

# PHYS2026-1: Physique 4 - Physique microscopique

## Introduction à la mécanique quantique - Projet

### Contexte et objectifs

Dans la plupart des matériaux solides, les éléments constitutifs de la matière (les atomes) sont arrangés de façon ordonnée dans l'espace: on parle alors de matériaux cristallins. Déterminer la fonction d'onde des électrons d'un matériau constitue l'essence même de la physique de la matière condensée. La connaissance de ces fonctions d'onde permet en effet de comprendre et prédire les propriétés physiques (et chimiques) observées macroscopiquement, telles que la conductivité électrique ou thermique, la polarisabilité, le gap d'énergie, la température de fusion, la chaleur spécifique, l'aimantation, le module d'élasticité linéaire, *etc.*

La configuration spatiale des atomes répond à la contrainte de minimisation de l'énergie du système, énergie provenant des interactions entre particules avoisinantes. Ces interactions incluent notamment la force coulombienne entre noyaux, entre électrons, et entre noyaux et électrons. Cependant, seule cette dernière participe de manière substantielle à l'énergie totale du système<sup>1</sup>. Ainsi, une approximation simplifiée pour décrire un cristal consiste à représenter son potentiel complexe par une série périodique de puits de potentiel Coulombiens adoucis (pour éviter leur divergence) à une dimension. Un tel puits Coulombien prend la forme suivante:

$$V(x) = \frac{-Qe/(4\pi\epsilon_0)}{\sqrt{(x-x_0)^2 + a^2}}, \quad (1)$$

où  $Q$  est la charge des noyaux,  $e$  la charge élémentaire,  $\epsilon_0$  la permittivité diélectrique du vide,  $x_0$  le centre du puits et  $a$  la constante d'adoucissement. Notez également que nous ne considérerons que des interactions dites "au premier voisin". Finalement, on peut poser qu'aux bords du système (à l'interface avec le vide), le potentiel vaut 0.

Selon le théorème de Bloch, sous un potentiel périodique, les fonctions d'onde électroniques respectent la périodicité du potentiel :

$$\psi(x+L) = \psi(x), \quad (2)$$

où  $L$  est la période du réseau et  $x$  est la position spatiale. Ce projet vise à illustrer cette propriété en résolvant numériquement l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour un potentiel périodique.

### Enoncé

Dans le cadre de ce projet, il vous est demandé d'examiner, par une étude numérique, le phénomène décrit ci-dessus en résolvant numériquement l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour un potentiel périodique Coulombien 1D composé de  $N$  puits séparés de  $L = 0.05$  nm. Pour cela, vous devrez implémenter la méthode dite "transfer-matrix method" (TMM) afin de déterminer les énergies des particules permises dans le système. Ensuite, il vous faudra explicitement résoudre l'équation différentielle de Schrödinger et chercher la fonction  $\psi(x)$  répondant aux contraintes du problème. Votre rapport devra au moins contenir les sections suivantes :

1. Une introduction vulgarisée à la description d'un cristal par une chaîne périodique de puits de potentiel (1-2 pages).
2. Les développements analytiques sur lesquels se basent votre implémentation numérique (résolution de l'équation de Schrödinger pour une marche d'énergie, application des conditions de continuité, mise sous forme matricielle, expression des conditions de bord du système). Notez que nous utiliserons des conditions de bord de type Dirichlet exprimant l'annulation de la fonction d'onde en les extrémités du système. Veuillez à faire le lien explicite entre vos résultats analytiques et votre implémentation numérique (3-5 pages).
3. Une description de la méthode utilisée pour décomposer un puits de potentiel en une succession de  $n$  marches rectangulaires. Cette section doit contenir une explication de la méthode que vous avez utilisée pour déterminer la largeur et la hauteur de chacune des  $n$  marches. Justifiez votre choix (0.5-1 page).

---

<sup>1</sup>Il s'agit ici d'une affirmation simplifiant à outrance la réalité mais permettant une première approche pédagogique aux matériaux complexes.

4. Une description, assez brève, de l'approche de résolution de l'équation différentielle (0.5 page).
5. L'analyse des effets de la charge des noyaux  $Q$ , du paramètre d'adoucissement  $a$ , du nombre de puits  $N$  et du nombre de marches par puits  $n$  sur les résultats obtenus (énergies des particules et affichage des fonctions d'onde). Utilisez des valeurs que vous estimerez pertinentes. Sont notamment attendus les cas  $Q = (e, 2e, 6e, 14e)$ ,  $N = (1, 2, 4, 8, 16, 32)$ ,  $a = (0.01, 0.05)$  nm et  $n = 5, 10, 25, 50$ . Veillez à bien discuter physiquement les résultats obtenus (ne vous contentez pas de les décrire). (longueur libre dans la mesure du raisonnable)
6. *Bonus*: Pour les cas  $Q = e$ ,  $a = 0.1$  et  $N = (1, 20)$ , étudier quantitativement l'adéquation des résultats au théorème de Bloch. Discuter.(1-2 pages)

Le détail du nombre de pages doit vous servir de guide et de garde-fou. Si le rapport est un peu en dehors des limites, il n'y a pas nécessairement d'inquiétude à avoir pour l'évaluation. Par contre, un rapport de 30 pages (hors annexe) ne sera certainement pas accepté. Une conclusion, d'une longueur comprise entre 0.5 et 1 page, doit également être prévue. Celle-ci consistera en un bref résumé de vos résultats et en une mise en perspective des implications physiques de vos découvertes. N'oubliez pas non plus d'inclure une bibliographie. Finalement, n'oubliez pas d'interpréter physiquement au maximum vos résultats, et de ne pas vous contenter de les décrire. En effet, il s'agit d'un projet à développer dans le cadre d'un cours de *physique*.

Pour terminer, voici quelques indications susceptibles de vous aider dans le travail de programmation:

1. En principe, seules les bibliothèques Numpy et Matplotlib et Scipy sont nécessaires pour réaliser le projet.
2. Il existe un type complexe dans Numpy.
3. Pour résoudre l'équation différentielle, utilisez la fonction `solve_bvp` de Numpy<sup>2</sup>.
4. Il est fortement recommandé (pour votre bien!) d'utiliser un environnement virtuel Python pour réaliser le projet. Cela vous évitera bien des ennuis par la suite, et vous permettra de facilement nous communiquer les librairies que vous aurez utilisées ainsi que leur version en utilisant `pip3 freeze > requirements.txt`.
5. Et bien sûr... Divisez bien votre code en fonctions et commentez-le autant que nécessaire !

---

<sup>2</sup>Ne soyez pas surpris de la sensibilité des résultats au guess utilisé dans la fonction. C'est attendu !