

# Simulation Quantique 1D: Équation de Schrödinger

Iker Marginet Ballester

## Table des matières

<b>1 Introduction: Contexte Physique et Objectifs</b>	<b>2</b>
<b>2 L'Équation de Schrödinger: Fondements Physiques</b>	<b>2</b>
2.1 Dérivation de l'Équation . . . . .	2
<b>3 Les Potentiels Quantiques: Physique et Implémentation</b>	<b>3</b>
3.1 Oscillateur Harmonique . . . . .	3
3.2 Puits de Potentiel Fini . . . . .	4
3.3 Barrière de Potentiel . . . . .	5
3.4 Double Puits Quantique . . . . .	5
3.5 Potentiel Hydrogénien Radial . . . . .	5
<b>4 Méthodes Numériques: Résolution de l'Équation de Schrödinger</b>	<b>6</b>
4.1 Méthode des Différences finies . . . . .	6
4.1.1 Discrétisation de l'Équation . . . . .	6
4.1.2 Forme Matricielle . . . . .	6
4.1.3 Implémentation Numérique . . . . .	7
4.2 Méthode de Numerov pour l'équation de Schrödinger . . . . .	7
4.2.1 Reformulation de l'équation de Schrödinger . . . . .	7
4.2.2 Dérivation de la méthode de Numerov . . . . .	8
4.2.3 Application à l'équation de Schrödinger . . . . .	9
4.2.4 Construction des matrices <b>A</b> et <b>B</b> . . . . .	9
4.2.5 Conditions aux limites . . . . .	10
4.2.6 Remarques sur l'implémentation numérique . . . . .	10
4.3 Démonstration de la Formule de Simpson . . . . .	11
<b>5 Équation de Schrödinger 3D et Solutions Radiales pour l'Atome d'Hydrogène</b>	<b>13</b>
5.1 L'équation de Schrödinger 3D . . . . .	13
5.2 Unités atomiques et rayon de Bohr . . . . .	15
5.3 Solutions analytiques . . . . .	15
<b>6 Visualisation et Interprétation Graphique</b>	<b>16</b>
<b>7 Méthode de Numerov non matriciel pour l'équation de Schrödinger</b>	<b>19</b>
<b>8 Pourquoi les Modules Carrés?</b>	<b>21</b>
<b>9 Choix de Conception du Code</b>	<b>21</b>
<b>10 Analyse de Convergence et Erreurs</b>	<b>21</b>
<b>11 Conclusion</b>	<b>25</b>

# 1 Introduction: Contexte Physique et Objectifs

La mécanique quantique est un pilier fondamental de la physique moderne, décrivant le comportement des particules à des échelles microscopiques. L'équation de Schrödinger, au cœur de cette discipline, permet de déterminer les états quantiques d'un système, tels que les fonctions d'onde et les énergies associées. Ce projet vise à résoudre numériquement l'équation de Schrödinger indépendante du temps en une dimension (1D) pour divers potentiels quantiques, en utilisant des méthodes numériques comme les différences finies et la méthode de Numerov (et Numerov matricielle). L'objectif est de modéliser des systèmes physiques variés, de visualiser les résultats, et de comparer les solutions numériques aux prédictions théoriques lorsque celles-ci existent.

## 2 L'Équation de Schrödinger: Fondements Physiques

En mécanique quantique, l'équation de Schrödinger est l'outil central pour décrire le comportement des particules. Le code que nous étudions résout l'équation de Schrödinger indépendante du temps en 1D, qui s'écrit:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

Ici,  $\hat{H}$  est l'opérateur hamiltonien,  $\psi(x)$  est la fonction d'onde, et  $E$  est l'énergie propre. Le hamiltonien combine l'énergie cinétique et potentielle:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2)$$

où  $\hbar$  est la constante de Planck réduite,  $m$  la masse de la particule, et  $V(x)$  le potentiel. Cette équation est une équation aux valeurs propres: les solutions  $\psi(x)$  sont les états propres (fonctions d'onde), et les  $E$  associés sont les valeurs propres (énergies permises).

### 2.1 Dérivation de l'Équation

Pour comprendre l'origine de cette équation, commençons par l'équation de Schrödinger dépendante du temps:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x, t) \quad (3)$$

Cette équation décrit comment la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  évolue dans le temps. Pour les états stationnaires, où l'énergie est constante, on suppose une solution séparée:

$$\psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (4)$$

Substituons dans l'équation dépendante du temps. La dérivée temporelle donne:

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \psi(x) \cdot \left(-i\frac{E}{\hbar}\right) e^{-iEt/\hbar} \quad (5)$$

Ainsi, le côté gauche devient:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = i\hbar \cdot \left( -i \frac{E}{\hbar} \right) \psi(x) e^{-iEt/\hbar} = E\psi(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (6)$$

Le côté droit, en appliquant le hamiltonien, est:

$$\hat{H}\psi(x, t) = \hat{H}(\psi(x) e^{-iEt/\hbar}) = (\hat{H}\psi(x)) e^{-iEt/\hbar} \quad (7)$$

En égalant les deux côtés et en simplifiant par  $e^{-iEt/\hbar}$ , on obtient:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (8)$$

Physiquement,  $\psi(x)$  contient toutes les informations sur le système. La densité de probabilité  $|\psi(x)|^2$  indique la probabilité de trouver la particule à la position  $x$ , avec la condition de normalisation:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (9)$$

Le code utilise des unités naturelles ( $\hbar = m = 1$ ) pour simplifier les calculs. Voici comment ces constantes sont définies:

```
1 hbar = 1.0 # Constante de Planck réduite (unités naturelles)
2 m = 1.0      # Masse de la particule
3 omega = 1.0 # Fréquence angulaire pour l'oscillateur harmonique
```

---

Ces unités rendent les énergies et longueurs adimensionnelles, facilitant les comparaisons avec les solutions théoriques. Par exemple, le terme cinétique  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$  devient simplement  $-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2}$ .

### 3 Les Potentiels Quantiques: Physique et Implémentation

Le code modélise différents potentiels quantiques, chacun représentant un système physique distinct. Explorons chaque potentiel, sa formule, sa signification physique, et son implémentation dans le code.

#### 3.1 Oscillateur Harmonique

Le potentiel de l'oscillateur harmonique est:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (10)$$

Il est implémenté comme suit:

---

```

1 def potentiel_harmonique(x, omega=1.0):
2     return 0.5 * m * omega**2 * x**2

```

---

Ce potentiel quadratique modélise une particule soumise à une force de rappel proportionnelle à son déplacement ( $F = -dV/dx = -m\omega^2x$ ). C'est un système fondamental en physique, décrivant par exemple un atome vibrant dans une molécule ou un électron dans un piège harmonique. Les solutions analytiques sont bien connues:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (11)$$

Les fonctions d'onde sont des polynômes d'Hermite multipliés par une gaussienne:

$$\psi_n(x) \propto H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (12)$$

Ce potentiel est idéal pour tester le code, car ses solutions exactes permettent de vérifier la précision numérique. La fonction `etude_oscillateur_harmonique` compare les énergies calculées aux valeurs théoriques:

---

```

1 E_theo = [hbar * omega * (n + 0.5) for n in range(10)]
2 print("\nComparaison des énergies (numérique vs théorique):")
3 for n in range(10):
4     print(f"État {n}: {E[n]:.4f} (num) vs {E_theo[n]:.4f} (théo) | Erreur:
      ↴ {abs(E[n]-E_theo[n]):.2e}")

```

---

## 3.2 Puits de Potentiel Fini

Le puits fini est défini par:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| < \frac{L}{2} \\ V_0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (13)$$

Son implémentation est:

---

```

1 def potentiel_puits(x, V0=50, largeur=2):
2     return np.where(np.abs(x) > largeur/2, V0, 0)

```

---

Ce potentiel modélise une particule confinée dans une région de largeur  $L$ , entourée de barrières de hauteur  $V_0$ . C'est un modèle pour des systèmes comme les boîtes quantiques ou les nanostructures. Les états liés existent pour  $E < V_0$ , et les fonctions d'onde décroissent exponentiellement à l'extérieur du puits, illustrant le confinement quantique. À l'intérieur, elles sont sinusoïdales, reflétant des ondes stationnaires.

### 3.3 Barrière de Potentiel

La barrière est donnée par:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } |x| < \frac{L}{2} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (14)$$

Code correspondant:

---

```
1 def potentiel_barriere(x, V0=50, largeur=2):
2     return np.where(np.abs(x) < largeur/2, V0, 0)
```

---

Ce potentiel représente une particule rencontrant une barrière d'énergie  $V_0$ . Si  $E < V_0$ , la particule peut traverser par effet tunnel, un phénomène quantique clé. Ce système est essentiel pour des applications comme la microscopie à effet tunnel. Les états avec  $E > V_0$  sont des ondes planes, tandis que ceux avec  $E < V_0$  montrent une pénétration partielle.

### 3.4 Double Puits Quantique

Le double puits est défini par deux régions de potentiel nul séparées par une barrière:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dans deux puits de largeur } L_p \text{ séparés par } d \\ V_0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (15)$$

Implémentation:

---

```
1 def potentiel_double_puits(x, V0=50, largeur_puits=1, distance=3):
2     dans_puits = (np.abs(x - distance/2) < largeur_puits/2) | (np.abs(x +
         distance/2) < largeur_puits/2)
3     return np.where(dans_puits, 0, V0)
```

---

Ce système modélise deux puits séparés par une barrière, permettant l'étude de l'effet tunnel et du dédoublement des niveaux d'énergie. Les fonctions d'onde sont symétriques ou antisymétriques, et ce potentiel est pertinent pour des systèmes comme les qubits quantiques.

