

MÉCANIQUE QUANTIQUE
TRAVAUX PRATIQUES No. 1 (Durée: 3 h)

Équation de Schrödinger dépendant du temps

On considère une particule quantique de masse unité (on prendra aussi $\hbar = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1$) représentée par un paquet d'ondes gaussien dans un problème monodimensionnel :

$$\psi(x) = e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2} + i\xi x}$$

On discrétise l'espace pour $-10 < x < 10$ par pas de $\Delta x = 0,1$ unités atomiques, et on suppose que la particule est soumise à un potentiel $V(x)$.

1. Rappeler l'équation de Schrödinger dépendant du temps en fonction du Hamiltonien \hat{H} de la particule que l'on exprimera
2. On discrétise l'opérateur énergie cinétique par la formule à trois points :

$$\Delta\psi = \frac{1}{\Delta x^2} (\psi(x + \Delta x) + \psi(x - \Delta x) - 2\psi(x))$$

on suppose que ψ est nul hors de l'intervalle d'étude,

et on approxime l'opérateur d'évolution de la fonction d'onde de l'instant t à l'instant $t + \Delta t$ par

$$\psi(t + \Delta t) = \frac{1 - i\frac{\Delta t}{2}\hat{H}}{1 + i\frac{\Delta t}{2}\hat{H}}\psi(t)$$

(méthode de Crank-Nicholson). On prendra $\Delta t = 0,01$ unités atomiques.

- (a) Ecrire le programme Scilab correspondant pour visualiser l'évolution de ψ sur 10 unités atomiques de temps. Indication : exprimer l'opérateur d'évolution sous la forme d'une matrice, puis appliquer répétitivement cette matrice.
- (b) On prend $\sigma = 2$, $V = 0$ et $\xi = 0$. Visualiser l'élargissement de la fonction d'onde au cours du temps.
- (c) On prend $\sigma = 2$, $V = 0$ et $\xi = 10$. Visualiser la progression et l'élargissement de la fonction d'onde au cours du temps. Que se passe-t-il au bord de l'intervalle ? Tracer au cours du temps la position du maximum de probabilité de présence.
- (d) On considère une marche de potentiel de hauteur 10 unités, largeur 1, situé en $x = 3$. Reprendre la question précédente et commenter le résultat.
- (e) Même question pour une cuvette de potentiel.
- (f) On suppose désormais que $V = \frac{1}{2}x^2$. Commenter le résultat obtenu.
- (g) Reprendre les questions précédentes en faisant varier ξ , σ , la hauteur ou la profondeur des marches de potentiel.