

---

## Physique Quantique

*Résolution numérique de problèmes de physique quantique*

---

Néo POTRON

143

Février 2025

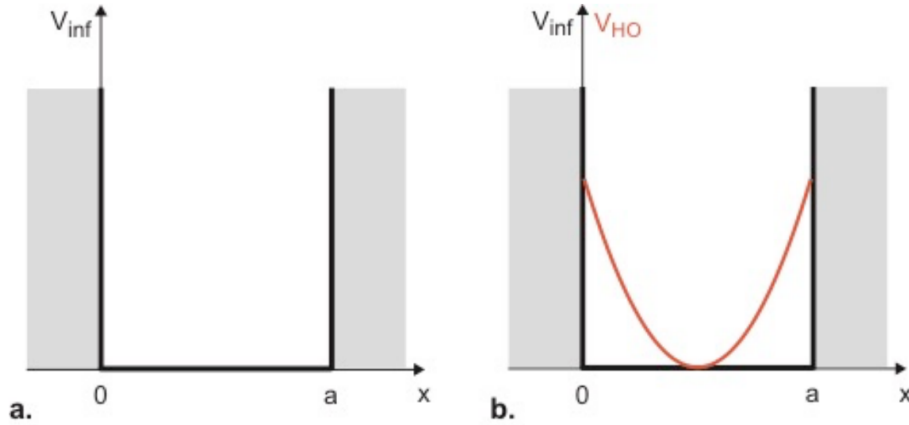
# Table des matières

<b>1</b>	<b>L'oscillateur harmonique dans tous ses états (quantiques)</b>	<b>2</b>
1.1	Etude préliminaire . . . . .	2
1.1.1	Puits de potentiel infini . . . . .	2
1.1.2	Potentiel harmonique dans un puits infini . . . . .	3
1.1.3	Forme normalisée . . . . .	4
1.1.4	Signification physique . . . . .	5
1.2	Résolution numérique . . . . .	5
1.2.1	Matrice $H$ sous forme numérique . . . . .	5
1.2.2	Energies propres . . . . .	7
1.3	Fonctions propres . . . . .	10
1.3.1	Fonctions d'onde de l'état fondamental . . . . .	10
1.3.2	Fonctions d'onde du premier état excité . . . . .	11
1.3.3	Fonctions d'onde du deuxième état excité . . . . .	11
<b>2</b>	<b>Puit de potentiel fini dans les hétérostructures de semi-conducteurs</b>	<b>13</b>
2.1	Puit de potentiel infini de largeur $2b$ . . . . .	13
2.2	Détermination des éléments propres du puits fini . . . . .	14
2.3	Tracé des trois états confinés . . . . .	15
2.4	Résolution graphique . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Annexe : Script Python</b>	<b>17</b>
3.1	Partie 1 . . . . .	17
3.2	Partie 2 . . . . .	26

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

Dans un premier temps, il s'agit d'établir numériquement les solutions de l'oscillateur harmonique quantique. En l'occurrence, le potentiel harmonique (*i.e.* le potentiel suit une loi quadratique en fonction de la position) est localisé dans un puits de potentiel infini. Les fonctions propres du puits serviront de base de l'espace des états et permettront de rechercher les énergies propres de l'oscillateur harmonique.

## 1.1 Etude préliminaire



**Figure 1** – a) Puits de potentiel infini unidimensionnel de largeur  $a$ . b) Potentiel harmonique unidimensionnel  $V_{OH}$  localisé dans un puits infini.

### 1.1.1 Puits de potentiel infini

Considérons une particule de masse  $m$  confinée dans le puits de potentiel infini décrit dans la Figure 1. D'après l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle = \quad (1)$$

L'hamiltonien du système s'écrit en représentation  $\{x\}$  :

$$H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{inf}(x)$$

$$\text{Où : } V_{inf}(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < x < a \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

Soit :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_n}{dx^2} + V_{inf}(x) \varphi_n(x) = E_n^{(0)} \varphi_n(x)$$

Et, à l'intérieur du puits de potentiel  $V_{inf}(x) = 0$  donc après canonisation de l'équation nous obtenons :

$$\frac{d^2 \varphi_n}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_n^{(0)} \varphi_n(x) = 0 \quad (2)$$

