

TP numérique de Physique Quantique 2022/2023

Résolution numérique de problèmes de physique quantique

ESPCI PARIS - PSL

Rédigé par
Baran CELIK

2022/2023
Encadrants : Nicolas BERGEAL
Sergio VLAIC

1 L'oscillateur harmonique dans tous ses états (quantiques)

Dans ce TP, notre objectif est de trouver des solutions numériques approchées pour le problème de l'oscillateur harmonique quantique et de les comparer aux solutions analytiques démontrées en cours. Nous allons utiliser l'approche proposée par F. MARSIGLIO, qui consiste à localiser le potentiel harmonique à l'intérieur d'un puits de potentiel infini, tronqué par les parois du puits (*Figure 1*). Les fonctions propres du puits infini seront utilisées comme base de l'espace des états, ce qui nous permettra de rechercher numériquement les énergies propres et les fonctions propres approchées de l'oscillateur harmonique.

1.1 Étude préliminaire

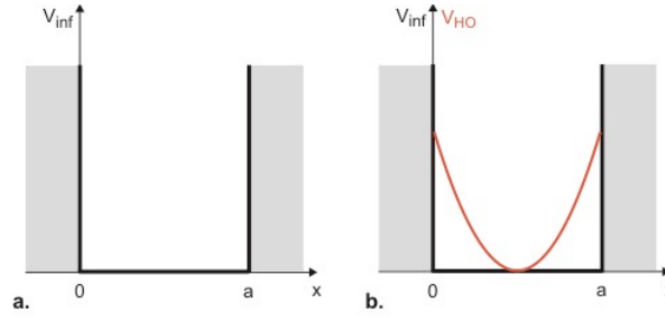


FIGURE 1 – **a.** Puits de potentiel infini unidimensionnel de largeur a **b.** Potentiel harmonique unidimensionnel VHO localisé dans un puits infini

1.1.1 Puits de potentiel infini

On considère tout d'abord une particule de masse m confinée dans le puits de potentiel infini décrit sur la *Figure 1a*. L'expression du potentiel dans ce cas est la suivante :

$$V_{inf}(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in [a, b] \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Nous pouvons alors écrire l'équation du Schrödinger pour la particule dans la zone $0 \leq x \leq a$:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + \varphi(x)E = 0 \quad (1)$$

Ainsi cela nous permet d'écrire la fonction d'onde dans les 3 zones :

$$\varphi(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ A \cos(kx) + B \sin(kx) & \text{si } 0 \leq x \leq a, \text{ avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \text{ et } A, B \in \mathbb{C} \\ 0 & \text{si } x > a \end{cases}$$

Par continuité : $\varphi(0) = A = 0 \implies \varphi(x) = B \sin(kx)$

Puis : $\varphi(a) = B \sin(ka) = 0 \implies \sin(ka) = 0 \implies k_n = \frac{n\pi}{a}$

On a alors :

$$E_n^{(0)} = \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = n^2 E_1^{(0)} \quad (2)$$

On normalise la solution à l'unité :

$$\begin{aligned}
& \int_0^a |\varphi(x)|^2 dx = 1 \\
\Rightarrow & \int_0^a |B \sin(kx)|^2 dx = 1 \\
\Rightarrow & \frac{a |B|^2}{2} = 1 \\
\Rightarrow & B = \sqrt{\frac{2}{a}}
\end{aligned}$$

On obtient finalement :

$$\boxed{\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)} \quad (3)$$

1.1.2 Potentiel harmonique dans un puits infini

Nous nous intéresserons, à présent, à la situation représentée sur la *Figure 1b* dans laquelle la particule est soumise à un potentiel harmonique localisé à l'intérieur du puits infini.

En représentation $\{x\}$, $H = H_0 + V_{OH}$ où $V_{OH} = \frac{1}{2}m\omega^2(x - \frac{a}{2})^2$ est le potentiel harmonique centrée en $x = \frac{a}{2}$. ω est la pulsation de l'oscillateur harmonique.

On cherche les solutions de l'équation de Schrödinger $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ où $|\Psi\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} c_m |\varphi_m\rangle$ est développée sur la base $\{|\varphi_m\rangle\}$ des états propres du puits infini introduits dans la question 1.

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \sum_{m=0}^{\infty} c_m \langle \varphi_n | H | \varphi_m \rangle = E \sum_{m=0}^{\infty} c_m \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle \quad (4)$$

Or $\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{n,m}$ et $H_{n,m} = \langle \varphi_n | H | \varphi_m \rangle$.

Ainsi :

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \sum_{m=0}^{\infty} H_{n,m} c_m = E c_n \quad (5)$$

On peut écrire le potentiel harmonique sous une forme normalisée sans dimension. En effet, d'après le résultat de la partie précédente $E_1^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$. Ainsi, $V_{OH} = \frac{a^2}{2} m \omega^2 (\frac{x}{a} - \frac{1}{2})^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4E_1^{(0)}} \omega^2 (\frac{x}{a} - \frac{1}{2})^2$.

Le coefficient normalisé est alors :

$$\boxed{\nu_{OH} = \frac{V_{OH}}{E_1^{(0)}} = \frac{\pi^2}{4} \left(\frac{\omega \hbar}{E_1^{(0)}} \right)^2 \left(\frac{x}{a} - \frac{1}{2} \right)^2} \quad (6)$$

Les éléments de la matrice de l'Hamiltonien H dans la base $\{|\varphi_m\rangle\}$ s'écrivent

$$H_{n,m} = E_n^{(0)} \delta_{n,m} + \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) V_{OH} \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) dx$$

On peut écrire les coefficients de H normalisée en divisant $H_{n,m}$ par $E_1^{(0)}$ puis en utilisant les expressions

$E_n^{(0)} = n^2 E_1^{(0)}$ et $\nu_{OH} = \frac{V_{OH}}{E_1^{(0)}}$. On effectue en suite le changement de variable dans l'intégrale $x' = \frac{x}{a}$ et $dx = a dx'$. On a alors :

$$h_{n,m} = \frac{H_{n,m}}{E_1^{(0)}} = n^2 \delta_{n,m} + 2 \int_0^1 \sin(n\pi x') \nu_{OH}(x') \sin(m\pi x') dx' \quad (7)$$

On note R le rapport $\frac{\hbar\omega}{E_1^{(0)}}$.

