurs classiques. Cependant, pour que l'analogie soit complète, il faut que la matrice représentant le couplage soit hermitique, ce qui n'est pas le cas pour les oscillateurs classiques $K_{12}/m_1 \neq K_{12}/m_2$, sauf pour le cas de deux masses identiques. On a donc alors les correspondances:

$$E_p \leftrightarrow \omega_p^2$$

$$W_{ii} \leftrightarrow K_{12}/m$$

$$W_{12} \leftrightarrow K_{12}/m$$

$$E \leftrightarrow \Omega^2$$

Si on diagonalise alors la matrice précédente, on trouve les résultats suivant:

$$E_+ = \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) + \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 + W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}$$

$$E_- = \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) - \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 + W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}$$

$$\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle & |\varphi_1\rangle &= e^{j\varphi/2}\left(\cos\frac{\theta}{2}|\psi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}|\psi_-\rangle\right) \\ |\psi_-\rangle &= -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle & |\varphi_2\rangle &= e^{-j\varphi/2}\left(\sin\frac{\theta}{2}|\psi_+\rangle + \cos\frac{\theta}{2}|\psi_-\rangle\right) \end{aligned}$$

2) Analogies et différences:

Posons pour plus de clarté $\Sigma_p = E_p + W_{pp}$ $E_m = \frac{1}{2}(\Sigma_1 + \Sigma_2)$ et $\boxed{\times}$. On a donc

$$\Sigma_+ = E_m + \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2}$$

$$\Sigma_- = E_m - \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2}$$

L'effet du couplage se manifeste alors uniquement par l'existence de termes non diagonaux, comme nous l'avons signalé (les autres termes ne font que déplacer les énergies propres, mais ne dénaturent pas les états propres). Les effets sont donc:

- le couplage écarte les niveaux d'énergie, ceci étant l'analogie en mécanique de l'écartement des pulsations propres. En effet on a toujours $|E_+ - E_-| > |\Sigma_1 - \Sigma_2|$, ce qui s'écrit en mécanique classique $|\Omega_1^2 - \Omega_2^2| > |\omega_1^2 + K_{12}/m - \omega_2^2 + K_{12}/m| = |\omega_1^2 - \omega_2^2|$.
- Le couplage rend les états propres du système sans couplage non stationnaires, ce qui est l'équivalent du fait que les états propres du système sans couplage en mécanique classique ne sont plus des états harmoniques, mais un mélange de deux mouvements harmoniques.

L'analogie doit s'arrêter là, puisque les résultats ne traduisent absolument pas la même réalité physique.

En effet, si l'on mesure la position et la vitesse de l'une des masses en mécanique classique, on trouvera bien que c'est une superposition de mode.

En revanche, si l'on effectue une mesure sur le système quantique pour déterminer dans quel état "physique", c'est-à-dire l'un des \square il se trouve, la mesure ne donnera que l'une ou l'autre des énergies correspondants à ces états, c'est-à-dire l'un ou l'autre de ces états. Seulement cette mesure sera *statistiquement* régie par un mélange des deux états, puisque la *probabilité d'être dans l'un ou l'autre des états* \square va varier au cours du temps.

En effet, supposons qu'à $t = 0$ le système soit dans l'état $|\phi_1\rangle = e^{i\phi/2} \left(\cos \frac{\theta}{2} |\psi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |\psi_-\rangle \right)$.

A l'instant t il sera dans l'état $|\psi(t)\rangle = e^{i\phi/2} \left(e^{-iE_+t/\hbar} \cos \frac{\theta}{2} |\psi_+\rangle - e^{-iE_-t/\hbar} \sin \frac{\theta}{2} |\psi_-\rangle \right)$, et l'amplitude de probabilité de trouver le système par exemple dans l'état $|\phi_2\rangle$ va s'écrire:

$$\left| \langle \phi_2 | \psi(t) \rangle \right|^2 = \sin^2 \theta \sin^2 \left(\frac{E_+ - E_-}{2\hbar} t \right).$$