MÉCANIQUE QUANTIQUE

TRAVAUX PRATIQUES No. 2 (Durée: 3 h)

Recherche de nœuds

On considère les polynômes d'Hermite [1] , orthogonaux pour le produit scalaire

$$\langle f|g\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)g(x)e^{-x^2}\, dx$$

et définis par la relation de récurrence

$$H_j = x\sqrt{\frac{2}{j}}H_{j-1} - \sqrt{\frac{j-1}{j}}H_{j-2}$$

avec $H_{-1} = 0$ et $H_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}}$.
On peut montrer que $H'_j = \sqrt{2j}H_{j-1}$ et que les racines de H_j encadrent celles de H_{j-1}.

1. Écrire une fonction Scilab réentrante qui permette de visualiser le graphe de $H_j(x)$ pour $|x| < 5$ et $j < 5$. Faire de même pour $H_j^2(x)$, puis dessiner $H_j^2(x)e^{-x^2}$ et $\frac{1}{2}x^2$ sur le même graphe. Commenter les résultats.

2. Modifier le programme précédent pour trouver tous les zéros de $H_j(x)$ pour $j < 5$; on pourra utiliser la fonction `fzero` et le fait que les racines de H_j encadrent celles de H_{j-1}, une à une.

[1] Ces polynômes, multipliés par $e^{-x^2/2}$, constituent une base de fonctions propres pour l'oscillateur harmonique de Hamiltonien $\widehat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}x^2\widehat{I}$

Méthode de Numerov

La méthode de Numerov permet de résoudre des équations différentielles ordinaires avec valeur propre, en particulier l'équation de Schrödinger unidimensionnelle qui peut s'écrire en prenant $\hbar = m_e = 1$

$$\Delta\Psi = 2(V(x) - E)\Psi$$

où $V(x)$ est le potentiel auquel est soumis la particule. Si ce potentiel représente un puits (par exemple le potentiel harmonique adimensionné $\frac{1}{2}x^2$) la particule est liée, et en dehors d'une certaine zone d'espace sa fonction d'onde diminue exponentiellement vite. La méthode de Numerov consiste à partir d'un point X_{min} « loin à gauche », où la fonction d'onde est quasi-nulle, à résoudre numériquement l'équation jusqu'à un point « modérément loin à droite » $X_{\text{d}} + \Delta x$, obtenant ainsi une fonction Ψ_{g}. Pour satisfaire les conditions de continuité de la mécanique quantique (et trouver ainsi E, ce qui est le but de la méthode) on impose le raccordement en X_{d} de cette solution Ψ_{g} avec une solution Ψ_{d} calculée en partant d'un point X_{max} « loin à droite », jusqu'à $X_{\text{d}} - \Delta x$.

Ainsi les conditions de raccordement s'écrivent

$$\Psi_{\text{g}}(X_{\text{d}}) = \Psi_{\text{d}}(X_{\text{d}}) \quad \Psi'_{\text{g}}(X_{\text{d}}) = \Psi'_{\text{d}}(X_{\text{d}})$$

Numériquement, la méthode consiste à multiplier Ψ_{g} par $\Psi_{\text{d}}(X_{\text{d}})/\Psi_{\text{g}}(X_{\text{d}})$ et à calculer la dérivée par les différences premières.

On cherche donc les E qui annulent la fonction

$$F(E) = \frac{\Psi_{\text{d}}(X_{\text{d}} + \Delta x) - \Psi_{\text{d}}(X_{\text{d}} - \Delta x) - \Psi_{\text{g}}(X_{\text{d}} + \Delta x) + \Psi_{\text{g}}(X_{\text{d}} - \Delta x)}{\Delta x^2 \Psi_{\text{d}}(X_{\text{d}})}$$

(la division est là pour rendre ce nombre significativement grand).

1. Tester la méthode dans le cas du potentiel $\frac{1}{2}x^2$. On cherchera les niveaux d'énergie inférieure à 8, en prenant $\Delta x = 0{,}001$, $X_{\text{d}} = 3{,}23$, $X_{\text{min}} = -X_{\text{max}} = 7{,}00$, et en appliquant une recherche de zéro pour trouver les E. Que constatez-vous ?

   Indication : on résoudra l'équation de Schrödinger à l'aide de `ode`. *Pour cela, il faut se ramener à un système différentiel du premier ordre à trois composantes : la dérivée du vecteur $\vec{v} = (\psi, \frac{d\psi}{dx}, E)$ vaut en effet*

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} &= v_2 \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= 2(V(x) - E)v_1 \\ \frac{dE}{dx} &= 0 \end{aligned}$$

2. Appliquer à $V(x) = 6\left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\cosh^2(x)}\right]$ et tracer les fonctions d'onde trouvées en précisant leurs énergies

3. Appliquer au potentiel de votre choix : puits de potentiel fini de profondeur croissante, par exemple