

PHYS2026-1: Physique 4 - Physique microscopique

Introduction à la mécanique quantique - Projet

Interaction au sein d'un gaz raréfié

Potentiel de Lennard-Jones

Le potentiel d'interaction entre deux atomes voisins peut-être approché par le potentiel de Lennard-Jones :

$$V_{LJ}(r) = 4E_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

où E_0 représente la profondeur de puits (voir Figure 1). Il s'agit d'un potentiel empirique décrivant l'interaction entre deux atomes ou molécules sur base des interactions d'attraction (Van der Waals) et de répulsion (non-interpénétration des nuages électroniques) à courte-distance. La variable r représente la distance entre deux atomes et σ est la valeur de r pour laquelle V_{LJ} s'annule. Ce potentiel est notamment utilisé pour décrire les systèmes gazeux.

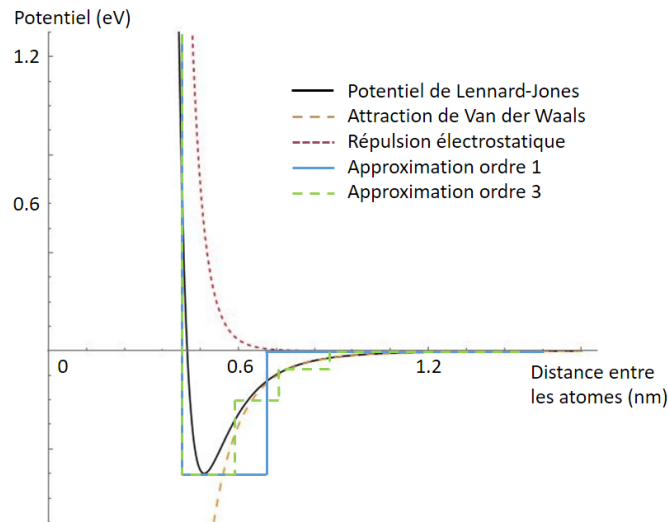


Figure 1: Le potentiel de Lennard-Jones décrit la variation d'énergie potentielle d'un système bi-atomique en fonction de r , la distance séparant les deux atomes. La courbe en noir correspond à $V_{LJ}(r)$, qui résulte de la superposition d'un terme d'attraction (pointillés jaunes) et d'un terme de répulsion (pointillés rouges). Les traces en vert et bleu sont des exemples d'approximation par une série de puits rectangulaires, d'ordre 1 et 3, respectivement.

Dans le cadre de ce projet, il vous est demandé d'effectuer un travail de recherche sur ce potentiel en utilisant l'équation de Schrödinger indépendante du temps à 1D pour décrire le comportement de deux atomes voisins. L'approche proposée est de découper le puits de Lennard-Jones en une succession de n puits rectangulaires de hauteurs et largeurs optimales, de résoudre l'équation de Schrödinger dans chacun des puits et d'imposer la continuité aux interfaces. On définira n comme l'ordre de l'approximation par puits rectangulaires.

Le projet doit conduire à la rédaction d'un rapport à remettre par groupe selon la structure présentée ci-après (il va de soi qu'une discussion des résultats est nécessaire pour chaque point).

1. Une introduction décrivant le contexte de cette étude et montrant l'intérêt du système quantique étudié.
2. Une description de la méthode utilisée pour approcher le problème d'un puits quelconque via une succession de n puits rectangulaires. Cette section doit contenir une explication de la méthode que vous avez utilisée pour déterminer la largeur et la hauteur de chacun des n puits. Il y a plusieurs possibilités. Justifiez votre choix.
3. La résolution analytique de l'équation de Schrödinger indépendante du temps (en utilisant le formalisme matriciel) pour le cas de l'approximation d'ordre 1 du potentiel de Lennard-Jones. Il s'agit donc d'un puits semi-infini. En déduire le nombre d'états quantiques permis ainsi que l'énergie de ces états par une méthode graphique. Vérifiez vos résultats par voie numérique.
4. Une analyse de l'effet des paramètres E_0 et σ du puits à l'aide d'une représentation graphique (notez que, dans cette analyse, il faut tenir compte de la façon dont le puits ajuste V_{LJ}). Utilisez des valeurs pour σ comprises entre 0.1 et 1 nm (par pas de 0.05 nm), et E_0 entre 1 et 10 eV (par pas de 0.5 eV). Discutez les effets des paramètres sur le nombre d'états liés et sur l'énergie associée à chacun de ces états.
5. Une étude de convergence de la résolution numérique de l'équation de Schrödinger 1D pour une approximation d'ordre n du potentiel de Lennard-Jones. Il s'agit donc de déterminer n_{opt} , l'ordre de l'approximation maximisant la précision du résultat et minimisant le temps de calcul. Déterminez la valeur de n minimisant la fonction

$$P(n) = 4\epsilon(n) + T(n) \quad (2)$$

où $\epsilon(n) = \frac{E_1(n) - E_1(100)}{E_1(100)}$ est l'erreur relative sur le premier niveau d'énergie permis et $T(n) = t(n)/t(100)$ est le temps de calcul par rapport au temps correspondant à 100 itérations. Mettez en évidence l'optimisation du système (variation de $P(n)$ avec n) pour le cas $E_0 = 7$ eV et $\sigma = 0.7$ nm. Montrez ensuite comment n_{opt} varie avec les paramètres du potentiel de Lennard-Jones (utilisez la même gamme de valeurs que pour le point 4).