### 3.5 Potentiel Hydrogénoides Radial

Le potentiel est défini par:

$$V(r) = -\frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2}, \quad r > 0 \quad (16)$$

où  $r$  est la coordonnée radiale et  $l$  le nombre quantique azimutal. En unités atomiques ( $\hbar = m = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$ ), ce potentiel modélise la composante radiale de l'interaction coulombienne de l'atome d'hydrogène, avec le terme centrifuge  $\frac{l(l+1)}{2r^2}$  représentant l'effet du moment angulaire ( $l \geq 0$ ). Pour  $l = 0$ , il se réduit au potentiel coulombien pur

$V(r) = -\frac{1}{r}$ . Ce potentiel produit des états liés similaires aux orbitales hydrogénoides, avec des énergies  $E_n = -\frac{1}{2n^2}$  en unités atomiques.

Implémentation:

---

```

1 def potentiel_hydrogene_radial(r, l=0):
2     """Retourne le potentiel hydrogénoides radial V(r) = -1/r + l(l+1)/(2r^2)."""
3     return -1.0 / r + (l * (l + 1)) / (2 * r**2)

```

---

Cette fonction calcule le potentiel effectif pour l'équation de Schrödinger radiale, utilisée pour étudier les états liés de l'atome d'hydrogène dans un cadre 1D radial. La coordonnée radiale  $r$  est définie sur une grille commençant à une petite valeur positive (par exemple,  $r_{\min} = 10^{-6}$ ) pour éviter la singularité en  $r = 0$ .

## 4 Méthodes Numériques: Résolution de l'Équation de Schrödinger

### 4.1 Méthode des Différences finies

#### 4.1.1 Discréétisation de l'Équation

Partons de l'équation de Schrödinger stationnaire à 1D:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (17)$$

On discréétise l'espace sur un intervalle  $[-L/2, L/2]$  avec  $N$  points espacés de  $\Delta x = L/(N-1)$ . La dérivée seconde s'approxime par:

$$\left. \frac{d^2\psi}{dx^2} \right|_{x_i} \approx \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{(\Delta x)^2} \quad (18)$$

En substituant dans l'équation de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{(\Delta x)^2} \right) + V(x_i)\psi_i = E\psi_i \quad (19)$$

#### 4.1.2 Forme Matricielle

On multiplie par  $(\Delta x)^2$  pour simplifier l'écriture:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}) + (\Delta x)^2 V(x_i) \psi_i = (\Delta x)^2 E \psi_i \quad (20)$$

Puis on divise par  $(\Delta x)^2$  et réarrange:

$$\left( \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} \right) \psi_i - \left( \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \right) (\psi_{i+1} + \psi_{i-1}) + V(x_i) \psi_i = E \psi_i \quad (21)$$

Cela conduit à un problème aux valeurs propres sous forme matricielle:

$$\mathbf{H}\psi = E\psi \quad (22)$$

où la matrice Hamiltonienne  $\mathbf{H}$  est:

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} 2 + \frac{2m(\Delta x)^2}{\hbar^2} V(x_1) & -1 & 0 & \cdots \\ -1 & 2 + \frac{2m(\Delta x)^2}{\hbar^2} V(x_2) & -1 & \ddots \\ 0 & -1 & 2 + \frac{2m(\Delta x)^2}{\hbar^2} V(x_3) & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (23)$$

#### 4.1.3 Implémentation Numérique

---

```

1 def construire_hamiltonien(N, x, potentiel):
2     dx = x[1] - x[0]
3     terme_cinetique = hbar**2 / (2 * m * dx**2)
4     diagonale_principale = 2 * terme_cinetique + potentiel(x)
5     diagonale_secondeaire = -terme_cinetique * np.ones(N-1)
6     return diagonale_principale, diagonale_secondeaire

```

---

## 4.2 Méthode de Numerov pour l'équation de Schrödinger

Nous présentons ici une dérivation de la méthode de Numerov appliquée à l'équation de Schrödinger indépendante du temps en une dimension, ainsi que sa formulation matricielle pour une résolution numérique.

### 4.2.1 Reformulation de l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (24)$$

En réarrangeant, on obtient:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x) = -k^2(x)\psi(x) \quad (25)$$

où

$$k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \quad (26)$$

Cette équation peut être exprimée sous la forme générale:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = f(x)\psi(x) \quad (27)$$

avec  $f(x) = -k^2(x)$ . La méthode de Numerov fournit une approximation d'ordre élevé pour discréteriser cette équation différentielle.

### 4.2.2 Dérivation de la méthode de Numerov

Pour dériver la méthode, considérons une grille discrète avec des points  $x_i$ , où  $x_{i+1} = x_i + \Delta x$  et  $x_{i-1} = x_i - \Delta x$ . Développons la fonction d'onde  $\psi(x)$  en série de Taylor autour de  $x_i$ :

$$\psi_{i+1} = \psi_i + \Delta x \psi'_i + \frac{(\Delta x)^2}{2} \psi''_i + \frac{(\Delta x)^3}{6} \psi^{(3)}_i + \frac{(\Delta x)^4}{24} \psi^{(4)}_i + \frac{(\Delta x)^5}{120} \psi^{(5)}_i + \mathcal{O}(\Delta x^6) \quad (28)$$

$$\psi_{i-1} = \psi_i - \Delta x \psi'_i + \frac{(\Delta x)^2}{2} \psi''_i - \frac{(\Delta x)^3}{6} \psi^{(3)}_i + \frac{(\Delta x)^4}{24} \psi^{(4)}_i - \frac{(\Delta x)^5}{120} \psi^{(5)}_i + \mathcal{O}(\Delta x^6) \quad (29)$$

En additionnant ces équations, les termes en dérivées impaires s'annulent:

$$\psi_{i+1} + \psi_{i-1} = 2\psi_i + (\Delta x)^2 \psi''_i + \frac{(\Delta x)^4}{12} \psi^{(4)}_i + \mathcal{O}(\Delta x^6) \quad (30)$$

Pour éliminer le terme en  $\psi^{(4)}$ , utilisons l'équation différentielle  $\psi'' = f\psi$ . En différenciant deux fois, on obtient la dérivée quatrième:

$$\psi^{(4)} = \frac{d^2}{dx^2}(f\psi) = f''\psi + 2f'\psi' + f\psi'' = f''\psi + 2f'\psi' + f^2\psi \quad (31)$$

car  $\psi'' = f\psi$ . Dans la méthode de Numerov, on fait l'hypothèse que les termes en  $f'$  et  $\psi'$  sont petits, notamment si le potentiel  $V(x)$  varie lentement, ce qui est souvent le cas dans les applications physiques. Ainsi, on approxime  $\psi^{(4)}$  numériquement en utilisant la dérivée seconde aux points voisins:

$$\psi''_i = f_i \psi_i, \quad \psi''_{i+1} = f_{i+1} \psi_{i+1}, \quad \psi''_{i-1} = f_{i-1} \psi_{i-1} \quad (32)$$

La dérivée quatrième est alors estimée par:

$$\psi^{(4)}_i \approx \frac{\psi''_{i+1} - 2\psi''_i + \psi''_{i-1}}{(\Delta x)^2} = \frac{f_{i+1}\psi_{i+1} - 2f_i\psi_i + f_{i-1}\psi_{i-1}}{(\Delta x)^2} \quad (33)$$

Cependant, la méthode de Numerov utilise une approximation plus précise, dérivée en intégrant les termes de manière cohérente. L'équation clé est:

$$\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1} = (\Delta x)^2 \left( \frac{f_{i+1}\psi_{i+1} + 10f_i\psi_i + f_{i-1}\psi_{i-1}}{12} \right) + \mathcal{O}(\Delta x^6) \quad (34)$$

Cette approximation est exacte à l'ordre  $(\Delta x)^6$ , ce qui en fait une méthode particulièrement précise pour les équations différentielles du second ordre.

### 4.2.3 Application à l'équation de Schrödinger

Substituons  $f_i = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_i) = -k_i^2$  dans l'équation (34). On obtient:

$$\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1} = -\frac{(\Delta x)^2}{12} [k_{i+1}^2 \psi_{i+1} + 10k_i^2 \psi_i + k_{i-1}^2 \psi_{i-1}] \quad (35)$$

où

$$k_i^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_i) \quad (36)$$

Pour résoudre ce système, réarrangeons l'équation pour isoler les termes. Multiplions les deux côtés par 12 et regroupons:

$$12(\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}) = -(\Delta x)^2 [k_{i+1}^2 \psi_{i+1} + 10k_i^2 \psi_i + k_{i-1}^2 \psi_{i-1}] \quad (37)$$

Substituons  $k_i^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_i)$ , puis regroupons les termes en  $\psi_{i+1}$ ,  $\psi_i$ , et  $\psi_{i-1}$ . Après simplification, l'équation devient:

$$\begin{aligned} & \left[ 1 + \frac{(\Delta x)^2}{12} \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_{i+1}) \right] \psi_{i+1} - \left[ 2 + \frac{10(\Delta x)^2}{12} \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_i) \right] \psi_i \\ & + \left[ 1 + \frac{(\Delta x)^2}{12} \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_{i-1}) \right] \psi_{i-1} = 0 \end{aligned} \quad (38)$$

Cette équation peut être écrite sous forme matricielle comme un problème aux valeurs propres généralisé:

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\psi} = E\mathbf{B}\boldsymbol{\psi}, \quad (39)$$

où  $\boldsymbol{\psi} = [\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n]^T$ , et les matrices tridiagonales  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$  sont définies par leurs éléments.

