L3 PHYSIQUE FONDAMENTALE

TRAVAUX PRATIQUES SUR ORDINATEURS DE PHYSIQUE QUANTIQUE

RAPPORT 2

~

ETATS NON STATIONNAIRES DANS UNE BOITE

ALEXANDRE FAURE et JULIEN DUPRE DE BAUBIGNY

2008 - 2009

Dans ce deuxième rapport de mécanique quantique, nous proposons d'étudier les états stationnaires et non-stationnaires dans une boîte.

I/ Etats stationnaires

Nous considérerons dans cette première partie une particule de masse m dans un puits de potentiel infiniment profond à une dimension de largeur L.

I.1/ On rappelle les expressions E_n de l'énergie des états liés de la particule :

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$$

Avec n numéro de l'état de la fonction d'onde ($n = 1,2, \ldots$) et L largeur du puits.

Toujours par définition, les fonctions d'ondes $\psi_n(x)$ correspondant aux états liés s'écrivent :

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)$$

I.2/ Les fonctions d'ondes des états dépendants du temps $\Psi_\mathrm{n}(\mathrm{x})$ s'écrivent, quant à elles, de la manière suivante :

$$\Psi_\mathrm{n}(\mathrm{x}) = \sum_n C_n \, \psi_n(x) \, e^{-\frac{i E_n t}{\hbar}} = \sum_n C_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \, e^{-\frac{i E_n t}{\hbar}}$$

Et les probabilités de présence associées :

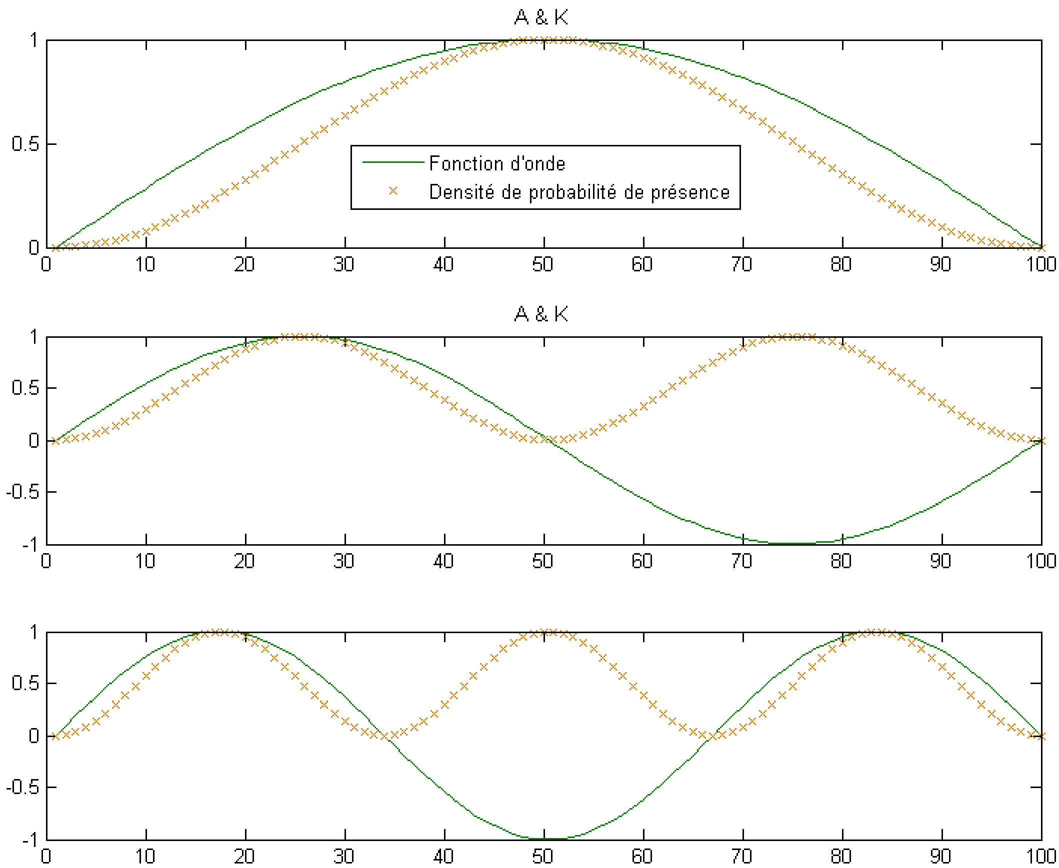
$$\sum_n |C_n|^2 = 1$$

I.3/ Une fois toutes les formules posées, nous allons tracer les fonctions d'ondes et les densités de probabilités de présence des trois premiers états grâce au programme Matlab `nonstat.m`.
Nous utiliserons les unités atomiques à savoir : $m = 1$, $\hbar = 1$ et nous prendrons également $L = 1$.

