MODÉLISATION NUMÉRIQUE

TRAVAUX DIRIGÉS No. 5 (Durée: 2 h)

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 par différences finies de pas Δx l'équation jusqu'à un point « modérément loin à droite » $X_{\mathrm{d}} + \Delta x$, 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 $X_{\mathrm{d}} - \Delta x$.

Ainsi les conditions de raccordement s'écrivent

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

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

On cherche donc les E qui annulent la fonction

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

(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 $\Delta x = 0{,}001$, $X_{\mathrm{d}} = 3{,}23$, $X_{\mathrm{min}} = -X_{\mathrm{max}} = 7{,}00$, et en appliquant une dichotomie pour trouver les E. Que constatez-vous ?
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