### 4.2.4 Construction des matrices A et B

Pour obtenir les matrices, réécrivons l'équation (38) en séparant les termes dépendant de  $E$  et ceux dépendant de  $V_i$ . Regroupons:

$$\begin{aligned} & \left[ -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} + \frac{1}{12}V_{i+1} \right] \psi_{i+1} + \left[ \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} + \frac{10}{12}V_i \right] \psi_i + \left[ -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} + \frac{1}{12}V_{i-1} \right] \psi_{i-1} \\ & = E \left[ \frac{1}{12} \frac{2m}{\hbar^2} \psi_{i+1} + \frac{10}{12} \frac{2m}{\hbar^2} \psi_i + \frac{1}{12} \frac{2m}{\hbar^2} \psi_{i-1} \right] \end{aligned} \quad (40)$$

Ainsi, les éléments des matrices sont:

$$\mathbf{A}_{i,i} = \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} + \frac{10}{12}V_i, \quad \mathbf{A}_{i,i\pm 1} = -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} + \frac{1}{12}V_{i\pm 1} \quad (41)$$

$$\mathbf{B}_{i,i} = \frac{10}{12} \frac{2m}{\hbar^2}, \quad \mathbf{B}_{i,i\pm 1} = \frac{1}{12} \frac{2m}{\hbar^2} \quad (42)$$

Pour une grille de  $n$  points, les matrices tridiagonales sont:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} + \frac{10}{12}V_1 & -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} + \frac{1}{12}V_1 & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} + \frac{1}{12}V_2 & \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} + \frac{10}{12}V_2 & -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} + \frac{1}{12}V_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} + \frac{1}{12}V_3 & \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} + \frac{10}{12}V_3 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} + \frac{1}{12}V_n \\ 0 & \cdots & 0 & -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} + \frac{1}{12}V_n & \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} + \frac{10}{12}V_n \end{pmatrix} \quad (43)$$

$$\mathbf{B} = \frac{2m}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{10}{12} & \frac{1}{12} & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{1}{12} & \frac{10}{12} & \frac{1}{12} & \ddots & \vdots \\ 0 & \frac{1}{12} & \frac{10}{12} & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \frac{1}{12} \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{12} & \frac{10}{12} \end{pmatrix} \quad (44)$$

#### 4.2.5 Conditions aux limites

Pour résoudre le problème aux valeurs propres (39), des conditions aux limites sont nécessaires. Dans le cas d'un potentiel confinant (par exemple, un puits de potentiel), on impose souvent  $\psi(x) \rightarrow 0$  lorsque  $x \rightarrow \pm\infty$ . Sur la grille discrète, cela se traduit par  $\psi_1 = \psi_n = 0$ , ce qui modifie les première et dernière lignes de la matrice  $\mathbf{A}$ . Pour un problème à spectre continu, des conditions ouvertes peuvent être utilisées, mais elles nécessitent une analyse supplémentaire.

#### 4.2.6 Remarques sur l'implémentation numérique

La résolution du problème (39) consiste à trouver les valeurs propres  $E$  et les vecteurs propres  $\psi$ . Cela peut être effectué à l'aide de bibliothèques numériques comme NumPy ou SciPy en Python, qui fournissent des solveurs pour les problèmes aux valeurs propres généralisés. La précision de la méthode dépend de la taille de  $\Delta x$ , avec une erreur d'ordre  $(\Delta x)^6$  grâce à l'approximation de Numerov.

Dans le code, cela est implémenté comme suit:

---

```

1 def construire_hamiltonien_numerov(N, x, potentiel):
2     dx = x[1] - x[0]
3     V = potentiel(x)
4     terme_cinetique = hbar**2 / (2 * m * dx**2)
5     diag = (10/12) * V + 2 * terme_cinetique
6     subdiag = (1/12) * V[:-1] - terme_cinetique
7     diag[0] = 1e10 # Condition aux limites Psi = 0
8     subdiag[0] = 0.0
9     diag[-1] = 1e10
10    return diag, subdiag

```

---

### 4.3 Démonstration de la Formule de Simpson

La normalisation des fonctions d'onde impose:

$$\int |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (45)$$

Pour approcher cette intégrale numériquement, on utilise la méthode de Simpson. Elle consiste à approximer la fonction  $f(x)$  par un polynôme quadratique (parabole) passant par trois points  $(x_i, f(x_i))$ ,  $(x_{i+1}, f(x_{i+1}))$  et  $(x_{i+2}, f(x_{i+2}))$ .

On interpole  $f(x)$  localement par un polynôme de degré 2:

$$P(x) = a(x - x_i)^2 + b(x - x_i) + c \quad (46)$$

où les coefficients  $a$ ,  $b$ ,  $c$  sont déterminés pour satisfaire:

$$\begin{aligned} P(x_i) &= f(x_i) \\ P(x_{i+1}) &= f(x_{i+1}) \\ P(x_{i+2}) &= f(x_{i+2}) \end{aligned} \quad (47)$$

Posons  $\Delta x = x_{i+1} - x_i = x_{i+2} - x_{i+1}$  (maillage régulier).

Les trois conditions donnent:

$$\begin{aligned} P(x_i) &= c = f(x_i) \\ P(x_{i+1}) &= a(\Delta x)^2 + b(\Delta x) + c = f(x_{i+1}) \\ P(x_{i+2}) &= a(2\Delta x)^2 + b(2\Delta x) + c = f(x_{i+2}) \end{aligned} \quad (48)$$

Développons:

$$\begin{aligned} P(x_{i+1}) &= a\Delta x^2 + b\Delta x + f(x_i) \\ P(x_{i+2}) &= 4a\Delta x^2 + 2b\Delta x + f(x_i) \end{aligned} \quad (49)$$

On obtient ainsi un système de deux équations à deux inconnues  $a$  et  $b$ .

En résolvant ce système, on trouve:

$$a = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})}{2(\Delta x)^2} \quad (50)$$

$$b = \frac{-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})}{2\Delta x} \quad (51)$$

Ensuite, l'intégrale de  $f(x)$  sur  $[x_i, x_{i+2}]$  est approchée par l'intégrale de  $P(x)$ :

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x) dx \approx \int_{x_i}^{x_{i+2}} P(x) dx \quad (52)$$

Calculons cette intégrale:

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} P(x) dx = \int_0^{2\Delta x} (au^2 + bu + c) du \quad (53)$$

(en posant  $u = x - x_i$ ).

Intégration terme à terme:

$$= a \int_0^{2\Delta x} u^2 du + b \int_0^{2\Delta x} u du + c \int_0^{2\Delta x} du \quad (54)$$

$$= a \left[ \frac{u^3}{3} \right]_0^{2\Delta x} + b \left[ \frac{u^2}{2} \right]_0^{2\Delta x} + c [u]_0^{2\Delta x} \quad (55)$$

$$= a \frac{(2\Delta x)^3}{3} + b \frac{(2\Delta x)^2}{2} + c(2\Delta x) \quad (56)$$

$$= \frac{8a(\Delta x)^3}{3} + 2b(\Delta x)^2 + 2c\Delta x \quad (57)$$

En remplaçant  $a, b, c$  trouvés plus haut, après simplifications, on obtient:

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x) dx \approx \frac{\Delta x}{3} (f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})) \quad (58)$$

ce qui est la **formule de Simpson** utilisée dans l'intégration numérique.

Implémentation:

---

```

1 def simpson_integration(y, x):
2     N = len(x)
3     dx = x[1] - x[0]
4     if N % 2 == 0:
5         result = 0.0
6         for i in range(0, N-2, 2):
7             result += y[i] + 4*y[i+1] + y[i+2]
8             result *= dx / 3.0
9             result += (dx / 2.0) * (y[N-2] + y[N-1])
10    else:
11        result = y[0] + y[-1] + 4 * sum(y[1:-1:2]) + 2 * sum(y[2:-2:2])
12        result *= dx / 3.0
13    return result

```

---

La normalisation est effectuée ainsi:

---

```

1 def normaliser_fonction onde(psi, x):
2     for i in range(psi.shape[1]):
3         densite = np.abs(psi[:, i])**2
4         norme = np.sqrt(simpson_integration(densite, x))

```

---

```

5     psi[:, i] /= norme
6     return psi

```

---

## 5 Équation de Schrödinger 3D et Solutions Radiales pour l'Atome d'Hydrogène

L'atome d'hydrogène est un système fondamental en mécanique quantique, dont les solutions analytiques servent de référence pour comprendre les orbitales atomiques. Cette section décrit la résolution de l'équation de Schrödinger en 3D pour l'atome d'hydrogène, en se concentrant sur la partie radiale, et introduit le rayon de Bohr comme échelle de longueur naturelle.

### 5.1 L'équation de Schrödinger 3D

En trois dimensions, l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (59)$$

où  $\nabla^2$  est l'opérateur laplacien en coordonnées cartésiennes,  $\psi(\mathbf{r})$  est la fonction d'onde, et  $V(\mathbf{r})$  est le potentiel. Pour l'atome d'hydrogène, le potentiel coulombien dû au noyau (charge  $+e$ ) sur l'électron (charge  $-e$ ) est:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (60)$$

où  $r = |\mathbf{r}|$  est la distance radiale,  $e$  est la charge élémentaire, et  $\epsilon_0$  est la permittivité du vide.