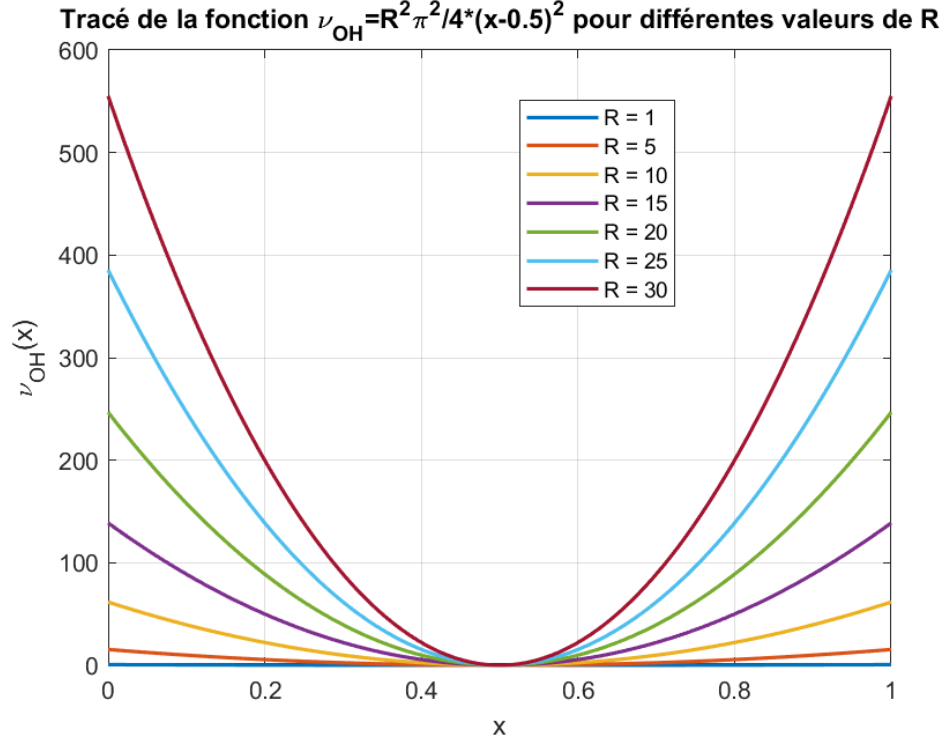


FIGURE 2 – $\nu_{OH} = R^2 \pi^2 / 4 * (x - 0.5)^2$ pour différentes valeurs de R et $x \in [0, 1]$

R est le rapport entre l'énergie d'un oscillateur harmonique de fréquence ω et l'énergie fondamentale d'une particule confinée dans un puits infini.

Le rapport R détermine la contribution de l'énergie potentielle harmonique à l'énergie totale de la particule, par rapport à son énergie fondamentale dans le puits infini. En d'autres termes, il nous permet de quantifier l'importance de l'oscillation harmonique par rapport à l'état de base de la particule confinée.

Si R est élevé, cela signifie que l'énergie potentielle harmonique joue un rôle significatif dans l'énergie totale de la particule. Si R est faible, cela signifie que l'énergie potentielle harmonique a une contribution relativement faible par rapport à l'énergie fondamentale de la particule dans le puits infini.

1.2 Résolution numérique

Notre objectif est de résoudre numériquement le problème de la particule soumise à un potentiel harmonique tronqué par un puits infini (*Figure 1a*). Ainsi, nous devons trouver les valeurs propres et vecteurs propres de la matrice H . Dans la suite, on prendra $R = 24$ et on limitera le nombre d'éléments dans la

décomposition de $|\Psi\rangle$ à une valeur entière N ce qui fixe la taille de la matrice H.

On détermine numériquement la matrice H pour N=6 :

$$H = \begin{pmatrix} 47.4353 & 0 & 54 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 104.4353 & 0 & 64 & 0 & 13.5 \\ 54 & 0 & 119.4353 & 0 & 67.5 & 0 \\ 0 & 64 & 0 & 129.9353 & 0 & 69.12 \\ 10 & 0 & 67.5 & 0 & 140.5553 & 0 \\ 0 & 13.5 & 0 & 69.12 & 0 & 152.4353 \end{pmatrix} \quad (8)$$

Nous pouvons remarquer qu'un terme non-diagonal sur deux est nul dans la matrice H. Ce sont les coefficients $H_{n,m}$ qui se trouvent sur une ligne n et une colonne m de parités différentes.

Lorsque n et m sont de parité différente, les termes $\sin(n\pi x')$ et $\sin(m\pi x')$ ont des parités différentes pour $x' \in [0,1]$. Par conséquent, leur produit $\sin(n\pi x')\sin(m\pi x')$ est une fonction impaire. De plus, le terme $(x' - \frac{1}{2})^2$ dans l'intégrande est une fonction paire. Ainsi, le produit total est une fonction impaire multipliée par une fonction paire, ce qui donne une fonction impaire. Lorsque nous intégrons une fonction impaire sur un intervalle symétrique par rapport à son centre, comme l'intervalle $[0, 1]$, l'intégrale est toujours nulle.

1.2.1 Énergies propres

Soit $N = 50$. On considère les énergies propres normalisées de la particule $\epsilon(n) = \frac{E(n)}{E_1^0}$. Les énergies propres étant non-dégénérées, n varie de 1 à N.

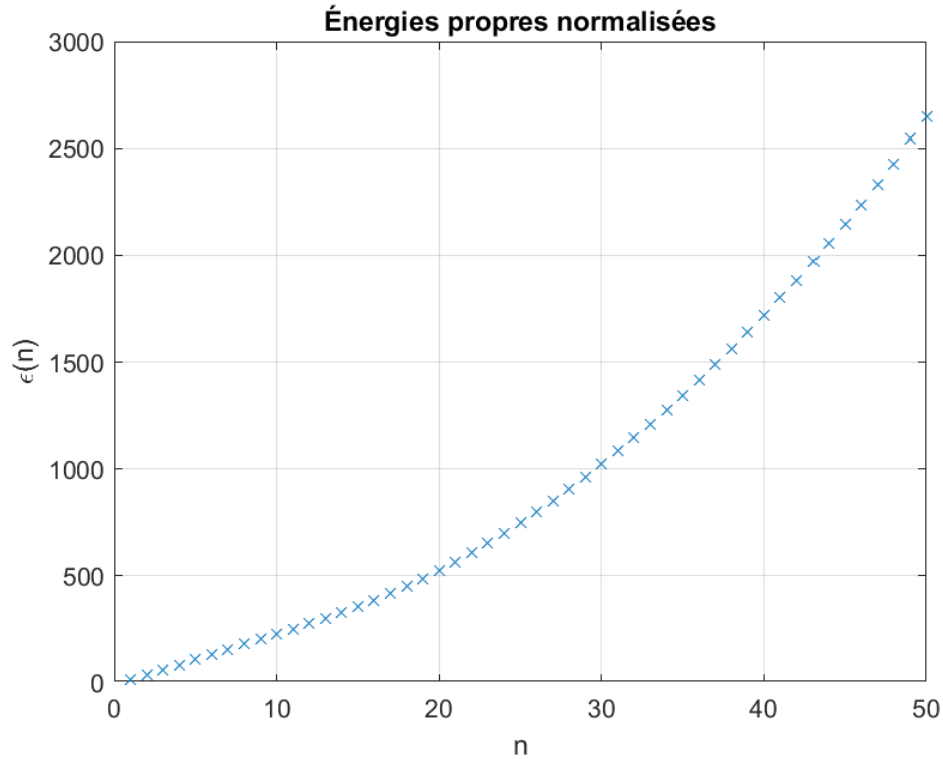


FIGURE 3 – Énergies propres normalisées en fonction de n

Les énergies propres d'un oscillateur harmonique (non-tronqué) s'écrivent :

$$E_{HO}(k) = \hbar\omega(k + \frac{1}{2}) \quad (9)$$

où $k \in \mathbb{N}$

On normalise en divisant cette expression par E_1^0 .

