

L3 PHYSIQUE FONDAMENTALE
TRAVAUX PRATIQUES SUR ORDINATEURS DE PHYSIQUE QUANTIQUE

RAPPORT 1
RESOLUTION DE L'EQUATION DE SCHRÖDINGER

ALEXANDRE FAURE et JULIEN DUPRE DE BAUBIGNY

2008 - 2009

Dans ce premier rapport, nous réaliserons une approche numérique de l'équation de Schrödinger, équation fondamentale en mécanique quantique. Néanmoins, nous réaliserons cette résolution dans le cas de l'équation de Schrödinger à une dimension notée x qui décrit le mouvement d'une particule de masse m soumis à un potentiel $V(x)$. L'équation correspondante est donc :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x)$$

Cependant, pour simplifier la démarche, nous utiliserons la méthode des différences finies explicitée dans l'énoncé qui revient simplement à réécrire la dérivée partielle seconde de la fonction d'onde ψ en utilisant une formule approchée. Celle-ci décrit la variation de la fonction comme une division de N points régulièrement espacés de Δx .

Pour les résultats qui seront présentés, nous nous plaçons dans les unités atomiques : $m = \hbar = 1$.

I) L'oscillateur harmonique

Considérons une particule quantique de masse m qui se déplace dans une direction x et soumise à un potentiel $V(x)$ telle que :

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

I.1) Rappelons en premier lieu, l'expression de l'énergie E de la particule dans les différents niveaux stationnaires $|n\rangle$:

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

dans le système d'unités choisies et pour la pulsation $\omega = 1$.

Puis rappelons également la propriété générale de la fonction d'onde d'un état lié (la particule est littéralement piégée dans le puits) : elle est de carré sommable c'est-à-dire que l'intégrale de moins l'infini à plus l'infini de la norme de la fonction d'onde au carré est finie. Elle est égale à 1 étant donné que sa densité de probabilité dans tous l'espace vaut 1.

I.2) Nous utiliserons le programme p1.m pour tracer la fonction d'onde du premier état lié du potentiel $V(x)$.

On rentrera le terme d'énergie E à la main :

```
E=h_bar*(1+1/2);
N=10000
```

On choisira le domaine d'intégration $[-5,5]$ et un nombre de points assez grands (ici, on choisira 10000) pour obtenir une « bosse » assez visible (plus le nombre de points est important, meilleure est la « courbure ») et pour qu'il y ait aussi une normalisation aux bornes de l'intervalle.

Il faudra également prendre garde à bien renseigner les premiers points de la fonction d'onde :

$\psi(1)=0.1;$

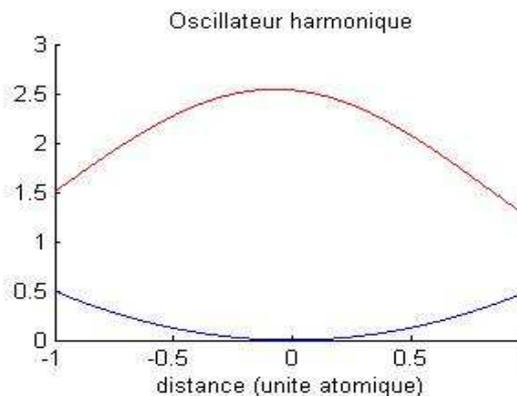
$\psi(2)=0.2;$

étant donné que l'on utilise une relation de récurrence dans le programme.