En coordonnées sphériques  $(r, \theta, \phi)$ , en raison de la symétrie sphérique du potentiel, la fonction d'onde peut être séparée comme:

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi) \quad (61)$$

où  $Y_l^m(\theta, \phi)$  sont les harmoniques sphériques, et  $R(r)$  est la fonction radiale. Les indices  $l$  et  $m$  sont les nombres quantiques azimutal et magnétique, respectivement.

Le laplacien en coordonnées sphériques s'écrit:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \quad (62)$$

où  $\hat{L}^2$  est l'opérateur du moment angulaire, avec les valeurs propres:

$$\hat{L}^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m \quad (63)$$

Substituons  $\psi = R(r)Y_l^m$  dans l'équation (59). En divisant par  $Y_l^m$ , on obtient l'équation radiale:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} R = ER \quad (64)$$

Pour simplifier, effectuons la substitution  $u(r) = rR(r)$ , donc  $R(r) = u(r)/r$ . Calculons les dérivées:

$$\frac{dR}{dr} = \frac{d}{dr} \left( \frac{u}{r} \right) = \frac{u'}{r} - \frac{u}{r^2} \quad (65)$$

$$r^2 \frac{dR}{dr} = ru' - u \quad (66)$$

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) = \frac{d}{dr} (ru' - u) = ru'' + u' - u' \quad (67)$$

Ainsi:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) = \frac{ru'' + u' - u'}{r^2} = \frac{u''}{r} \quad (68)$$

Substituons dans l'équation radiale:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{u''}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \frac{u}{r} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \frac{u}{r} = E \frac{u}{r} \quad (69)$$

Multiplions par  $r$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ u'' - \frac{l(l+1)}{r^2} u \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} u = E u \quad (70)$$

Réarrangeons:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' + \left[ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] u = E u \quad (71)$$

Cette équation est l'équation de Schrödinger radiale, avec un potentiel effectif:

$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (72)$$

Le terme  $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$  est la barrière centrifuge, présente pour  $l \geq 1$ .

## 5.2 Unités atomiques et rayon de Bohr

Pour simplifier, utilisons les unités atomiques:  $\hbar = m = e = 1$ ,  $4\pi\epsilon_0 = 1$ . Le potentiel devient  $V(r) = -1/r$ , et l'équation radiale pour  $l = 0$  est:

$$-\frac{1}{2}u'' - \frac{1}{r}u = Eu \quad (73)$$

Introduisons le rayon de Bohr, qui définit l'échelle de longueur dans l'atome d'hydrogène:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \quad (74)$$

En unités atomiques ( $\hbar = m = e = 1$ ,  $4\pi\epsilon_0 = 1$ ),  $a_0 = 1$ . En unités SI,  $a_0 \approx 5.29 \times 10^{-11}$  m, correspondant à la distance moyenne de l'électron dans l'état fondamental.

## 5.3 Solutions analytiques

Pour résoudre l'équation (71), posons  $E = -\kappa^2/2$ , où  $\kappa > 0$  pour les états liés ( $E < 0$ ). En unités atomiques, et pour  $l = 0$ , l'équation devient:

$$u'' + \left(\frac{2}{r} - \kappa^2\right)u = 0 \quad (75)$$

Effectuons le changement de variable  $\rho = \kappa r$ , donc  $r = \rho/\kappa$ ,  $u'' = \kappa^2 \frac{d^2 u}{d\rho^2}$ . L'équation devient:

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right)u = 0 \quad (76)$$

Pour résoudre, supposons une solution de la forme:

$$u(\rho) = \rho^s e^{-\rho} L(\rho) \quad (77)$$

où  $L(\rho)$  est une fonction à déterminer, et  $s$  est choisi pour gérer le comportement à l'origine. Substituons et résolvons (voir détails dans [5]). Après analyse, les solutions physiques imposent:

$$\kappa = \frac{1}{na_0}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (78)$$

où  $n$  est le nombre quantique principal. Les énergies sont:

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \quad (79)$$

en unités atomiques (en eV,  $E_n \approx -13.6/n^2$ )

Les fonctions radiales  $R_{n,l}(r)$  sont données par:

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-r/(na_0)} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right) \quad (80)$$

où  $L_k^m$  sont les polynômes de Laguerre associés. Pour  $l = 0$ , les premières fonctions sont:

$$R_{1,0}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} \quad (81)$$

$$R_{2,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}a_0^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/(2a_0)} \quad (82)$$

La fonction  $u_{n,l}(r) = rR_{n,l}(r)$  satisfait l'équation (71) et est normalisée selon:

$$\int_0^\infty |u_{n,l}(r)|^2 dr = 1 \quad (83)$$

Dans le code, la fonction `etude_hydrogène_radial` résout numériquement cette équation pour  $l = 0$  sur  $[10^{-6}, 50]$  avec  $N = 5000$ , utilisant les différences finies et Numerov. Les énergies calculées (par exemple,  $E_1 \approx -0.5$ ,  $E_2 \approx -0.125$ ) correspondent aux valeurs théoriques (79), et les fonctions  $u(r)$  et  $R(r)$  sont visualisées, confirmant leur forme exponentielle et polynomiale.

## 6 Visualisation et Interprétation Graphique

La fonction `visualiser_système` génère des figures combinées qui illustrent à la fois le comportement global du système et les détails des fonctions d'onde. Chaque figure contient deux sous-graphiques:

- Au-dessus: le potentiel  $V(x)$ , les niveaux d'énergie  $E_n$ , et les densités de probabilité  $|\psi_n(x)|^2$  décalées verticalement à leurs énergies respectives.
- Au-dessous: les parties réelle  $\text{Re}[\psi_n(x)]$  et imaginaire  $\text{Im}[\psi_n(x)]$  des fonctions d'onde pour les quatre premiers états ( $n = 0$  à  $n = 3$ ).

Ces visualisations permettent une analyse complète des systèmes quantiques étudiés, en mettant en évidence des phénomènes comme le confinement, l'effet tunnel, ou la symétrie des fonctions d'onde. Voici une analyse détaillée pour chaque potentiel:

- **Oscillateur harmonique:** La Figure 1 présente le système complet. Au-dessus, le potentiel quadratique  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$  ( $\omega = 1$ ) est tracé en noir, avec les niveaux d'énergie  $E_n$  (par exemple,  $E_0 \approx 0.50$ ,  $E_1 \approx 1.50$ ) correspondant aux valeurs théoriques  $E_n = (n + \frac{1}{2})$ . Les densités  $|\psi_n(x)|^2$  montrent des distributions gaussiennes multipliées par des polynômes d'Hermite, s'élargissant avec  $n$ . Au-dessous, les fonctions d'onde  $\psi_n(x)$  (réelles, partie imaginaire nulle) confirment la forme attendue:  $\psi_0(x)$  est une gaussienne sans nœud,  $\psi_1(x)$  a un nœud en  $x = 0$ , et le nombre de nœuds augmente avec  $n$ , en accord avec les polynômes d'Hermite.

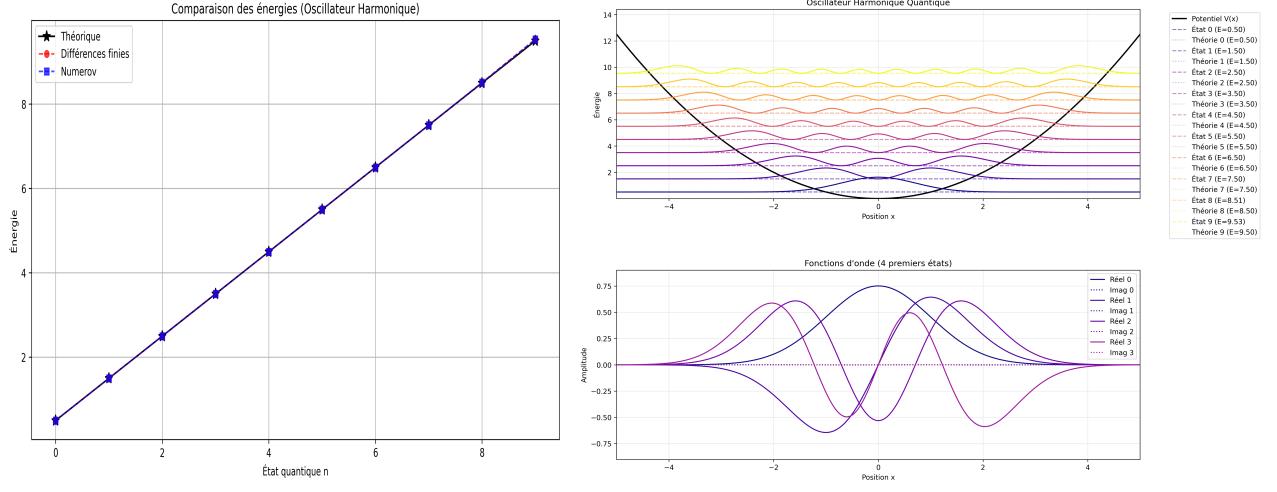


Figure 1: Visualisation de l'oscillateur harmonique ( $\omega = 1$ ). À gauche: comparaison des énergies. Au-dessus: potentiel, niveaux d'énergie et densités  $|\psi_n(x)|^2$ . Au-dessous: parties réelle et imaginaire des fonctions d'onde  $\psi_n(x)$  pour  $n = 0$  à  $n = 3$ .