On a alors :

$$e_{HO}(k) = R(k + \frac{1}{2}) \quad (10)$$

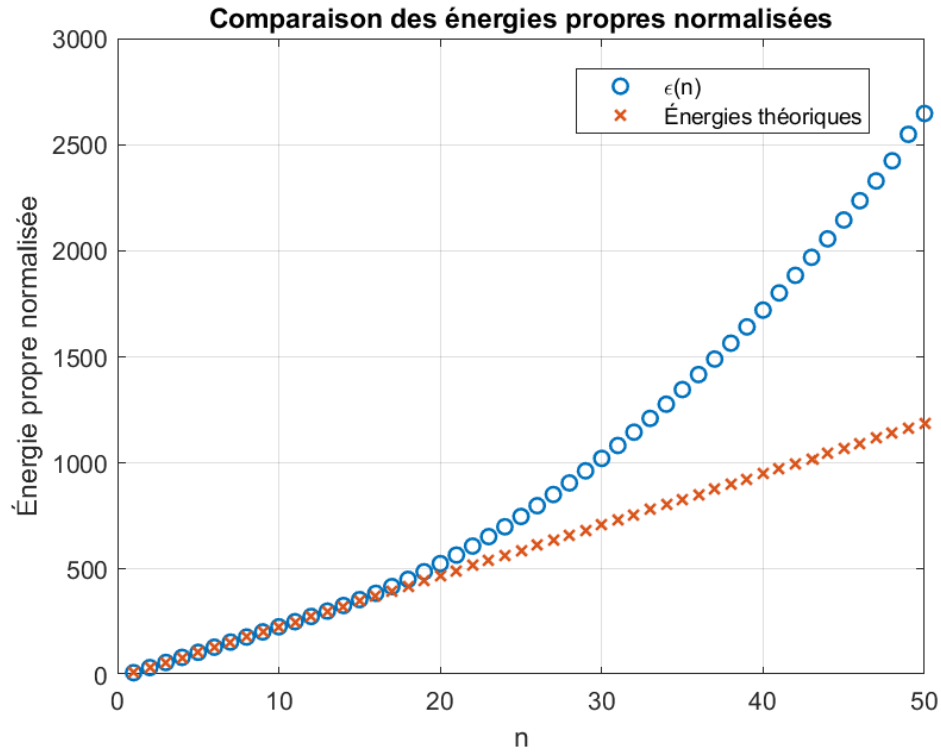


FIGURE 4 – Comparaison des énergies propres normalisées

On observe un très bon accord entre ces courbes pour $n < 15$. Lorsque n devient supérieur à 15, on observe que la courbe change d'allure. En effet, la partie linéaire ($n < 15$) devient une partie polynomiale de degré 2 ($n > 15$). Ainsi, dans la zone $n > 15$, les $\epsilon(n)$ sont de type "puits infini" (cf. [Puits de potentiel infini](#)).

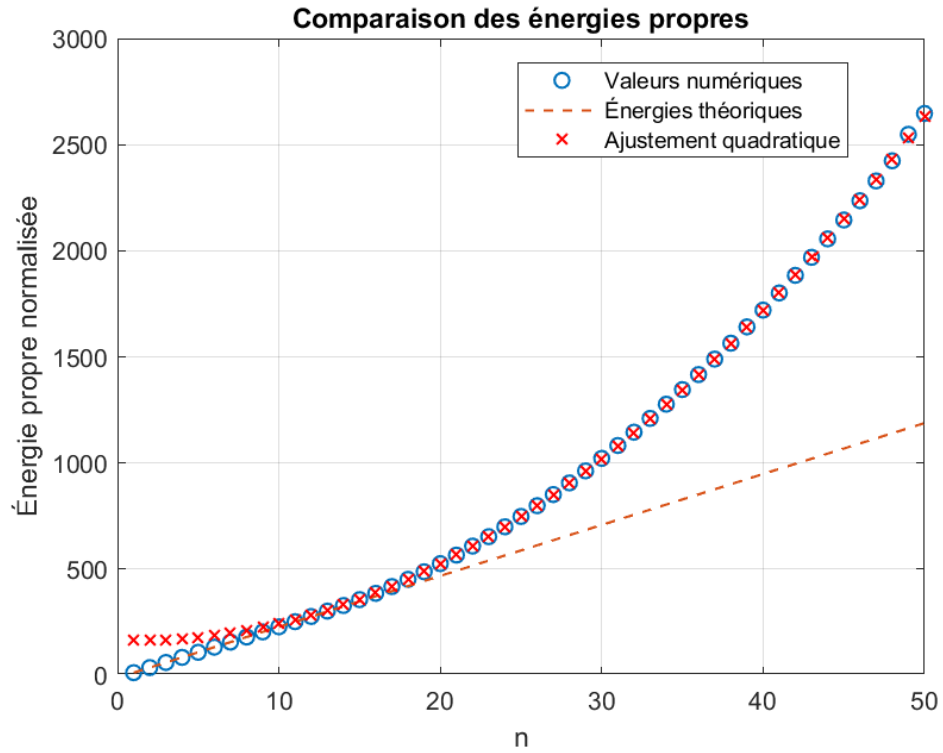


FIGURE 5 – Comparaison des énergies propres normalisées avec l’ajustement quadratique : $f(n) = 1.0447 * n^2 - 2.9382 * n + 167.3799$

D’après la fonction POLYFIT de MATLAB, la fonction polynomiale de degré 2 qui représente le mieux $\epsilon(n)$ pour $n > 15$ est :

$$f(n) = 1.0447n^2 - 2.9382n + 167.3799$$

Dans le sujet, on cherche $f(n)$ sous la forme $f(n) = n^2 + C$ avec C une constante. Nous pouvons forcer le coefficient en n^2 égale à 1 et celui en n égale à 0, on obtient une fonction polynomiale :

$$f(n) = n^2 + 132 \quad (11)$$

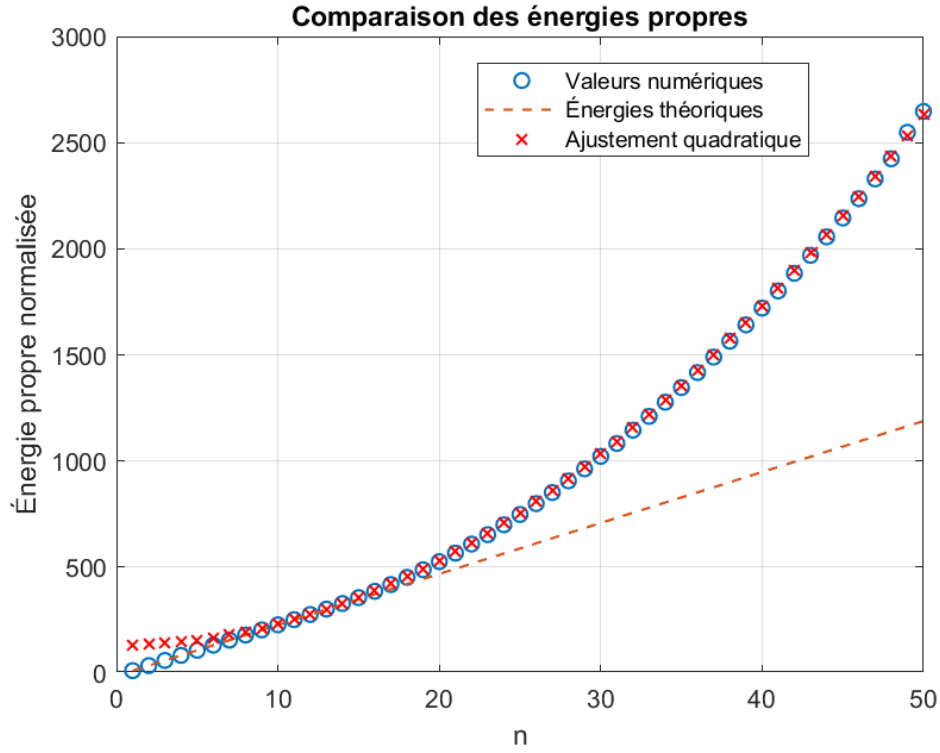


FIGURE 6 – Comparaison des énergies propres normalisées avec l’ajustement quadratique : $f(n) = n^2 + 132$

REMARQUE : la constante C correspond à l’énergie accumulée par la particule avant la zone quadratique du puits infini.