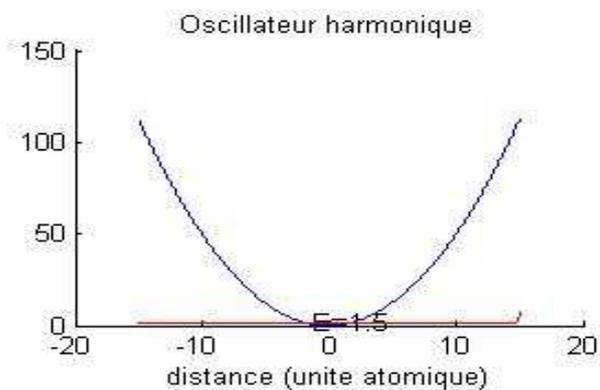
En ce qui concerne le domaine d'intégration, il ne faut pas que celui-ci soit trop grand (ou trop faible) car cela influe directement sur la pas avec les relations suivantes du programme :

$x=\text{linspace}(x_{\text{init}},x_{\text{final}},N);$

$dx=x(2)-x(1);$



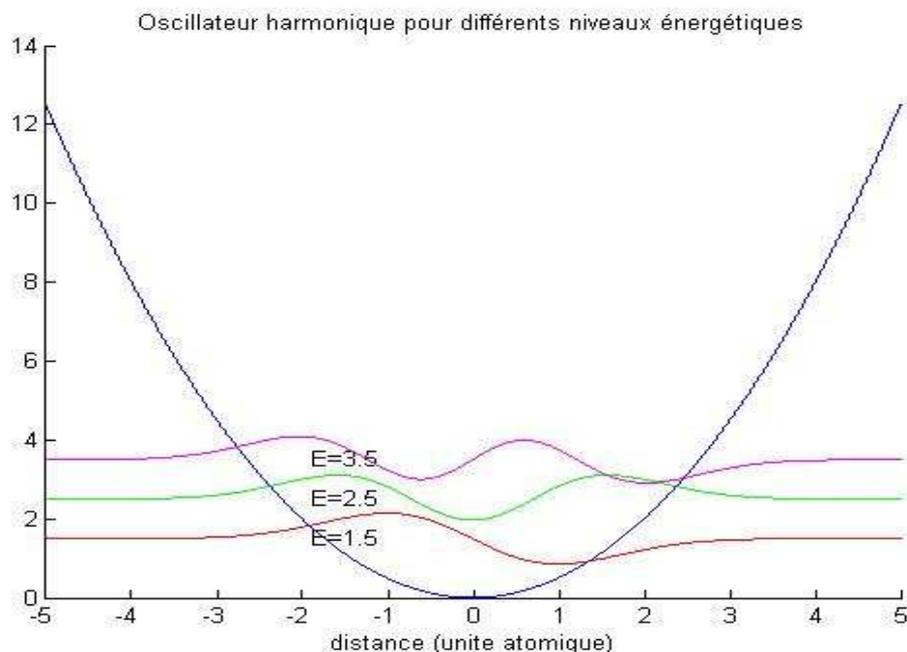
Intervalle trop petit



Intervalle trop grand

L'intervalle choisi ici qui convient pour nos mesures est l'intervalle $[-5,5]$.

I.3) Fonctions d'onde des 3 premiers niveaux d'énergie :

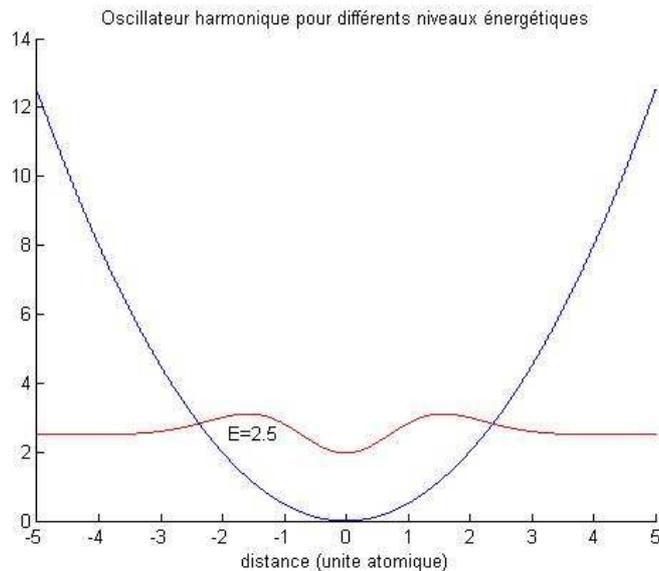


L'étape « norme » du programme correspond tout simplement à la normalisation des fonctions d'ondes que l'on a tracé précédemment. La norme de $\psi(x)$ s'écrit en effet :