- **Puits fini:** La Figure 2 montre le puits de potentiel fini ( $V_0 = 50$ ,  $L = 3$ ). Au-dessus, le potentiel est nul pour  $|x| < 1.5$  et  $V_0$  sinon, avec des niveaux d'énergie  $E_n < V_0$  (par exemple,  $E_0 \approx 4.20$ ,  $E_1 \approx 16.77$ ). Les  $|\psi_n(x)|^2$  sont sinusoïdales à l'intérieur et exponentielles à l'extérieur, illustrant le confinement quantique. Au-dessous, les  $\psi_n(x)$  (réels) confirment cette structure:  $\psi_0(x)$  est symétrique,  $\psi_1(x)$  antisymétrique avec un noeud en  $x = 0$ , et les oscillations augmentent avec  $n$ .

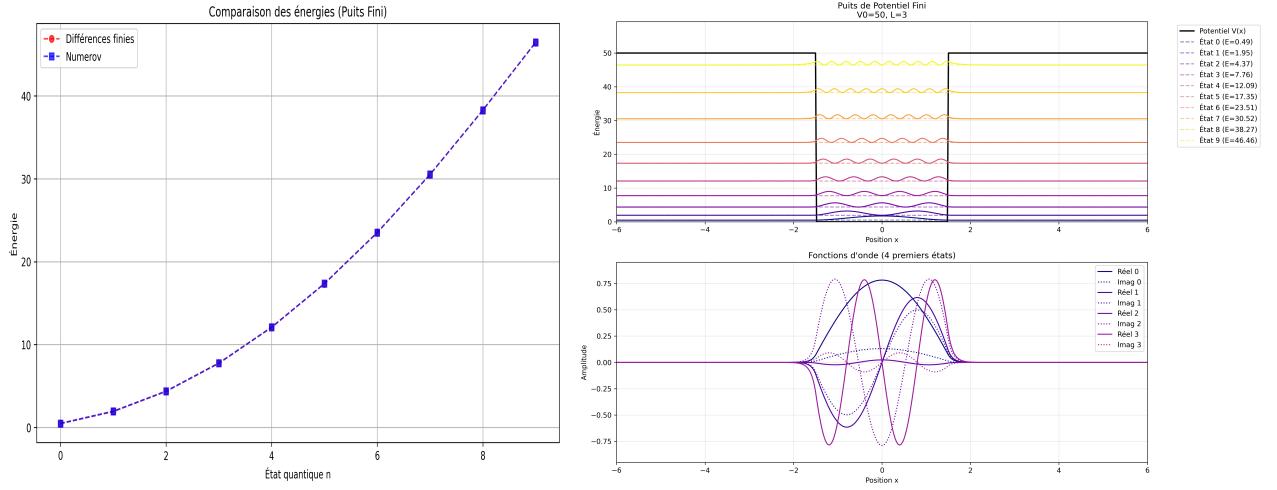


Figure 2: Visualisation du puits de potentiel fini ( $V_0 = 50$ ,  $L = 3$ ). À gauche: comparaison des énergies. Au-dessus: potentiel, niveaux d'énergie et densités  $|\psi_n(x)|^2$ . Au-dessous: parties réelle et imaginaire des fonctions d'onde  $\psi_n(x)$  pour  $n = 0$  à  $n = 3$ .

- **Barrière de potentiel:** La Figure 3 illustre la barrière ( $V_0 = 50$ ,  $L = 2$ ). Au-dessus: le potentiel est  $V_0$  pour  $|x| < 1$  et 0 sinon. Les niveaux d'énergie (par exemple,  $E_0 \approx 0.11$ ) montrent des  $|\psi_n(x)|^2$  pénétrant légèrement dans la barrière, signe de l'effet tunnel, et oscillant à l'extérieur comme des ondes planes. Au-dessous, les  $\psi_n(x)$  (réels) confirment cette pénétration partielle, avec une atténuation dans la région  $|x| < 1$ , et des oscillations sinusoïdales à l'extérieur.

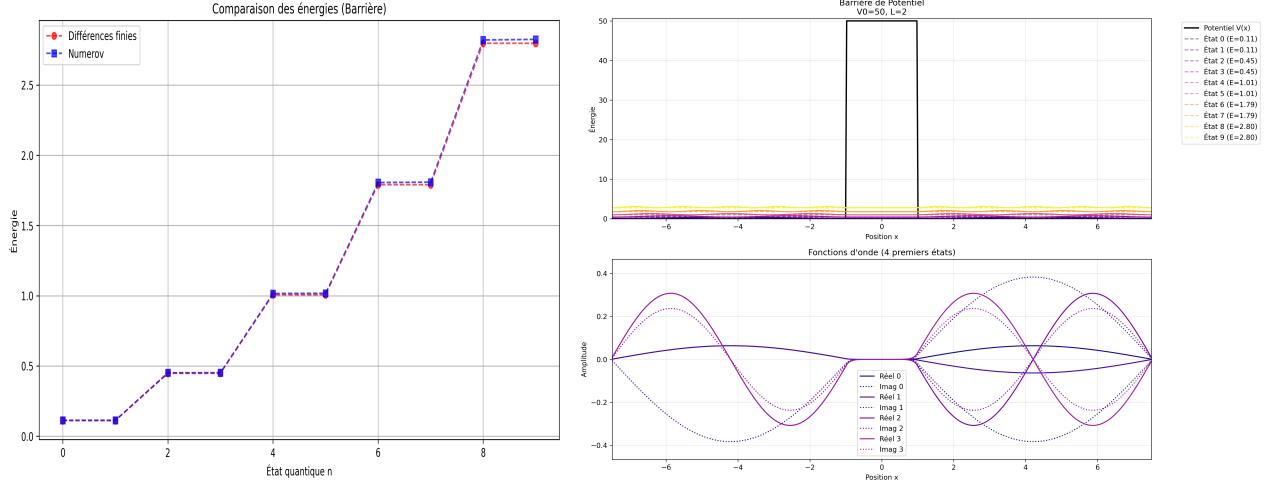


Figure 3: Visualisation de la barrière de potentiel ( $V_0 = 50$ ,  $L = 2$ ). À gauche: comparaison des énergies. Au-dessus: potentiel, niveaux d'énergie et densités  $|\psi_n(x)|^2$ . Au-dessous: parties réelle et imaginaire des fonctions d'onde  $\psi_n(x)$  pour  $n = 0$  à  $n = 3$ .

- **Double puits:** La Figure 4 montre le double puits ( $V_0 = 50$ ,  $L_p = 1$ ,  $d = 4$ ). Au-dessus, les puits sont centrés à  $x \approx \pm 2$ , et les énergies (par exemple,  $E_0 \approx 3.45$ ,  $E_1 \approx 13.59$ ) montrent un dédoublement dû à l'effet tunnel. Les  $|\psi_n(x)|^2$  pour  $n = 0$  et  $n = 1$  sont symétriques et antisymétriques, localisées dans les deux puits. Au-dessous, les  $\psi_n(x)$  (réels) confirment cette symétrie, avec des oscillations dans chaque puits et des nœuds reflétant le couplage.

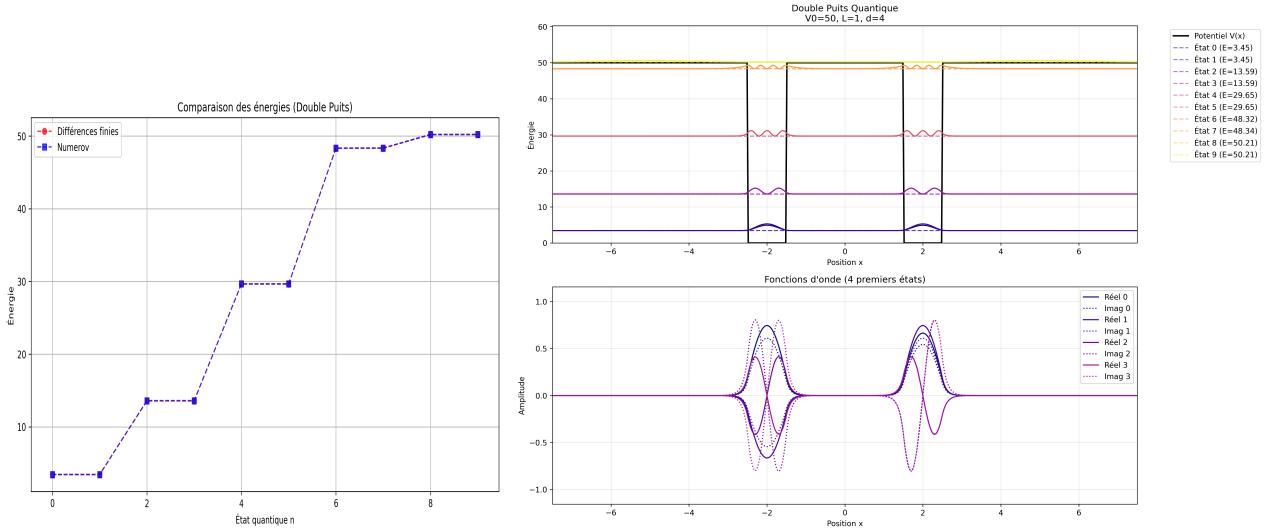


Figure 4: Visualisation du double puits quantique ( $V_0 = 50$ ,  $L_p = 1$ ,  $d = 4$ ). À gauche: comparaison des énergies. Au-dessus: potentiel, niveaux d'énergie et densités  $|\psi_n(x)|^2$ . Au-dessous: parties réelle et imaginaire des fonctions d'onde  $\psi_n(x)$  pour  $n = 0$  à  $n = 3$ .