En conséquence, nous modifierons le programme `nonstat.m` de la façon suivante :

```
% Constantes du probleme
hbar=1;
% Largeur du puits
L=1;
% masse;
m=1;
```

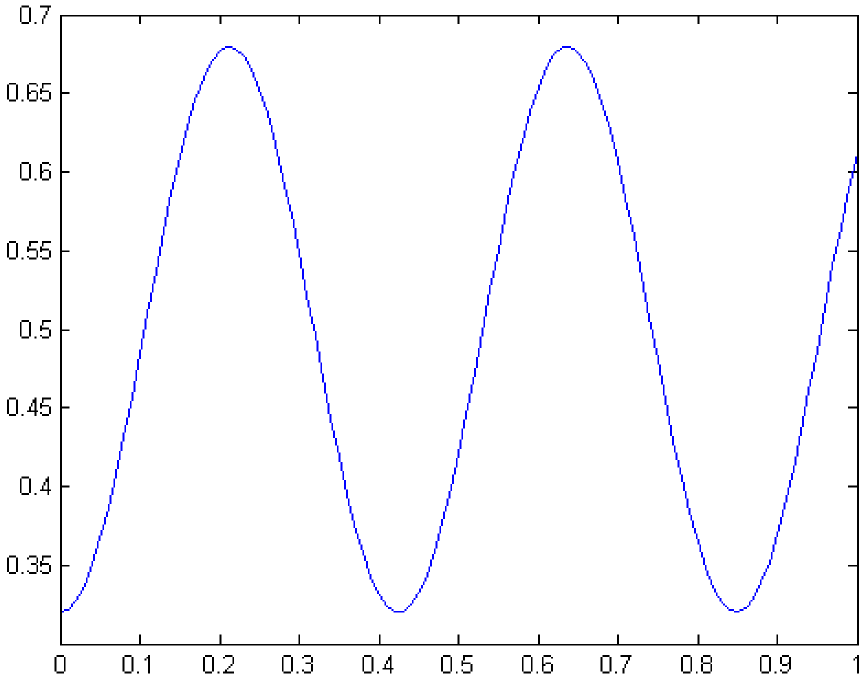
```
% Discretisation de l'axe des x
Nx=100;
x=linspace(0,L,Nx);

% calcul des densités de probabilité de présence
for k=1:3
    fpk=sqrt(1/L)*sin(pi.*k'*x/L);
    fpk1=(1/L)*(sin(pi.*k'*x/L)).^2;

title([nom]);
subplot(3,1,k)
plot(fpk)
hold on
plot(fpk1,'x')
end
```