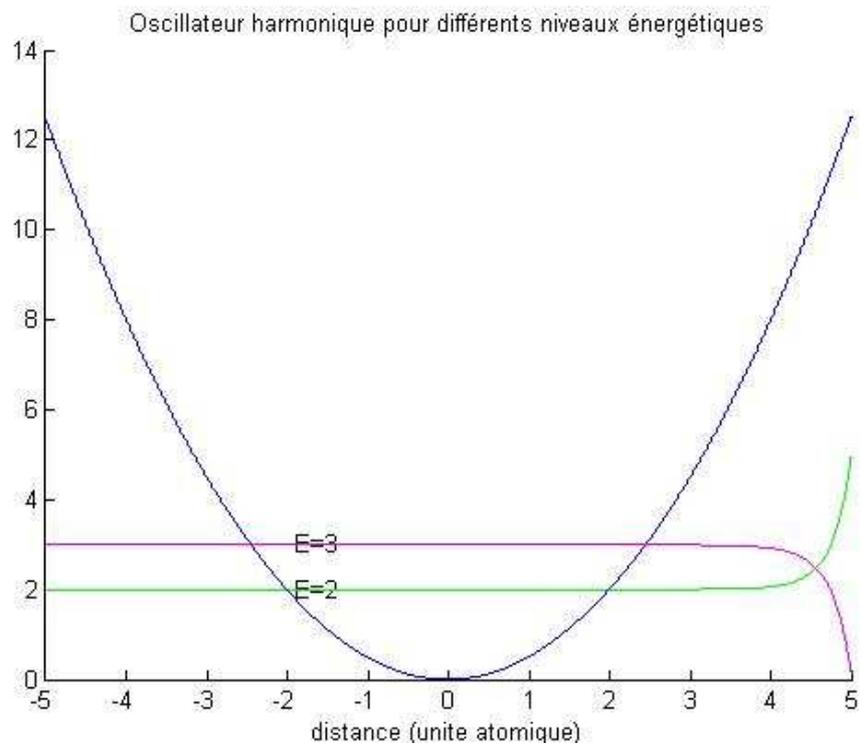
$$|\psi(x)| = \sqrt{\psi^2(x)}$$

I.4) Etudions l'effet d'un écart d'énergie par rapport à la valeur exacte :

Rappelons que lorsque l'on prend une valeur de l'énergie exacte, par exemple $E = \hbar(2 + \frac{1}{2})$, on obtient la figure suivante :



Observons maintenant l'effet d'un écart d'énergie (par rapport à la valeur exacte). On choisit successivement : $E = \hbar(2)$ (courbe verte) et $E = \hbar(3)$ (courbe magenta) qui sont des valeurs d'énergie respectivement en-dessous et au-dessus de la valeur exacte. On obtient donc :



On s'aperçoit donc que lorsque l'on a un écart d'énergie inférieur à la valeur exacte, on obtient une divergence vers l'infini au niveau de la borne supérieure de notre domaine d'intégration. Inversement, lorsque l'on a un écart d'énergie supérieur à la valeur exacte, on obtient une divergence vers moins l'infini au niveau de la borne supérieure du domaine d'intégration.

Ce problème de divergence provient directement de l'utilisation de la méthode des différences finies.

Ces observations simplifiées de l'oscillateur harmonique nous ont donc permis de mettre en évidence une notion essentielle en mécanique quantique : les valeurs que prennent les énergies doivent absolument être quantifiées. Mais on a aussi remarqué que le processus utilisé de méthode des différences finies n'est pas optimal pour notre problème : lorsque l'on s'écarte de la valeur exacte, il ne devient pas possible d'obtenir un tracé satisfaisant des fonctions d'ondes.