Nous avons alors l'équation du second ordre d'un oscillateur harmonique, et les solutions sont de la forme :

$$\varphi_n(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \text{avec} \quad k = \sqrt{\frac{2mE_n^{(0)}}{\hbar^2}} \quad (3)$$

Nous utilisons ensuite les conditions aux limites du puits qui imposent la fonction d'onde  $\varphi_n$  nulle en  $x = 0$  et en  $x = a$ .

$$CL : \begin{cases} \varphi_n(0) = 0 \\ \varphi_n(a) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B = 0 \\ A \sin(ka) = 0 \end{cases} \Rightarrow k = n\pi/a \quad \text{avec} \quad n \in \mathbb{N}$$

Nous utilisons ensuite la condition de normalisation de la fonction d'onde, il y a 100 % de chance de trouver la particule dans le puits :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_n(x)|^2 dx = \int_0^a A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = A^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Et donc, nous obtenons l'expression de  $\varphi_n$  :

$$\boxed{\varphi_n(x) = \langle x | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)} \quad (4)$$

D'après l'équation (3), nous en déduisons que :  $E_n^{(0)} = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}$ , soit :

$$\boxed{E_n^{(0)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = n^2 E_1^{(0)}} \quad (5)$$

Avec :  $E_1^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ , l'énergie de l'état fondamental correspondant à  $n = 1$ .

### 1.1.2 Potentiel harmonique dans un puits infini

Intéressons nous 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. Le potentiel appelé  $V_{OH}$  est fixé. Désormais l'expression de l'hamiltonien en représentation  $\{x\}$  est :

$$H = H_0 + V_{OH} = H_0 + \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x - \frac{a}{2}\right)^2$$

Avec :  $V_{OH}$  le potentiel harmonique centré en  $x = a/2$ ,  $\omega$  étant la pulsation de l'oscillateur harmonique.

Nous cherchons les solutions de l'équation de Schrödinger  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  avec :

$$|\psi\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} c_m |\varphi_m\rangle$$

$|\varphi_m\rangle$  étant la base des états propres du puits infini que nous avons défini à la question précédente. Le produit scalaire de l'équation de Schrödinger avec un bra  $\langle\varphi_n|$  donne :

$$\langle\varphi_n|H|\psi\rangle = \langle\varphi_n|E|\psi\rangle$$

Soit :

$$\sum_{m=1}^{\infty} c_m \langle\varphi_n|H_0 + V_{OH}|\varphi_m\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} \langle\varphi_n|E|\varphi_m\rangle = E \sum_{m=1}^{\infty} \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle$$

Or, la base des états propres est orthonormée, ce qui nous donne  $\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm}$ , avec  $\delta_{nm}$  le symbole de Kronecker. Nous obtenons alors l'équation attendue, pour tout entier  $n > 0$  :

$$\boxed{\sum_{m=1}^{\infty} H_{nm} c_m = E c_n} \quad (6)$$

Avec :  $H_{nm}$  les éléments de la matrice  $\mathbf{H}$  de l'Hamiltonien  $H$  dans la base  $\{|\varphi_m\rangle\}$ , qui s'écrivent :

$$H_{nm} = \langle\varphi_n|H_0 + V_{OH}|\varphi_m\rangle = E_n^{(0)} \delta_{nm} + \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) V_{OH} \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) dx \quad (7)$$

### 1.1.3 Forme normalisée

#### 1.1.3.1 Potentiel harmonique sous forme normalisée sans dimension

Nous cherchons à montrer que le potentiel harmonique peut s'écrire sous forme normalisée sans dimension. Nous définissons alors le potentiel harmonique normalisé suivant, sachant que  $E_1^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$  :

$$v_{OH} = \frac{V_{OH}}{E_1^{(0)}} = \frac{m^2 \omega^2 (xa - \frac{a^2}{2})^2}{\pi^2 \hbar^2}$$

Soit :

$$\boxed{v_{OH} = \frac{\pi^2}{4} \left( \frac{\hbar \omega}{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}} \right)^2 \left( \frac{x}{a} - \frac{1}{2} \right)^2 = \frac{\pi^2}{4} \left( \frac{\hbar \omega}{E_1^{(0)}} \right)^2 \left( \frac{x}{a} - \frac{1}{2} \right)^2} \quad (8)$$