1.2.2 Fonctions propres

A présent, on s’intéresse aux fonctions propres de la particule $\Psi_n(x) = \langle x | \Psi_n \rangle$. Nous fixons $a = 1$ pour la taille du puits.

Rappel :

$$|\Psi_n\rangle = \sum_{m=0}^N c_m |\varphi_m\rangle$$

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

Nous déterminons numériquement les fonctions d’onde de l’état fondamental $\Psi_0(x)$, du première état excité $\Psi_1(x)$ et du deuxième état excité $\Psi_2(x)$ pour $N=3,5,8$ et 15. Puis on les compare avec les fonctions d’onde théoriques que nous avons vu en cours :

$$\Psi_0^{HO}(x) = \left(\frac{\pi}{2a^2}R\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{\pi^2}{4}R\left(\frac{x}{a} - \frac{1}{2}\right)^2\right) \quad (12)$$

$$\Psi_1^{HO}(x) = \left(\frac{\pi^5}{2a^2}R^3\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{x}{a} - \frac{1}{2}\right) \exp\left(-\frac{\pi^2}{4}R\left(\frac{x}{a} - \frac{1}{2}\right)^2\right) \quad (13)$$

$$\Psi_2^{HO}(x) = \left(\frac{\pi}{8a^2}R\right)^{\frac{1}{4}} \left(\pi^2 R \left(\frac{x}{a} - \frac{1}{2}\right)^2 - 1\right) \exp\left(-\frac{\pi^2}{4}R\left(\frac{x}{a} - \frac{1}{2}\right)^2\right) \quad (14)$$

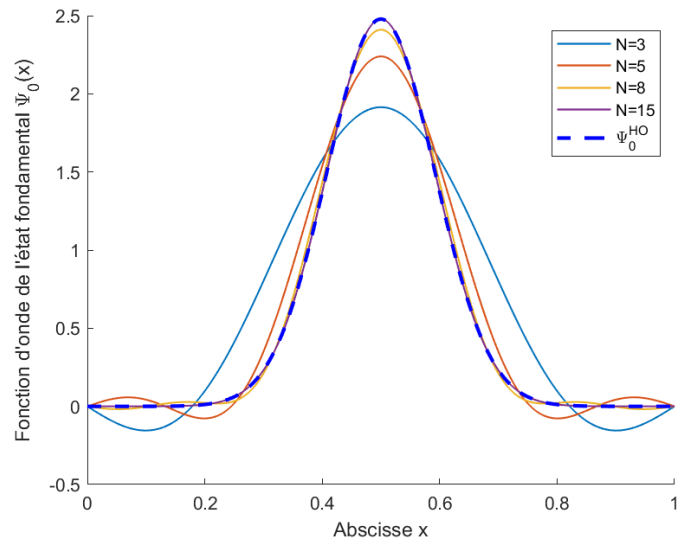


FIGURE 7 – Comparaison entre la fonction d'onde de l'état fondamental numérique et Ψ_0^{HO} théorique

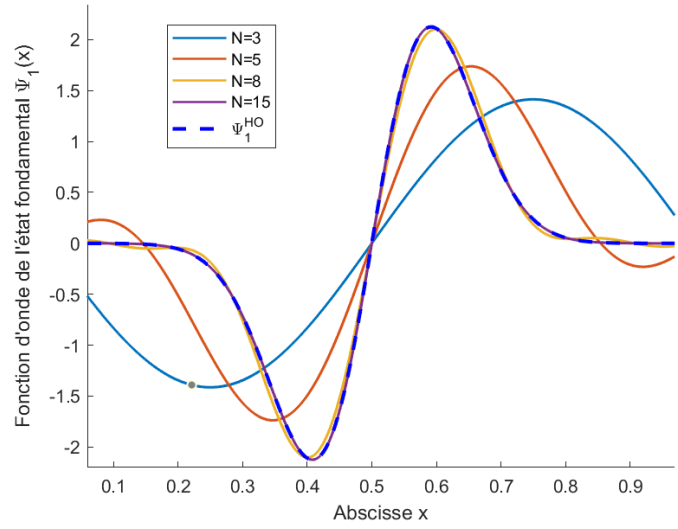


FIGURE 8 – Comparaison entre la fonction d'onde du première état excité numérique et Ψ_1^{HO} théorique

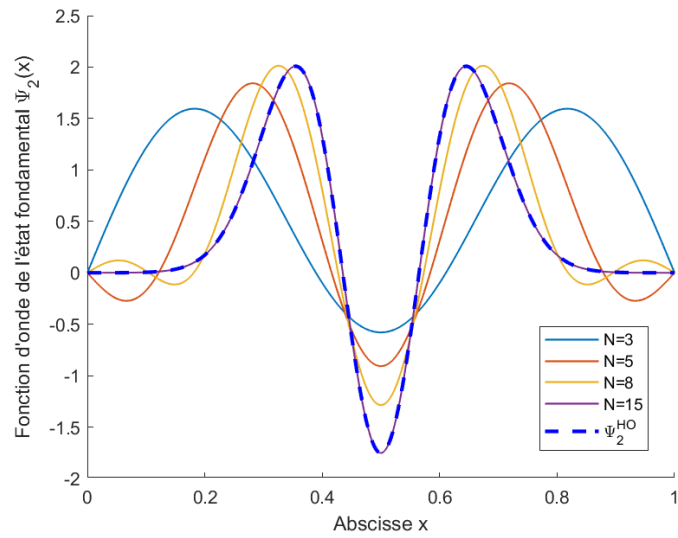


FIGURE 9 – Comparaison entre la fonction d'onde du deuxième état excité numérique et Ψ_2^{HO} théorique

On remarque que lorsque N est suffisamment grand, on obtient un excellent accord entre les fonctions d'onde numériques et celles théoriques.