- **Hydrogène radial:** La Figure 5 illustre le potentiel de l'atome d'hydrogène et les niveaux d'énergie  $E_n = -1/(2n^2)$  (par exemple,  $E_1 \approx -0.50$ ,  $E_2 \approx -0.125$ ) sont tracés avec les densités radiales  $|\psi_n(r)|^2$ , montrant une forte localisation près de l'origine pour  $n$  faible, due à l'attraction du noyau. À droite, les fonctions d'onde radiales  $\psi_n(r)$  (réelles) révèlent des formes sphériques pour  $l = 0$ , avec  $n-1$  noeuds radiaux,

en accord avec les fonctions de Laguerre. Les  $|\psi_l(r)|^2$  décroissent exponentiellement à grande distance, illustrant le confinement quantique.

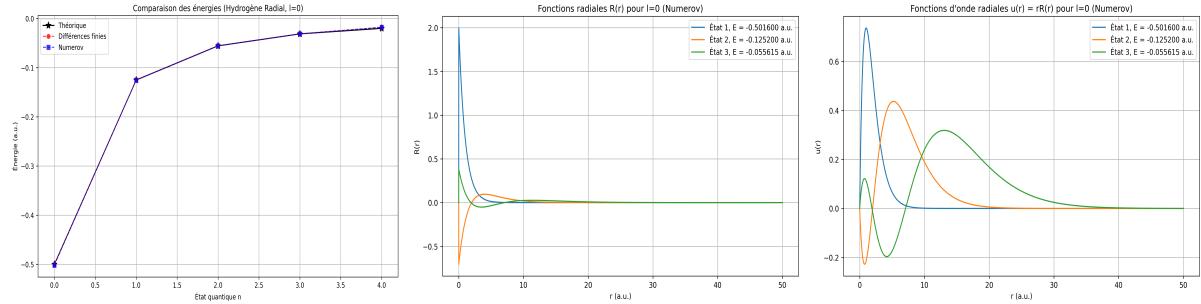


Figure 5: Potentiel de l'atome d'hydrogène, niveaux ( $E_n = -\frac{1}{2n^2}$ ), densité ( $|R_r|^2$ ) localisée près de l'origine pour ( $n$ ) faible, fonctions radiales ( $U_r$ ) (( $l = 0$ ), ( $n - 1$ ) nœuds) décroissant exponentiellement, illustrant confinement et formes sphériques.

Ces figures combinées permettent une analyse intégrée des systèmes quantiques, mettant en évidence des comportements comme le confinement dans le puits fini, l'effet tunnel dans la barrière, le dédoublement des niveaux dans le double puits, et la localisation près de l'origine pour le potentiel hydrogénien. Les animations associées, bien que non incluses ici, montreraient l'évolution temporelle stationnaire des  $|\psi_n(x, t)|^2$ , renforçant l'interprétation des états propres.

## 7 Méthode de Numerov non matriciel pour l'équation de Schrödinger

Nous utilisons ici la méthode de Numerov pour résoudre numériquement l'équation de Schrödinger indépendante du temps. Cette méthode est particulièrement efficace pour des équations différentielles linéaires du second ordre, comme c'est le cas ici.

---

```

1 # Algorithme de Numerov pour résoudre l'équation de Schrödinger
2 def numerov(E, x, dx):
3     psi = np.zeros(N) # Tableau pour la fonction d'onde
4     psi[0] = 0.0        # Condition aux limites : (-L) = 0
5     psi[1] = 1e-6      # Petite valeur initiale pour au deuxième point
6
7     k2 = 2 * m * (E - potentiel(x)) / hbar**2
8
9     for i in range(1, N-1):
10        psi[i+1] = (2 * psi[i] * (1 - (5/12) * dx**2 * k2[i]) -
11                    psi[i-1] * (1 + (1/12) * dx**2 * k2[i-1])) / \
12                    (1 + (1/12) * dx**2 * k2[i+1])
13
14    return psi
15
16 # Recherche des valeurs propres d'énergie par dichotomie
17 def trouver_valeur_propre(E_min, E_max, tol=1e-15, max_iter=1000):
18     for i in range(max_iter):
19         E_mid = (E_min + E_max) / 2

```

```

20     psi_mid = numerov(E_mid, x, dx)
21     valeur_bord = psi_mid[-1]
22
23     psi_min = numerov(E_min, x, dx)
24
25     if abs(valeur_bord) < tol:
26         return E_mid, psi_mid
27     elif valeur_bord * psi_min[-1] < 0:
28         E_max = E_mid
29     else:
30         E_min = E_mid
31
32     if E_max - E_min < tol:
33         return E_mid, psi_mid
34
35 raise ValueError(f"Convergence non atteinte pour E_min={E_min},
↪ E_max={E_max}")

```

---

Cette méthode repose sur une approche intégrative progressive de la fonction d'onde  $\psi(x)$ , en partant de conditions initiales imposées à une extrémité de l'intervalle spatial. Elle est combinée ici avec une recherche de valeur propre par dichotomie, pour déterminer l'énergie  $E$  pour laquelle  $\psi$  satisfait également les conditions aux limites à l'autre extrémité.

## Comparaison avec les solutions analytiques

Dans le cas de l'oscillateur harmonique quantique, les valeurs propres d'énergie sont bien connues.

Le graphe obtenu numériquement pour les premières fonctions d'onde montre une excellente correspondance avec les solutions analytiques (voir Figure 6). Les énergies calculées coïncident avec les valeurs exactes à un niveau de précision élevé. Cela confirme que la méthode de Numerov converge vers la bonne solution dans ce cas.

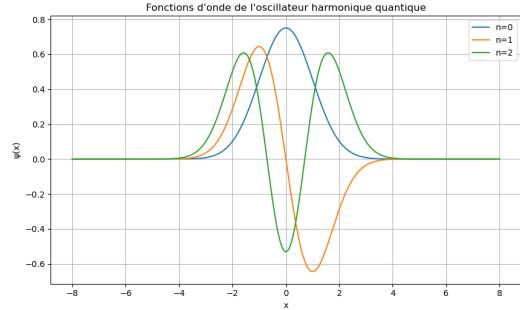


Figure 6: Fonctions d'onde  $\psi_n(x)$  obtenues par la méthode de Numerov pour un oscillateur harmonique quantique. On reconnaît les états quantiques avec leur nombre de noeuds correspondant à  $n$ .

## Importance de la tolérance numérique

Pour garantir cette convergence, il est impératif d'utiliser une tolérance très fine, de l'ordre de  $10^{-15}$ , dans l'algorithme de dichotomie. Si la tolérance est plus relâchée, par exemple  $10^{-6}$ , les résultats peuvent varier de manière significative, en particulier si l'intervalle spatial  $[-L, L]$  est modifié. Cela s'explique par la forte sensibilité de la fonction d'onde à l'énergie, surtout en bordure de domaine.

## Avantages de Numerov pour d'autres potentiels

Contrairement à la méthode des différences finies, la méthode de Numerov est bien plus précise pour des potentiels non analytiques (potentiel carré, barrières, etc.). Elle permet aussi d'observer plus facilement des phénomènes comme la **dégénérescence** d'états quantiques. Le graphe résultant montre des fonctions d'onde plus lisses, moins affectées par les erreurs numériques.

## 8 Pourquoi les Modules Carrés?

La densité de probabilité  $|\psi(x)|^2$  est privilégiée dans les visualisations car elle correspond à une observable physique directe: la probabilité de trouver une particule en un point donné. Contrairement aux parties réelle et imaginaire de  $\psi(x)$ , qui oscillent dans le temps,  $|\psi(x)|^2$  reste stationnaire pour les états propres, ce qui simplifie son interprétation. Dans les animations, une mise à l'échelle dynamique de  $|\psi_n(x)|^2$  est appliquée pour mieux visualiser les états excités, dont l'amplitude décroît naturellement avec  $n$ .

## 9 Choix de Conception du Code

Les décisions de conception du code visent à équilibrer précision numérique, simplicité d'utilisation et valeur pédagogique:

- **Unités naturelles:** L'utilisation de  $\hbar = m = 1$  élimine les constantes superflues et simplifie les équations.
- **Discrétisation spatiale:** Une grille de  $N = 500$  points sur l'intervalle  $[-L/2, L/2]$  offre un bon compromis entre précision et temps de calcul.
- **Modularité:** Chaque potentiel est traité par une fonction dédiée, et un menu interactif permet à l'utilisateur de naviguer facilement entre les cas.
- **Gestion des erreurs:** La normalisation des fonctions d'onde est assurée par la méthode de Simpson, bien que le code ne gère pas encore les entrées invalides de l'utilisateur.

## 10 Analyse de Convergence et Erreurs

La fonction `analyse_erreur_tous_potentiels` évalue la précision des énergies calculées  $E_n$  en les comparant à des valeurs de référence, soit théoriques (lorsqu'elles existent), soit numériques avec une grille fine ( $N = 1500$ ). Les principales sources d'erreur identifiées sont:

- **Discrétisation spatiale:** Un pas  $\Delta x$  trop grand introduit des erreurs dans l'approximation des dérivées et des intégrales, affectant particulièrement les états de haut  $n$ .
- **Méthode des différences finies:** L'approximation de la dérivée seconde  $\frac{d^2}{dx^2}$  est d'ordre  $O(\Delta x^2)$ , ce qui devient moins précis pour les fonctions d'onde à fortes variations.

- **Intégration numérique:** La méthode de Simpson, d'ordre  $O(\Delta x^4)$ , est utilisée pour la normalisation, mais elle peut sous-estimer les contributions des pics étroits, comme dans le cas hydrogénoides.