II) Puits de potentiel non harmonique

On considère maintenant un potentiel pour lequel il n'y a pas de solutions analytiques :

$$\begin{cases} V(x) = \frac{|x|^\alpha}{\alpha(\alpha - 1)} ; \text{ pour } 1,5 \leq \alpha \leq 5 \text{ et } \alpha \neq 2 \\ V(x) = 0 ; \text{ sinon} \end{cases}$$

En effet, si l'on prend $\alpha = 2$ on retombe sur l'oscillateur harmonique avec $m = \omega = 1$

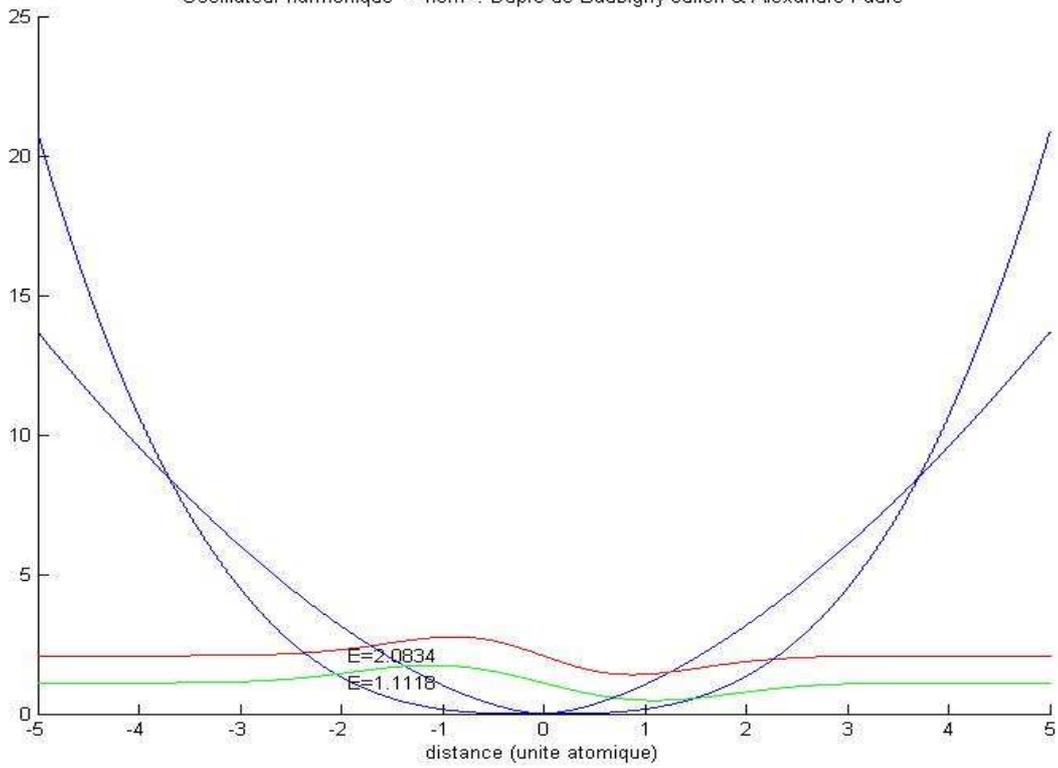
II.1 et II.2) On cherche à définir les énergies des premiers niveaux. Nous avons choisi deux α différents : 1,6 et 3.

La méthode utilisée sera celle des approximations successives.