Ainsi, notre système se comporte comme un oscillateur harmonique pour $n < 15$ et comme un puits infini pour $n > 15$. La valeur $n=15$ de cette transition dépend de $R = \frac{\hbar\omega}{E_1}$. Nous pouvons tracer $\epsilon(n)$ pour différentes valeurs de R :

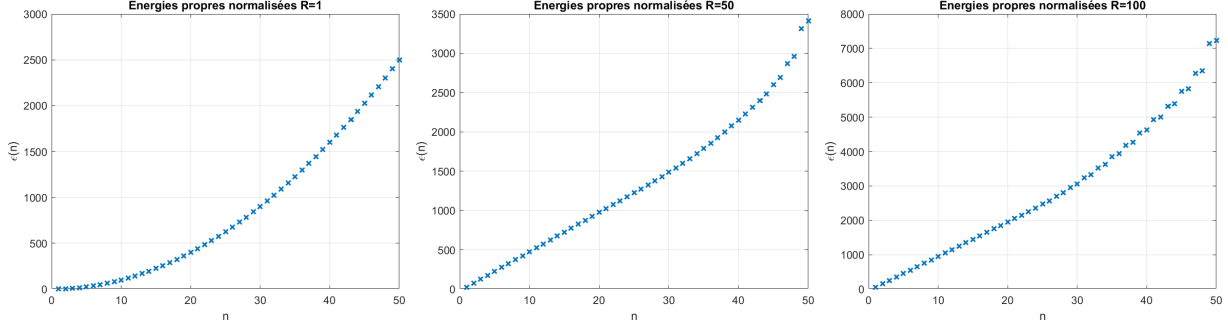


FIGURE 10 – $\epsilon(n)$ pour $R=1, 50$ et 100

La durée du régime harmonique est croissante avec la valeur de R. Le système restera plus longtemps en régime harmonique pour des valeurs de R élevées. Tandis que si R est proche de 1, le régime harmonique "n'existe" presque pas, le système se comporte comme un puits infini.

Nous avons ainsi effectué **une méthode numérique permettant de trouver les solutions de l'oscillateur harmonique quantique**.

2 Résonance paramagnétique électronique dans le rubis

2.1 Etude théorique des transitions RPE dans un monocristal de Rubis

Le problème est amené à celui d'un spin total $S = \frac{3}{2}$ dû aux trois électrons dont l'Hamiltonien dans un champ magnétique statique \vec{B}_0 s'écrit :

$$H = \frac{-2\pi D}{\hbar} (S_z^2 - \frac{S^2}{3}) + g \frac{eB_0}{2m} (S_z \cos(\theta) + S_x \sin(\theta)) \quad (15)$$

On souhaite écrire la matrice de l'Hamiltonien dans la base $|s, m_s\rangle$.

$$S = \frac{3}{2} \implies m_s \in \{-\frac{3}{2}; -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; \frac{3}{2}\}$$

On travaille alors dans la base $\mathcal{B} = \{|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle; |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle; |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle; |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle\}$.

On pose :

$$S_+ = S_x + iS_y \quad S_- = S_x - iS_y \quad (16)$$

On peut alors déterminer S_x en fonction de S_+ et de S_-

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) \quad (17)$$

Les équations aux valeurs propres de l'opérateur S^2 , S_z , S_+ et S_- dans la base $|s, m_s\rangle$ sont les suivantes :

$$S^2 |s, m_s\rangle = S(S+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle \quad (18)$$

$$S_z |s, m_s\rangle = m_s \hbar |s, m_s\rangle \quad (19)$$

$$S_+ |s, m_s\rangle = \hbar \sqrt{S(S+1) - m_s(m_s+1)} |s, m_s+1\rangle \quad (20)$$

$$S_- |s, m_s\rangle = \hbar \sqrt{S(S+1) - m_s(m_s-1)} |s, m_s-1\rangle \quad (21)$$

On peut alors écrire les matrices de ces opérateurs dans la base \mathcal{B} définie précédemment.

$$S^2 = \frac{15}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (22)$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \quad (23)$$

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \quad (24)$$

$$S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (25)$$

Nous pouvons, à présent, calculer H dans la base \mathcal{B} . On pose $\sigma = g \frac{e}{2m}$.

$$H = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -4\pi D - 3B_0\sigma\cos(\theta) & \sqrt{3}B_0\sigma\sin(\theta) & 0 & 0 \\ \sqrt{3}B_0\sigma\sin(\theta) & 4\pi D - B_0\sigma\cos(\theta) & 2B_0\sigma\sin(\theta) & 0 \\ 0 & 2B_0\sigma\sin(\theta) & 4\pi D + B_0\sigma\cos(\theta) & \sqrt{3}B_0\sigma\sin(\theta) \\ 0 & 0 & \sqrt{3}B_0\sigma\sin(\theta) & -4\pi D + 3B_0\sigma\cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (26)$$

L'Hamiltonien n'est pas une matrice diagonale. On s'attendait à ce résultat dans la base $|s, m_s\rangle$, car il existe un angle θ pour le terme correspondant à l'effet Zeeman, θ qui est l'angle entre l'axe (Oz) et le champ B_0 . Ainsi, lorsqu'il n'y a plus de champ ou bien que le champ est orienté selon l'axe (Oz) (c'est-à-dire $\theta=0$), on a bien un Hamiltonien diagonal.

2.2 Etude numérique des transitions RPE dans un monocristal de Rubis

Dans la suite de ce travail, notre objectif sera de diagonaliser l'Hamiltonien afin obtenir les énergies propres et vecteurs propres du système pour toute valeur de champ B_0 comprise entre 0 et 6000G et tout angle θ entre 0 et 190°.

On exprimera les énergies directement en unité de fréquence (en divisant par la constante de Planck) ce qui permettra de comparer directement cette grandeur à la fréquence de la cavité. La fréquence de résonance de la cavité est $f_{cav} = 9.19$ GHz.

2.2.1 Cas de l'angle $\theta=50^\circ$

Nous traçons l'énergie en unité de fréquence des différents états propres en fonction du champ B_0 .

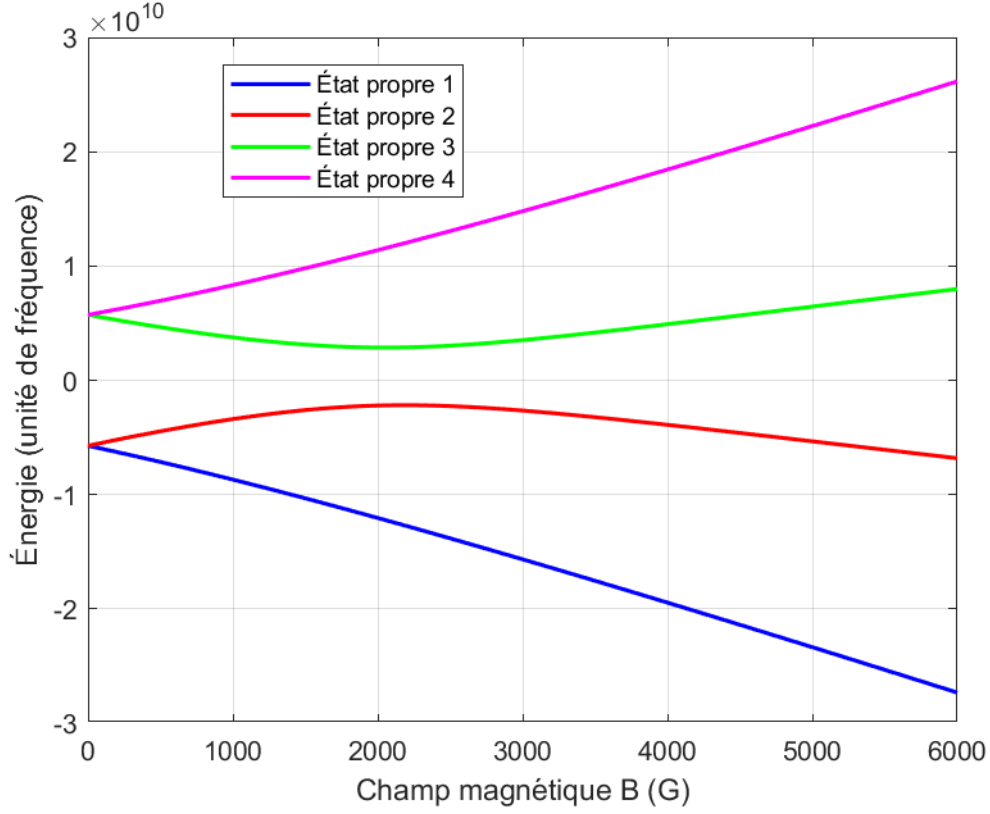


FIGURE 11 – Énergie des états propres en fonction du champ magnétique B_0

Expression des états propres (EP) dans la base $|s, m_s\rangle$

Pour $B_0 = 0G$:

$$EP_{0G} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (27)$$

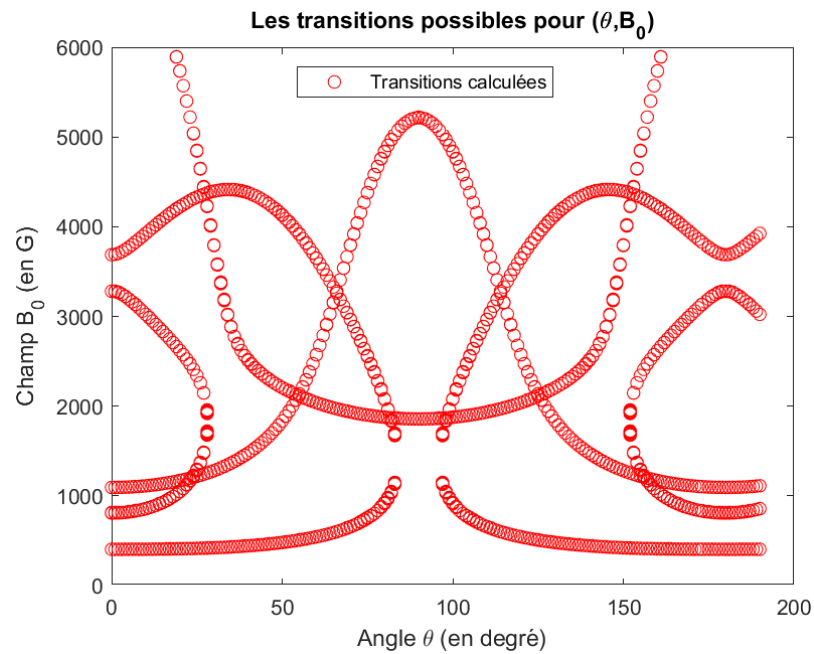
Pour $B_0 = 6000G$:

$$EP_{6000G} = \begin{pmatrix} -0.8874 & 0.3907 & 0.2254 & 0.0949 \\ 0.4307 & 0.5296 & 0.6053 & 0.4095 \\ -0.1575 & -0.6328 & 0.1652 & 0.7399 \\ 0.0464 & 0.4079 & -0.7454 & 0.5252 \end{pmatrix} \quad (28)$$

On s'intéresse au nombre de transitions qui seront visibles sur le spectre RPE à $\theta=50^\circ$. Une transition est possible lorsque la différence entre deux valeurs propres consécutives est égale à la fréquence de la cavité (9.19 GHz). Sur la figure 10, on observe 4 états de transitions pour les valeurs approximatives de B suivantes : 0G, 2000G, 2600 et 4200G.

2.2.2 Cas général : $\theta \in [0, 190]^\circ$ et $B_0 \in [0, 6000]G$

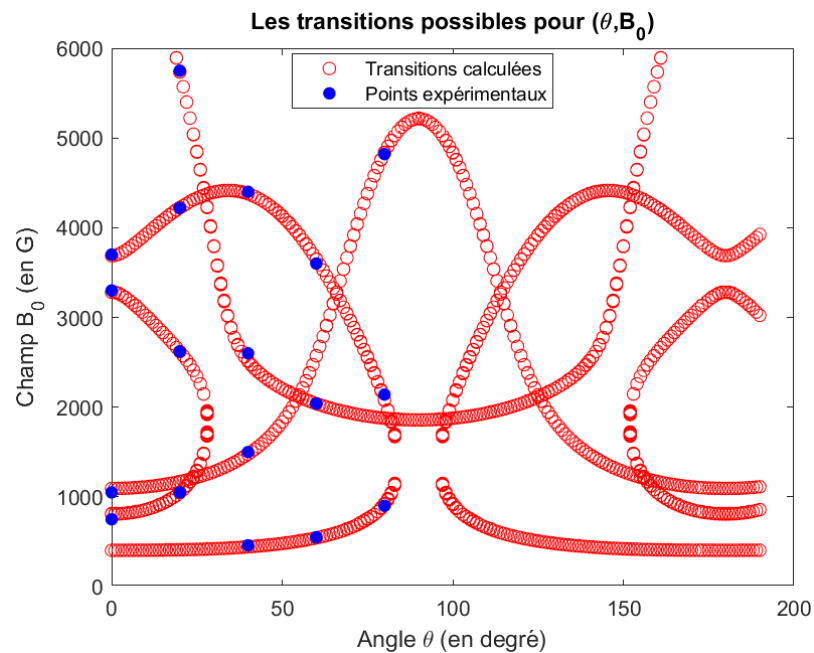
Notre objectif est de déterminer toutes les transitions possibles correspondant à la fréquence de la cavité en fonction de l'angle θ et du champ B_0 .



En 2018, des étudiants de l'ESPCI ont mesuré en TP, le spectre RPE d'un tel cristal de rubis pour différents angles θ et champs B_0 et ont réussi à identifier les transitions suivantes :

θ	B_0			
0°	750G	1050G	3300G	3700G
20°	1050G	2620G	4220G	5750G
40°	460G	1500G	2600G	4400G
60°	550G	2040G	3600G	-
80°	900G	2140G	4820G	-

Superposons les résultats numériques avec les résultats expérimentaux des étudiants :



On obtient un très bon accord entre les transitions calculées et les points expérimentaux. Les mesures en TP ont été effectuées correctement.

Conclusion du TP numérique

Ce travail a démontré que l'utilisation de la modélisation numérique permet d'obtenir des solutions analytiques satisfaisantes et de réaliser des prédictions expérimentales cohérentes.

Par conséquent, la modélisation numérique se révèle être un outil précieux dans le domaine de la physique quantique.