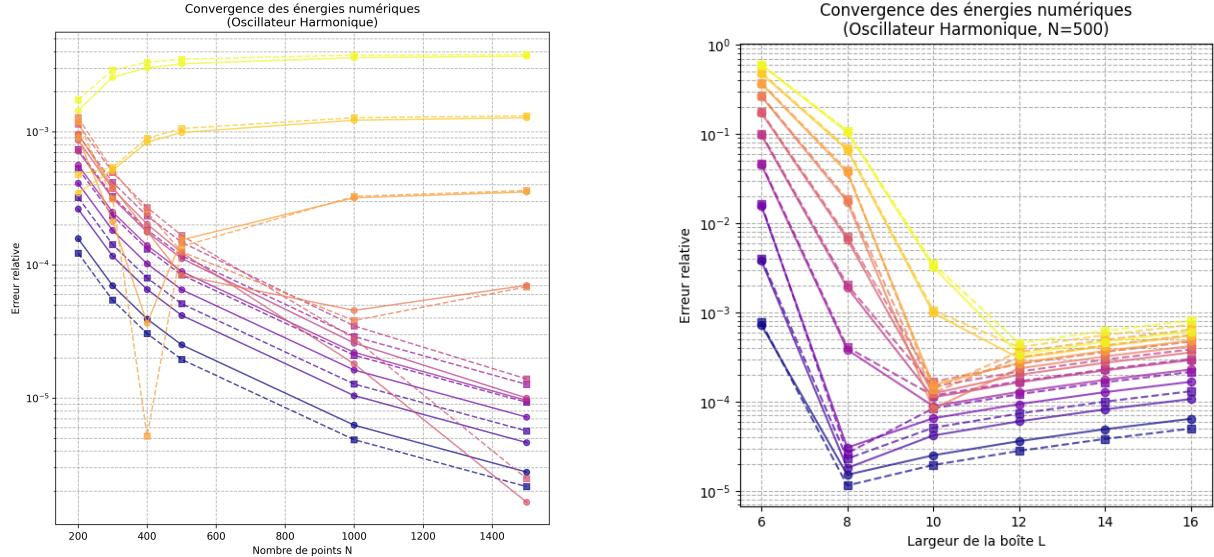


Figure 7: Convergence des énergies numériques pour l'oscillateur harmonique en fonction du nombre de points  $N$  à gauche et en fonction de  $L$  à droite.

La Figure 7 montre l'erreur relative  $|E_n - E_{\text{théo}}|$  pour l'oscillateur harmonique, en fonction du nombre de points  $N$ . L'erreur pour chaque état ( $n = 0$  à  $n = 9$ ) décroît comme  $O(\Delta x^2)$ , atteignant  $10^{-5}$  pour  $N \approx 1400$ . Les états excités ( $n \geq 5$ ) ont des erreurs plus élevées en raison de leurs oscillations rapides, qui nécessitent une grille plus fine.

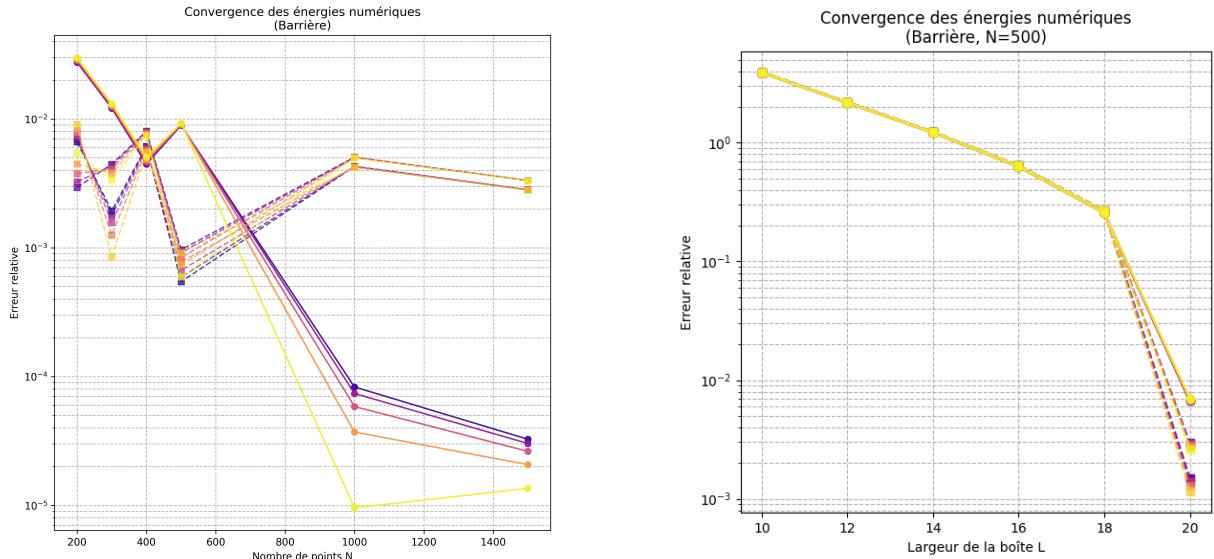


Figure 8: Convergence des énergies numériques pour la barrière de potentiel en fonction du nombre de points  $N$  à gauche et en fonction de  $L$  à droite.

La Figure 8 présente la convergence pour la barrière de potentiel. Les erreurs diminuent plus lentement, car les fonctions d'onde ont des variations abruptes près de la barrière.

( $|x| = 1$ ), rendant l'approximation par différences finies moins précise. À  $N = 1000$ , l'erreur est de l'ordre de  $10^{-4}$  pour  $n = 0$ .

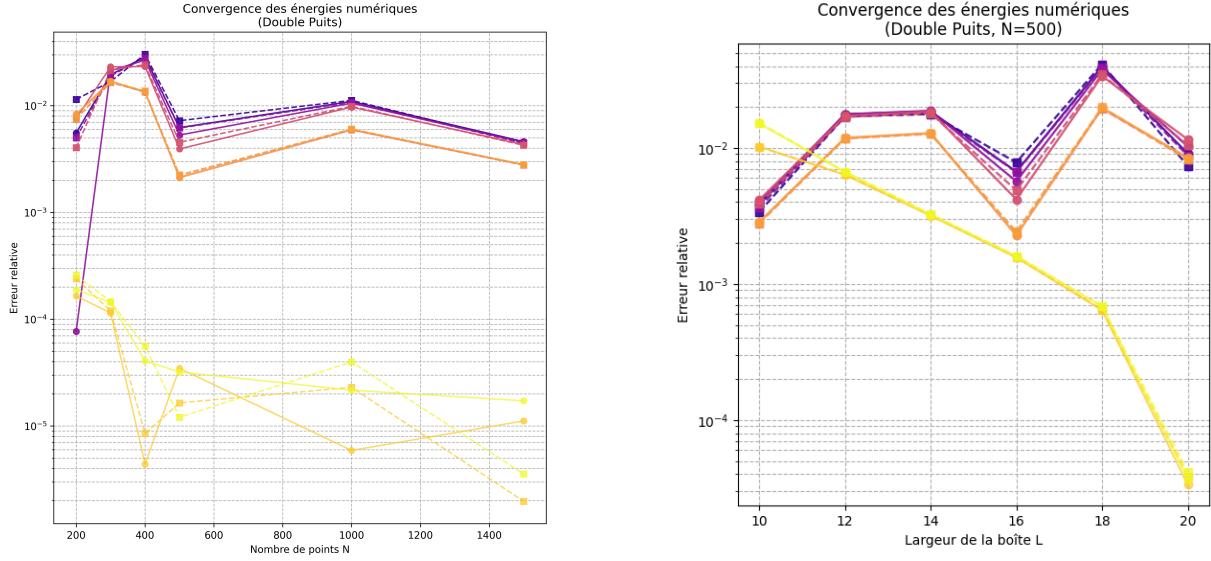


Figure 9: Convergence des énergies numériques pour le double puits quantique en fonction du nombre de points  $N$  à gauche et en fonction de  $L$  à droite.

La Figure 9 montre la convergence pour le double puits. Les erreurs sont similaires à celles de la barrière, mais le dédoublement des niveaux ( $E_0 \approx E_1$ ) est bien capturé, même à faible  $N$ . À  $N = 1400$ , l'erreur est également de l'ordre de  $10^{-4}$ .

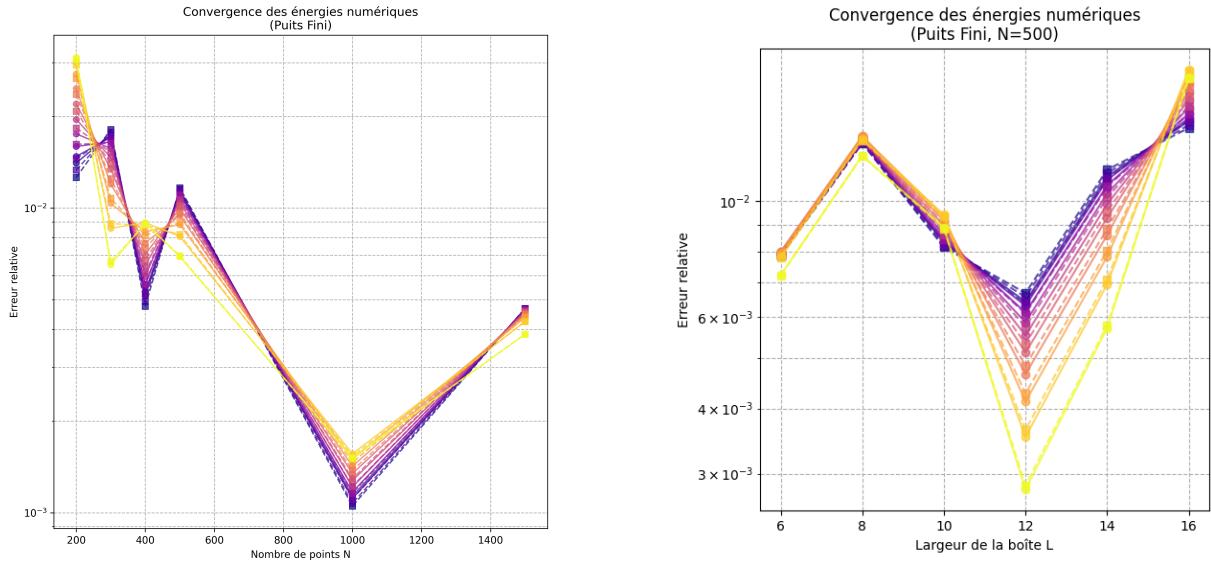


Figure 10: Convergence des énergies numériques pour le puits de potentiel fini en fonction du nombre de points  $N$  à gauche et en fonction de  $L$  à droite.

