FRUH Arthur

TP Physique Quantique Préparatoire

1 Etude préliminaire

1. Puit de potentiel infini :
   Région extérieure au puit : comme $V = +\infty$ la seule solution physiquement acceptable est
   $$\phi(x) = 0$$
   Région intérieure : Ici $H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$
   En posant $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, l'équation de Schrödinger a pour solution :
   $\phi(x) = A\exp\{ikx\} + A'\exp\{-ikx\}$
   Les condtions limites donnent $2i\sin ka = 0$
   k est donc quantifié avec : $k_n = \frac{n\pi}{a}$, n entier strictement positif.
   Finalement après normalisation on trouve :
   $$\phi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}i\sin\frac{n\pi}{a}x$$
   $$E_n^{(0)} = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = n^2E_1^{(0)}$$
2. On écrit l'équation aux valeurs propres :
   $$H\left|\Psi\right\rangle = E\left|\Psi\right\rangle$$
   $$\sum_{m=1}^{+\infty} c_m H\left|\phi_m\right\rangle = \sum_{m=1}^{+\infty} c_m E\left|\phi_m\right\rangle$$
   On fait le produit scalaire avec $\left\langle\phi_n\right|$:
   $$\sum_{m=1}^{+\infty} c_m \underbrace{\left\langle\phi_n\right| H\left|\phi_m\right\rangle}_{\text{par définition : } H_{nm}} = \sum_{m=1}^{+\infty} Ec_m \underbrace{\left\langle\phi_n|\phi_m\right\rangle}_{\text{par définition : } \delta_{nm}}$$
   D'où :
   $$\sum_{m=1}^{+\infty} c_m H_{nm} = Ec_n \tag{1}$$
3. a)
   $$\nu_{OH} = \frac{V_{OH}}{E_1^{(0)}} = \frac{V_{OH}}{E_1^{(0)2}}\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma}$$
   D'où
   $$\nu_{OH} = (\frac{\pi\hbar\omega}{2E_1^{(0)}})^2(\frac{x}{a} - \frac{1}{2}) \tag{2}$$
   b) on écrit la définition des coefficients **H** normalisés
   D'une part :
   $$\delta_{nm}\frac{E_n^0}{E_1^0} = n^2\delta_{nm}\frac{E_1^0}{E_1^0} = n^2\delta_{nm}$$
   D'autre part, en posant $x' = \frac{x}{a}$:
   $$\frac{2}{a}\int_0^a sin(\frac{n\pi x}{a})\frac{V_{OH}}{E_1^0}sin(\frac{m\pi x}{a})dx = 2\int_0^1 sin(n\pi x')\nu_{OH}sin(m\pi x')dx'$$
   En combinant les deux résultats, on obtient bien :
   $$h_{nm} = n^2\delta_{nm} + 2\int_0^1 sin(n\pi x')\nu_{OH}sin(m\pi x')dx' \tag{3}$$

4. R représente le rapport entre le niveau fondamental du puits de potentiel et l'energie caractéristique quantique harmonique.

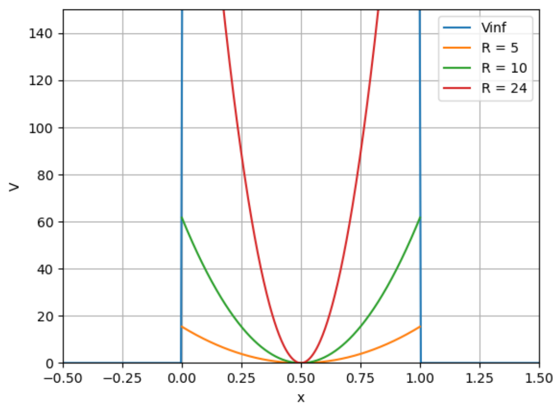


FIGURE 1: Potentiel harmonique pour différents R

On observe que plus R est petit, plus le caractère harmonique de l'Hamiltonien est négligeable devant le caractère de puit infini.