3 ANNEXE : les codes MATLAB pour la réalisation du TP

Appendices

A Codes MATLAB

```
% Partie théorique : Tracer \nu_{OH}(x) selon différentes valeurs
% de R

R_liste = [1 5 10 15 20 25 30] % Valeurs de R

x=linspace(0,1,100); % Intervalle de x

% Tracé de la fonction pour chaque valeur de R
for i = 1:numel(R_liste)
    R = R_liste(i);
    y = (pi^2/4) * R^2 * (x-1/2).^2;
    plot(x, y, 'DisplayName', sprintf('R = %d', R),LineWidth=1.5);
    hold on;
```

FIGURE 12 – Étude théorique : allure du potentiel harmonique pour différents R

A.1 Résolution numérique

```
% 1) MATRICE H POUR N=6

N = 6; % taille de la matrice (NxN)
H = zeros(N);

for n = 1:N
    for m = 1:N
        integrand = @(x) sin(n*pi*x).*sin(m*pi*x).*(x-0.5).^2;% intégrande
        if n == m % Boucle if pour le symbole de Kronecker
            H(n, m) = n^2 + (2*(24*pi)^2/4) * integral(integrand, 0, 1);
        else
            H(n, m) = (2*(24*pi)^2/4) * integral(integrand, 0, 1);
        end
    end
end

disp(H);
```

FIGURE 13 – Matrice H sous forme numérique pour N=6

```

% 2) a. Déterminer \epsilon(n)

N = 50; % Taille de la matrice

H = hamiltonien(N);

[vecs, vals] = eig(H); % Calcul des valeurs propres et vecteurs propres
energies = diag(vals); % Extraction des valeurs propres (énergies)

% Tracer des énergies normalisées en fonction de n
n_liste = 1:N;
plot(n_liste, energies, 'x');
xlabel('n');
ylabel('\epsilon(n)');
title('Énergies propres normalisées');
grid on;

```

FIGURE 14 – Calculer les valeurs numériques de $\epsilon(n)$

```

% 2) b. Comparaison des énergies propres d'un oscillateur
% harmonique

% Paramètres
N = 50; % Taille de la matrice
R=24;
h = 6.626e-34; % Constante de Planck

H = hamiltonien(N);

[vecs, vals] = eig(H); % Calcul des valeurs propres et vecteurs propres
energies = diag(vals); % Extraction des valeurs propres (énergies)

% Calcul des énergies théoriques de l'oscillateur harmonique non-tronqué
k_liste = 0:N-1;
energies_theoriques_norm = R*(k_liste + 0.5);

% Tracer des énergies propres normalisées en fonction de n
n_liste = 1:N;
plot(n_liste, energies, 'o', n_liste, energies_theoriques_norm, 'x', LineWidth=1.2);
xlabel('n');
ylabel('Énergie propre normalisée');
title('Comparaison des énergies propres normalisées');
legend('\epsilon(n)', 'Énergies théoriques');
grid on;

```

FIGURE 15 – Comparer les valeurs numériques de $\epsilon(n)$ avec les énergies propres d'un oscillateur harmonique non-tronqué


```

% 3) Comparaison entre les fonctions d'onde théorique et numérique: \Psi_0, \Psi_1 et \Psi_2

% Paramètres
a = 1;
N_values = [3,5,8,15];
N_points = 1000;
x = linspace(0,a,N_points);
R=24;

% \Psi_0(x) :
for i=1:length(N_values)
    N=N_values(i);
    H=hamiltonien(N);

    psi = fonctionOnde(H,N,N_points,0,x);

    figure(1)
    hold on

    % On crée une boucle if pour multiplier le résultat par -1 et ne pas avoir
    % un psi de signe inversé.
    if i == 1 || i == 4
        plot(x,-psi,LineWidth=1.1)
    else
        plot(x,psi ,LineWidth=1.1)
    end
end

% Tracer \Psi_0(x) numérique et théorique
plot(x,psi0(x),'b--','LineWidth',2)
legend('N=3', 'N=5', 'N=8', 'N=15', '\Psi_0^{\{H0\}}')
title("Comparaison entre la fonction d'onde de l'état fondamental numérique et \Psi_0^{\{H0\}} théorique")
ylabel("Fonction d'onde de l'état fondamental \Psi_0(x)")
xlabel("Abscisse x")

```

FIGURE 16 – Comparaison entre la fonctions d'onde théoriques $\Psi_0(x)$ et la fonction numérique pour $N=3,5,8,15$

```

% \Psi_1(x) :
for i=1:length(N_values)
    N=N_values(i);
    H=hamiltonien(N);

    psi = fonctionOnde(H,N,N_points,1,x);

    figure(2)
    hold on
    if i == 4
        plot(x,psi,LineWidth=1.2)
    else
        plot(x,-psi,LineWidth=1.2)
    end
end

% Tracer \Psi_1(x) numérique et théorique
plot(x,psi1(x),'b--','LineWidth',2)
legend('N=3', 'N=5', 'N=8', 'N=15', '\Psi_1^{\{H0\}}')
title("Comparaison entre la fonction d'onde de l'état fondamental numérique et \Psi_1^{\{H0\}} théorique")
ylabel("Fonction d'onde de l'état fondamental \Psi_1(x)")
xlabel("Abscisse x")

```

FIGURE 17 – Comparaison entre la fonctions d'onde théoriques $\Psi_1(x)$ et la fonction numérique pour $N=3,5,8,15$

```

% \Psi_2(x) :
for i=1:length(N_values)
    N=N_values(i);
    H=hamiltonien(N);

    psi = fonctionOnde(H,N,N_points,2,x);

    figure(3)
    hold on

    if i == 3
        plot(x,-psi,LineWidth=1.1)
    else
        plot(x,psi ,LineWidth=1.1)
    end
end

% Tracer \Psi_2(x) numérique et théorique
plot(x,psi2(x),'b--','LineWidth',2)
legend('N=3', 'N=5', 'N=8','N=15','\Psi_2^{H0}')
title("Comparaison entre la fonction d'onde de l'état fondamental numérique et \Psi_2^{H0} théorique")
ylabel("Fonction d'onde de l'état fondamental \Psi_2(x)")
xlabel("Abscisse x")

```

FIGURE 18 – Comparaison entre la fonctions d’onde théoriques $\Psi_2(x)$ et la fonction numérique pour $N=3,5,8,15$

```

% \Psi_2(x) :
for i=1:length(N_values)
    N=N_values(i);
    H=hamiltonien(N);

    psi = fonctionOnde(H,N,N_points,2,x);

    figure(3)
    hold on

    if i == 3
        plot(x,-psi,LineWidth=1.1)
    else
        plot(x,psi ,LineWidth=1.1)
    end
end

% Tracer \Psi_2(x) numérique et théorique
plot(x,psi2(x),'b--','LineWidth',2)
legend('N=3', 'N=5', 'N=8','N=15','\Psi_2^{H0}')
title("Comparaison entre la fonction d'onde de l'état fondamental numérique et \Psi_2^{H0} théorique")
ylabel("Fonction d'onde de l'état fondamental \Psi_2(x)")
xlabel("Abscisse x")

```

FIGURE 19 – 3. Comparaison entre la fonctions d’onde théoriques $\Psi_2(x)$ et la fonction numérique pour $N=3,5,8,15$