La Figure 10 illustre la convergence pour le puits de potentiel fini. L'erreur relative pour les états  $n = 0$  à  $n = 9$  décroît de manière similaire à celle de l'oscillateur harmonique, atteignant  $10^{-3}$  pour  $N \approx 1000$ . Les états excités présentent des erreurs légèrement plus élevées, car les fonctions d'onde oscillent davantage à l'intérieur du puits, nécessitant une résolution spatiale plus fine.

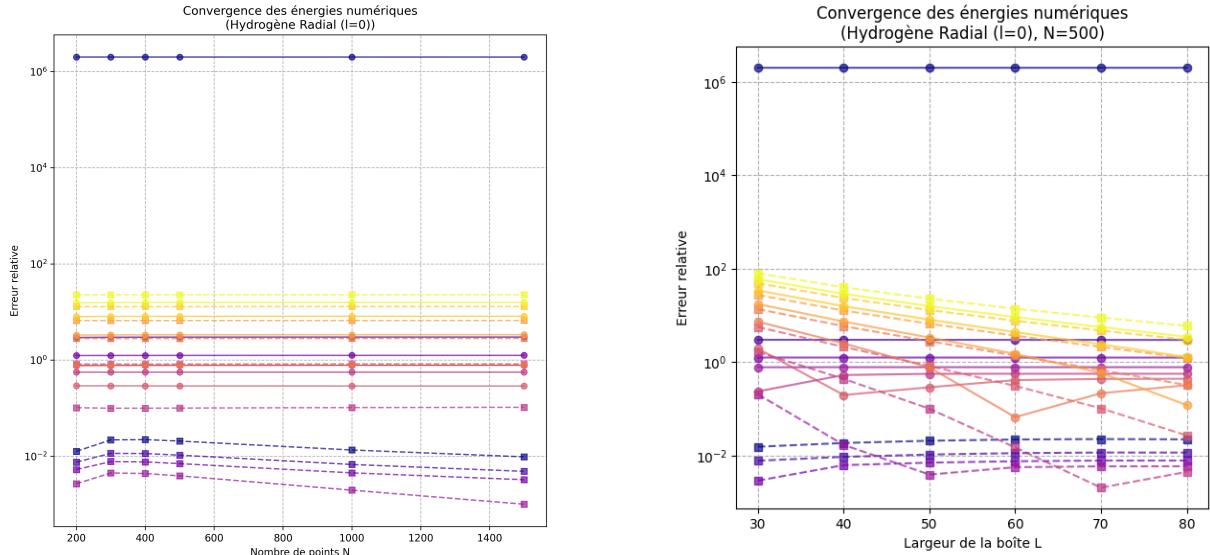


Figure 11: Convergence des énergies numériques pour le potentiel hydrogénoidé 1D en fonction du nombre de points  $N$  à gauche et en fonction de  $L$  à droite.

La Figure 11 montre la convergence pour le potentiel hydrogénoidé 1D. Les erreurs sont plus importantes pour les états de bas  $n$  (par exemple,  $n = 0, n = 1$ ) à faible  $N$ , en raison de la forte variation de  $\psi_n(x)$  près de  $x = 0$ , où le potentiel diverge.

À mesure que  $N$  augmente, la précision s'améliore, mais l'erreur finit par saturer, même pour des grilles très fines. Cette saturation n'est pas due à une discréétisation insuffisante, mais bien à l'erreur numérique intrinsèque aux méthodes utilisées: erreurs d'approximation de dérivées, accumulation des arrondis et limitations de précision machine. En particulier, Numerov, bien qu'en général plus précis pour les faibles  $n$ , est plus sensible aux oscillations rapides des états excités, ce qui peut entraîner des instabilités numériques pour de grandes valeurs de  $n$ .

Dans les graphiques de droite, contrairement à ceux de gauche, le nombre de points  $N$  est maintenu constant, et c'est la largeur de la boîte  $L$  qui est variée. Cette approche permet d'isoler l'effet de la taille du domaine spatial sur la précision. En effet, si la boîte est trop petite, les fonctions d'onde sont mal représentées ou tronquées aux bords, ce qui induit des erreurs importantes. À l'inverse, augmenter  $L$  permet de mieux capturer l'extension spatiale des états, ce qui améliore généralement la précision. Toutefois, il existe une valeur optimale: si  $L$  est trop grand pour un  $N$  fixe, la grille devient trop grossière ( $\Delta x = L/N$  augmente), et la résolution spatiale se dégrade.

Pour chaque potentiel étudié, une valeur optimale de  $L$  a été déterminée expérimentalement pour un compromis efficace entre précision et coût numérique.

- Oscillateur harmonique:  $L = 8 - 12$
- Barrière de potentiel:  $L = 20$
- Double puits:  $L = 16$  généralement, mais 20 marche bien pour  $n \gg 1$
- Puits fini:  $L = 12$
- Potentiel hydrogénoidé:  $L = 60 - 80$

## 11 Conclusion

Ce projet a permis de résoudre numériquement l'équation de Schrödinger 1D pour divers potentiels quantiques, en utilisant les méthodes des différences finies et de Numerov. Les visualisations graphiques, combinant potentiels, niveaux d'énergie, et densités de probabilité, ont mis en évidence des phénomènes quantiques clés comme le confinement, l'effet tunnel, et le dédoublement des niveaux. L'analyse de convergence a quantifié la précision des solutions numériques, montrant des erreurs relatives de l'ordre de  $10^{-3}$  à  $10^{-5}$  pour  $N \approx 1400$ , avec une supériorité marquée de la méthode de Numerov grâce à sa précision d'ordre  $\mathcal{O}(\Delta x^6)$ .

L'étude de l'atome d'hydrogène en 3D a complété l'analyse en introduisant la résolution analytique de l'équation radiale, avec des énergies et fonctions d'onde confirmées par les calculs numériques.

Ce travail illustre l'efficacité des méthodes numériques pour explorer la mécanique quantique. Des extensions futures pourraient inclure des potentiels dépendants du temps ou des méthodes spectrales pour une précision accrue.

## Annexes

On y distingue:

- les cercles, correspondant à la méthode des différences finies centrées (ordre 2), utilisée dans toutes les figures précédentes,
- et les carrés, obtenus avec l'algorithme de Numerov, qui présente une meilleure convergence pour des états peu oscillants mais devient instable pour les états très excités.

■ État 0 (Diff. finies)	● État 5 (Diff. finies)
■ État 0 (Numerov)	■ État 5 (Numerov)
● État 1 (Diff. finies)	● État 6 (Diff. finies)
■ État 1 (Numerov)	■ État 6 (Numerov)
● État 2 (Diff. finies)	● État 7 (Diff. finies)
■ État 2 (Numerov)	■ État 7 (Numerov)
● État 3 (Diff. finies)	● État 8 (Diff. finies)
■ État 3 (Numerov)	■ État 8 (Numerov)
● État 4 (Diff. finies)	● État 9 (Diff. finies)
■ État 4 (Numerov)	■ État 9 (Numerov)

Figure 12: Comparaison de la convergence des énergies numériques obtenues par différences finies (cercles) et par la méthode de Numerov (carrés).

## Bibliographie

- [1] Basdevant, J.L., and Dalibard, J., *Lectures on Quantum Mechanics: With Problems and their Solutions*, Springer, 2016.
- [2] Bennett, D., *Numerical Solutions to the Time-Independent 1-D Schrodinger Equation*, <https://www.maths.tcd.ie/~dbennett/js/schro.pdf>, 2015.
- [3] Capponi, S., *Notes de cours de Mécanique Quantique Avancée*, Université de Toulouse, 2025.
- [4] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., and Laloë, F., *Quantum Mechanics*, 2 vols., Wiley, 1977.
- [5] Griffiths, D.J., *Introduction to Quantum Mechanics*, 2nd ed., Cambridge University Press, 2004.
- [6] Kobeissi, H. Kobeissi, M. *A new variable step method for the numerical integration of the one-dimensional schrodinger equation*, *Journal of Computational Physics*, 77(2):501–512, 1988.
- [7] Moretti, V., *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics: An Advanced Short Course*, arXiv:1508.06951, 2015.
- [8] Nicolazzi, W., *Notes de cours de Mécanique Quantique 1*, Université de Toulouse, 2024.
- [9] Sakurai, J.J., and Napolitano, J., *Modern Quantum Mechanics*, 3rd ed., Cambridge University Press, 2020.
- [10] Tumulka, R., *Foundations of Quantum Mechanics*, Lecture Notes in Physics, Springer, 2022.