6. Une étude de la forme des fonctions d'onde. Pour ce point, prenez $\sigma = 1$ nm et E_0 variant entre 5 et 10 eV. Utilisez l'approximation d'ordre n_{opt} . Déterminez la forme des fonctions d'ondes pour chaque état permis, ainsi que la position moyenne de la particule. Discutez la variation avec E_0 .
7. L'étude d'un système tri-atomique composé de deux gros atomes fixes et d'un plus petit qui oscille entre les deux atomes externes. Pour cette partie, on imagine un puits de potentiel décrit par la combinaison linéaire de deux potentiels de Lennard-Jones:

$$U(r) = V_{LJ}(r - r_0) + V_{LJ}(r_0 - r),$$

avec E_0 et σ de votre choix (à partir du moment où le puits admet au moins 2 niveaux d'énergie inférieurs à la hauteur de la barrière qui se forme au centre du puits). Déterminez n_{opt} et calculez l'énergie des 10 premiers états permis. Peut-on observer une différence de comportement entre les niveaux d'énergie supérieurs et inférieurs à la hauteur de la barrière centrale ?

Concernant la taille du rapport, le point 1 sera d'une longueur comprise entre 0.5 et 1 page. Le point 2 donnera également lieu à un texte compris entre 0.5 et 1 page. La combinaison des points 3 à 6 doit vous permettre de produire entre 5 à 8 pages (figures et tables comprises). Pour le point 7, vous pouvez prévoir entre 1 et 2 pages. 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 une mise en perspective des implications physiques de vos découvertes. 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, pas d'inquiétude. Par contre, un rapport de 30 pages hors annexe ne sera pas accepté.

Afin de représenter au mieux vos résultats, votre rapport devra se baser sur des figures claires et bien documentées. Un exemple de résultat est présenté à la Figure 2. Le panneau de gauche, compare les approximations d'ordres 1 et 10 du potentiel de Lennard-Jones. Dans le panneau de droite, la densité de probabilité de présence de la particule piégée dans le puits est représentée par-dessus les deux potentiels approchés. Pour plus de lisibilité, les densités de probabilité de chaque niveau d'énergie permis ont été décalés par un offset équivalent à leur énergie.

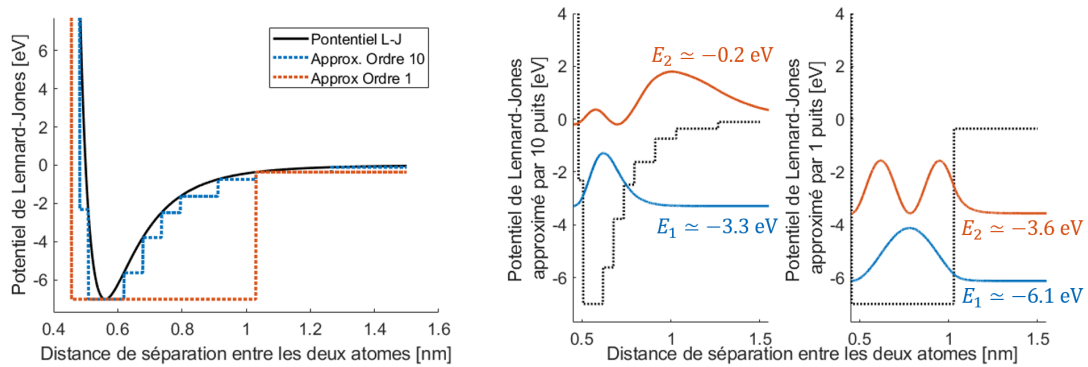


Figure 2: Exemples de représentations graphiques de la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire pour une particule confinée dans un puits. Le potentiel de Lennard-Jones (noir) est modélisé par une série de n marche(s) de potentiel (en rouge et en bleu): (gauche) comparaison de deux approximations, (droite) représentation du carré du module de la fonction d'onde correspondant à chacun des états permis pour une approximation donnée.

Le rapport doit comporter également, en annexe (pas de limite de pages), le(s) code(s) Python que vous aurez utilisé(s) pour obtenir vos résultats ainsi que les références bibliographiques que vous avez consultées pour réaliser ce travail. Cette annexe peut également contenir toute autre ressource que vous jugerez utile pour l'évaluation du projet.

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

1. En principe, seules les bibliothèques Numpy, Matplotlib et Scipy sont nécessaires pour réaliser le projet. La bibliothèque time est également nécessaire pour la question 5.
2. Il existe un type `complex` dans Numpy.
3. Scipy propose plusieurs méthodes pour résoudre une ODE. Dans le cadre de ce projet, cherchez la fonction la plus adaptée à un problème aux conditions limites.
4. La fonction `argrelextrema` de Numpy permet d'obtenir facilement les extremas locaux d'un ensemble de données.
5. Il est fortement recommandé (pour votre bien!) d'utiliser un environnement virtuel Python pour réaliser le projet¹. Cela vous évitera bien des ennuis par la suite, et vous permettra de facilement nous communiquer les librairies que vous avez utilisées ainsi que leur version en utilisant `pip3 freeze > requirements.txt`.
6. Et bien sûr... **Divisez bien votre code en fonctions et commentez-le autant que nécessaire !**

Bon travail à toutes et à tous !

¹Pour plus d'informations sur le environnements virtuels: <https://docs.python-guide.org/dev/virtualenvs/#lower-level-virtualenv> (Préférez `virtualenv`.)