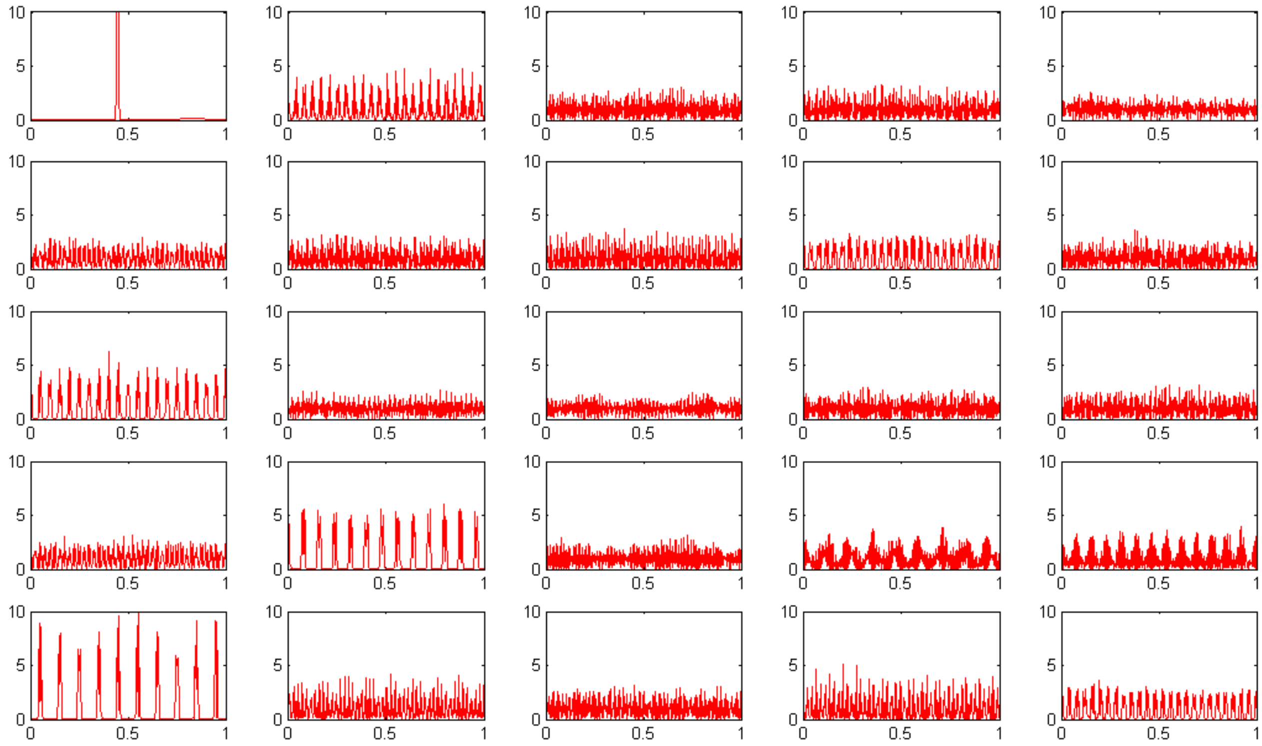
II/ Etats non-stationnaires

II.1/ Considérons désormais un électron dans l'état $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle]$. Dès lors, on se propose de calculer sa valeur moyenne notée $\langle x \rangle_\Psi$:

$$\langle x \rangle_\Psi = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}[\langle\Psi_1| + \langle\Psi_2|]\right) x \left(\frac{1}{\sqrt{2}}[|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle]\right)$$



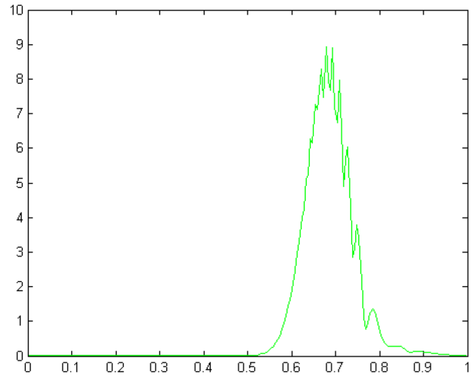
II.2/ On rappelle l'expression de la densité de probabilité de présence $|\Psi|^2$ de l'électron dans l'état Ψ :

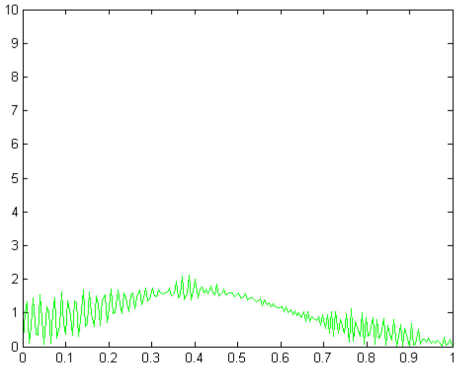


II.3/

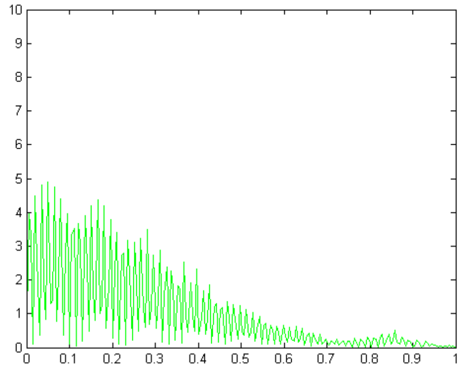
II.4/ Etudions la forme de la densité de probabilité au cours du temps.

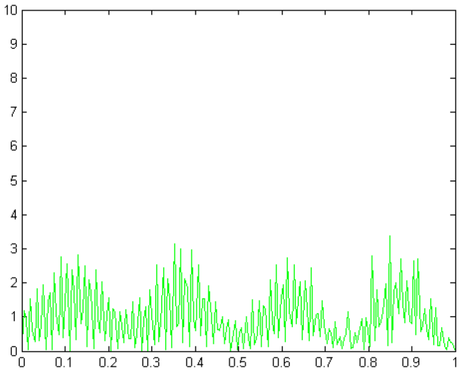
Au début nous avons une densité de probabilité en forme de gaussienne qui se propage et rebondie sur les parois.





On observe assez vite que la forme de la densité de probabilité se déforme au cours du temps.





On peut aussi constater l'apparition d'interférences constructives et destructives.

Nous constatons également, un phénomène de renaissance : la forme de la densité de probabilité revient progressivement à sa forme initiale pour ensuite se déformer à nouveau.