2 Résolution numérique

1. L'algorithme codé en python renvoie l'hamiltonien normalisé et adimensionné suivant :

$$h = \begin{pmatrix} 47.4352528 & 0 & 54 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 104.435252 & 0 & 64 & 0 & 13.5 \\ 54 & 0 & 119.435252 & 0 & 67.5 & 0 \\ 0 & 64 & 0 & 129.935252 & 0 & 69.12 \\ 10 & 0 & 67.5 & 0 & 140.555252 & 0 \\ 0 & 13.5 & 0 & 69.12 & 0 & 52.4352528 \end{pmatrix} \tag{4}$$

Et l'on a donc :

$$H = E_1^0 h \tag{5}$$

Un coefficient non diagonal sur deux est nul car l'intégrande peut être impaire par rapport à $\frac{a}{2}$, annulant ainsi l'intégral.Dans le programme, on a mis la valeur 0 au coefficient dont la valeur était inférieur à la précision de la fonction quad du module scipy.integrate.

2. a) b) On a calculé les valeurs propres $\epsilon(n)$ et on les a tracés en fonction de n, comme vu sur la figure suivante :

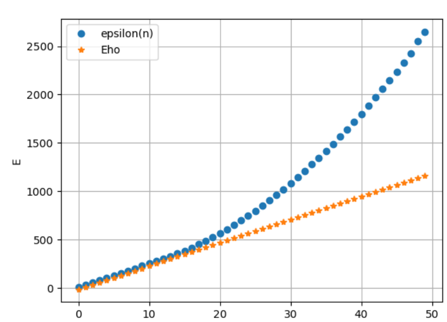


FIGURE 2: Graphe de $\epsilon(n)$ et de l'énergie de l'oscillateur harmonique

Dans la zone $n \in [1, 15]$, on observe que la courbe calculé coïncide avec la courbe de l'oscillateur harmonique, ce qui est en accord avec le fait qu'à basse energie, le potentiel harmonique l'emporte.

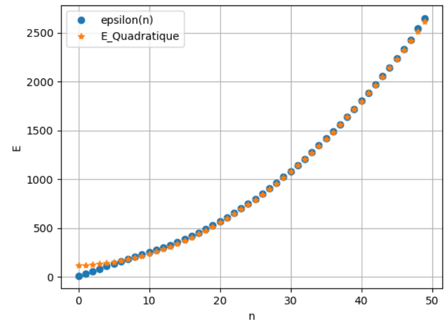
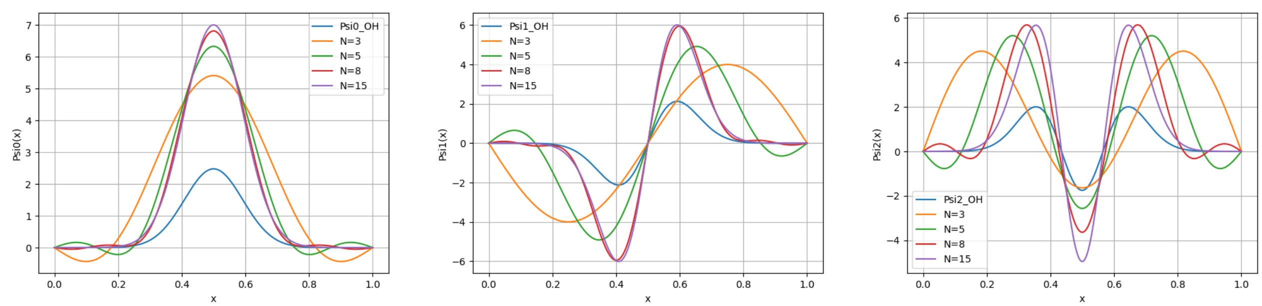


FIGURE 3: Graphe de $\epsilon(n)$ et de la modélisation

Le modèle de puit infini est plus correcte pour des valeurs de n grandes. Ce qui semble logique, plus la particule est haute dans le puit, moins la partie harmonique du potentiel joue sur son energie.
On à donc deux zones : si $n \leq 15$ le potentiel harmonique l'emporte si $n \geq 15$ le potentiel du puit infini l'emporte.
Le programme Python donne C = 116.0950616766584

3. On a résolu numériquement (algorithmes en annexes) pour trouver les fonctions d'ondes de x, mais la résolution colle peu aux courbes théoriques :



(a) $\Psi_2(x)$ (b) $\Psi_2(x)$ (c) $\Psi_2(x)$

FIGURE 4: tracé des $\Psi(x)$ pour différent N,n et comparaison avec les fonctions trouvées analytiquement

On vérifie une correspondance entre la courbe théorique et les courbes trouvés numériquement. Les amplitudes sont différentes car il faudrait normaliser les fonctions calculées.