A.2 Résonance paramagnétique électronique dans le rubis

```
% Partie 2 : Résonance paramagnétique électronique dans le rubis

% 2) b. Pour un angle theta = 50°, tracer l'énergie en unité de fréquence des différents états propres en
% fonction du champ B0.

% Paramètres
D = 5.73E9; % Valeur de D
sigma = (1.602E-19)/(9.1E-31); % Valeur de sigma
theta = 50; % Angle en degrés

B = linspace(0, 6000, 1000); % Champ magnétique B en Gauss

energies = zeros(4, length(B)); % Tableau pour stocker les énergies des états propres

for i = 1:length(B)
    [vecs, vals] = eig(hamiltonien_rubis(theta, B(i)));

    energies(:, i) = diag(vals) / (h_bar * 2 * pi); % Conversion en unité de fréquence
end

transitions = zeros(5, length(B)); % tableau pour stocker les transitions

for i = 2:4
    transitions(i-1, :) = energies(i, :) - energies(1, :);
    transitions(i+2, :) = energies(i, :) - energies(2, :);
end

% Tracé des énergies
plot(B, energies(1, :), 'b', 'LineWidth', 1.5);
hold on;
plot(B, energies(2, :), 'r', 'LineWidth', 1.5);
plot(B, energies(3, :), 'g', 'LineWidth', 1.5);
plot(B, energies(4, :), 'm', 'LineWidth', 1.5);
xlabel('Champ magnétique B (G)');
ylabel('Énergie (unité de fréquence)');
title('Énergie des états propres en fonction du champ magnétique B');
legend('État propre 1', 'État propre 2', 'État propre 3', 'État propre 4');
grid on;
```

FIGURE 20 – Pour un angle $\theta=50^\circ$, énergie en unité de fréquence des différents états propres en fonction du champ B_0

```
% 2) b. Expression de chaque état propre dans la base  $|s, m_s\rangle$  pour B(0G)
% et B(6000G)

% Calculer les valeurs propres et les vecteurs propres pour
% différentes valeurs de B
[vecs_0, vals_0] = eig(hamiltonien_rubis(50, 0));
[vecs_6000, vals_6000] = eig(hamiltonien_rubis(50, 6000));
vecs_0
vecs_6000
```

FIGURE 21 – Expression des états propres dans $|s, m_s\rangle$ pour $B_0=0\text{G}$ et $B_0=6000\text{G}$

```

% 2) c. Détermination des transitions

% Calcul des transitions entre états propres en fonction de theta et B_0

% Paramètres
h_bar = 1.0545718E-34;
Freq_D=5.73e9;
e=1.602e-19;
masse=9.109382e-31;
g=2;
f_cav=9.19e9;

% Variation de B et theta
B = linspace(0, 6000, 6001);
theta = linspace(0, 190, 191);

% Listes vides qui contiendront les états de transitions
B_transi = [];
theta_transi = [];

% Calculer les transitions
for i = 1:length(B)
    for j = 1:length(theta)
        [vecs, vals] = eig(hamiltonien_rubis(theta(j), B(i)));
        vals = diag(vals)/(h_bar*2*pi);

        if transition_possible([vals(1), vals(2), vals(3), vals(4)], f_cav / 1000)
            B_transi = [B_transi, B(i)];
            theta_transi = [theta_transi, theta(j)];
        end
    end
end

% Valeurs expérimentales calculées par les élèves en TP
theta_exp = [0, 0, 0, 0, 20, 20, 20, 20, 40, 40, 40, 40, 60, 60, 60, 80, 80, 80];
B_exp = [750, 1050, 3700, 3300, 1050, 2620, 4220, 5750, 460, 1500, 2600, 4400, 550, 2040, 3600, 900, 2140, 4820];

% Tracé et comparaison entre valeurs numériques et expérimentales
plot(theta_transi, B_transi, 'o', Color='r')
hold on
scatter(theta_exp, B_exp, 'bo', 'filled');
title('Les transitions possibles pour (\theta, B_0)')
ylabel('Champ B_0 (en G)')
xlabel('Angle \theta (en degré)')
legend('Transitions calculées', 'Points expérimentaux')

```

FIGURE 22 – Transitions possibles pour $\theta \in [0, 190]^\circ$ et $B_0 \in [0, 6000]\text{G}$

B Les fonctions utilisées dans les codes

B.1 Résolution numérique

```
% FONCTIONS

% Fonction hamiltonien en fonction de N (taille de la matrice H)
function nrj=hamiltonien(N)
nrj = zeros(N);
for n = 1:N
    for m = 1:N
        integrand = @(x) sin(n*pi*x).*sin(m*pi*x).*(x-0.5).^2; % intégrande
        if n == m % Boucle if pour le symbole de Kronecker
            nrj(n, m) = n^2 + (2*(24*pi)^2/4) * integral(integrand, 0, 1);
        else
            nrj(n, m) = (2*(24*pi)^2/4) * integral(integrand, 0, 1);
        end
    end
end
H=nrj;
end
```

FIGURE 23 – Calculer l’Hamiltonien selon la taille de la matrice

```
function psi = fonctionOnde(H, N, N_points, mode, liste_x)
Psi_calc = ones(N_points, N); % Initialisation de la matrice PSI avec des valeurs de 1

for i = 1:N_points
    for j = 1:N
        Psi_calc(i, j) = sqrt(2) * sin(j * pi * liste_x(i));
    end
end

[vecs, ~] = eig(H); % Calcul des vecteurs propres de l'hamiltonien
Cm = vecs(:, mode + 1);

psi = Psi_calc * Cm;
end
```

FIGURE 24 – Calculer les fonctions d’onde $\Psi_i(x)$ où $i=0,1,2$

```

% Fonctions Psi théoriques
function resultat_0=psi0(x)
a=1;
R=24;

resultat_0=(pi*R / (2*a^2))^(1/4) * exp( (-R*pi^2/4) .* (x/a - 1/2).^2);

end

function res1=psi1(x)
a=1;
R=24;
res1 = (pi^5*R^3 / (2*a^2))^(1/4) .* (x - 1/2) .* exp( (-R*pi^2/4) .* (x - 1/2).^2);
end

function res2=psi2(x)
a=1;
R=24;
res2=(pi*R / (8*a^2))^(1/4) .* (pi^2*R .* (x - 1/2).^2 - 1) .* exp( (-R*pi^2/4) .* (x - 1/2).^2);
end

```

FIGURE 25 – Calculer les fonctions d’onde théoriques $\Psi_i(x)$ où $i=0,1,2$

B.2 Résonance paramagnétique électronique dans le rubis

```

function H=hamiltonien_rubis(theta,B_0)
h_bar = 1.0546e-34;
D = 5.73e9;
sigma=(1.602e-19)/(9.109382e-31);

S2 = h_bar^2 * 15/4 * diag([1 1 1 1]);
S_z = h_bar/2 * diag([-3 -1 1 3]);
S_x = h_bar * [0 sqrt(3)/2 0 0 ; sqrt(3)/2 0 1 0 ; 0 1 0 sqrt(3)/2 ; 0 0 sqrt(3)/2 0];

H = -2*pi*D/h_bar * (S_z*S_z - S2/3) + sigma*B_0*(1e-4) * (S_z * cosd(theta) + S_x * sind(theta));
end

```

FIGURE 26 – Fonction de l’Hamiltonien rubis dans $|s, m_s\rangle$

```

function possible = transition_possible(valeurs_propres, epsilon)
f_cav=9.19e9;

f_min = f_cav - epsilon;
f_max = f_cav + epsilon;

diff_energies = [valeurs_propres(4)-valeurs_propres(3),valeurs_propres(4)-valeurs_propres(2),
    valeurs_propres(4)-valeurs_propres(1),valeurs_propres(3)-valeurs_propres(2),
    valeurs_propres(3)-valeurs_propres(1),valeurs_propres(2)-valeurs_propres(1)];

possible = any(diff_energies >= f_min & diff_energies <= f_max);

end

```

FIGURE 27 – Fonction permettant de savoir s’il y a une transition ou pas