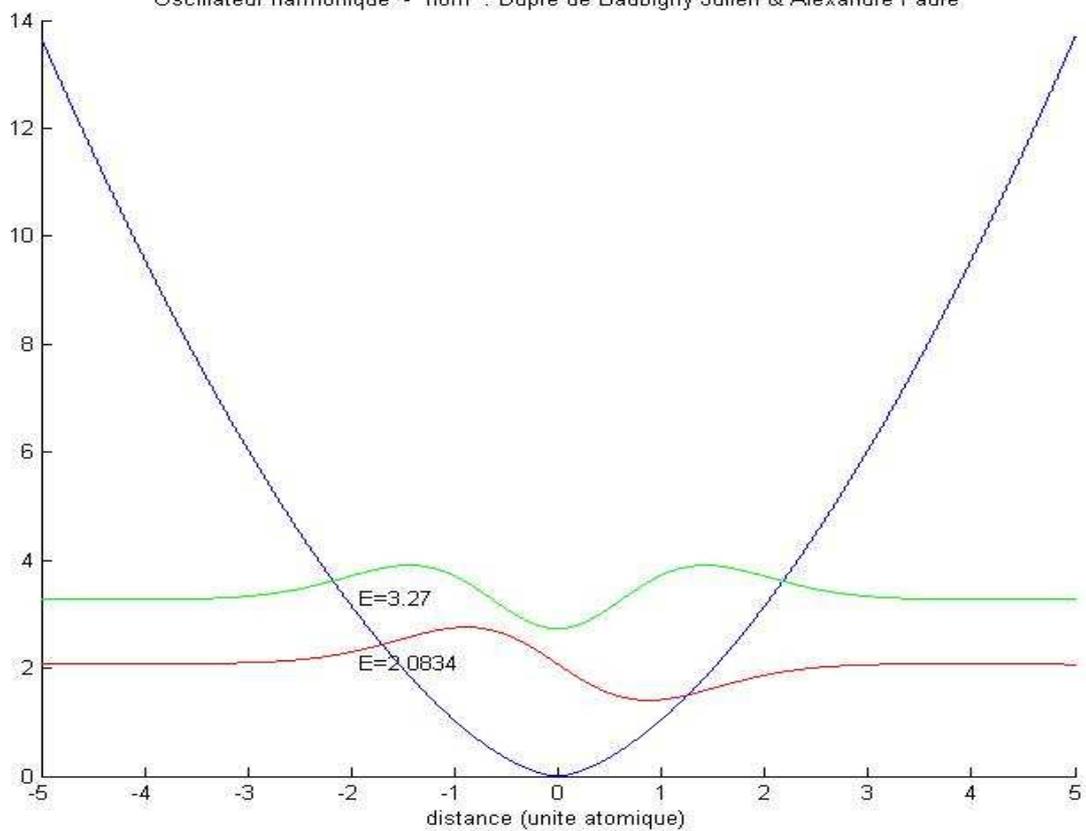
Si l'énergie est mal choisie, on remarque que la fonction diverge (en haut ou en bas). Plus on se rapproche de la valeur réelle de l'énergie, moins la fonction d'onde diverge. Par tâtonnements successifs on obtient une valeur de l'énergie assez précise (8 chiffres significatifs).

$$\begin{aligned} \text{Pour } \alpha = 1,6 : \quad E_1 &= 2,0834381 \\ E_2 &= 3,2699624 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Pour } \alpha = 3 : \quad E_1 &= 1,1117608 \\ E_2 &= 3,0679835 \end{aligned}$$



Niveau d'énergie 1



Niveau d'énergie 2

II.3) Les niveaux du potentiel harmonique sont obtenus quand $\alpha = 2$ (cf. graphique $E = f(n)$)

$$\text{Pour } \alpha = 2 : \quad E_1 = 1,5 \\ E_2 = 2,5$$

Les niveaux du potentiel carré infini sont obtenus grâce à la relation : $E = \frac{n^2\pi^2}{2L^2}$ avec $\alpha \equiv L = 3$

$$E_1 = 0,5483 \\ E_2 = 2,193$$

On constate que l'énergie diverge pour un puits de potentiel non harmonique : pour $\alpha < 2$ il diverge en restant en dessous de l'identité, et pour $\alpha > 2$ il diverge plus fortement.