#### 1.1.3.2 Coefficients normalisés de $\mathbf{H}$

Nous définissons les coefficients normalisés de  $\mathbf{H}$  par :

$$h_{nm} = \frac{H_{nm}}{E_1^{(0)}}$$

Ainsi, d'après (5) et (7) :

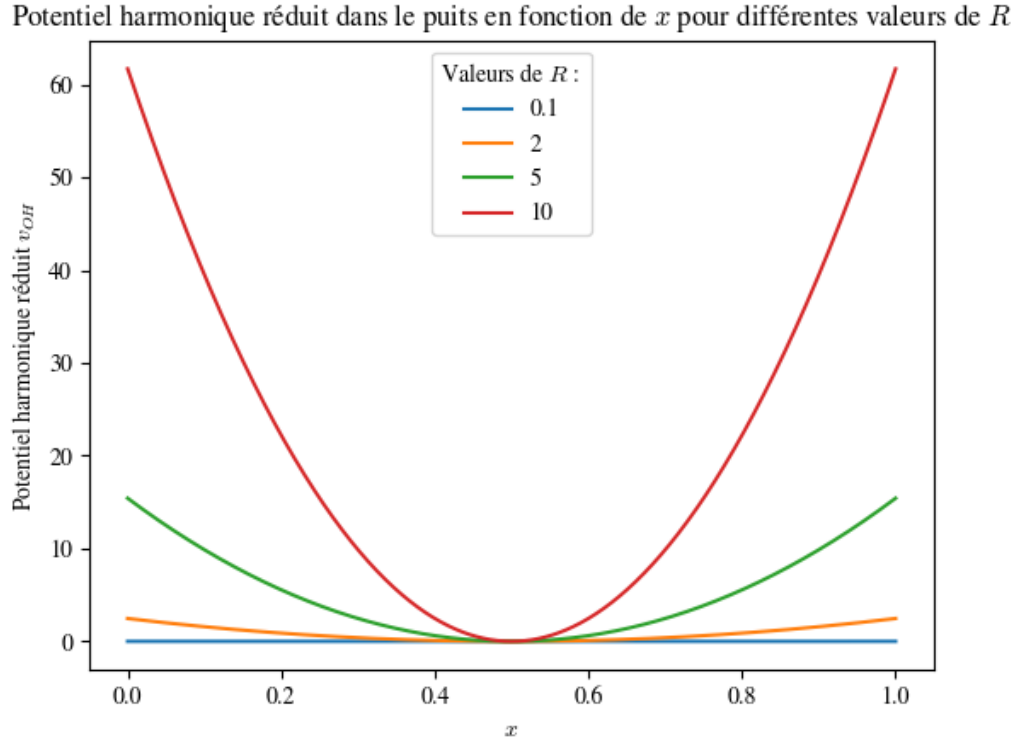
$$h_{nm} = n^2 \delta_{nm} + \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) v_{OH} \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) dx$$

En effectuant le changement de variable  $x' = x/a$ , nous obtenons :

$$\boxed{h_{nm} = n^2 \delta_{nm} + 2 \int_0^1 \sin(n\pi x') v_{OH} \sin(m\pi x') dx'} \quad (9)$$

### 1.1.4 Signification physique

$R$  est une comparaison de l'énergie de la particule et de l'énergie de l'état fondamental dans un puits infini. Il est défini tel que :  $R = \frac{\hbar\omega}{E_1^{(0)}}$ . Ainsi, d'après (8) nous traçons le potentiel harmonique en fonction de différentes valeurs de ce rapport  $R$  :



**Figure 2** – Potentiel harmonique  $v_{OH}$  en fonction de  $x$  dans le puits pour différents  $R$

$R$  correspond au rayon de courbure du potentiel harmonique. Nous remarquons que pour chaque valeur de  $R$ , la parabole est centrée en  $x = a/2$  et que la courbure de la parabole augmente avec l'augmentation de  $R$ . Ainsi, plus  $R$  est grand, plus la particule sera localisée au centre du puits harmonique serré. Plus  $R$  est petit, plus la particule sera répartie dans le puits infini car le puits harmonique est plus large.

## 1.2 Résolution numérique

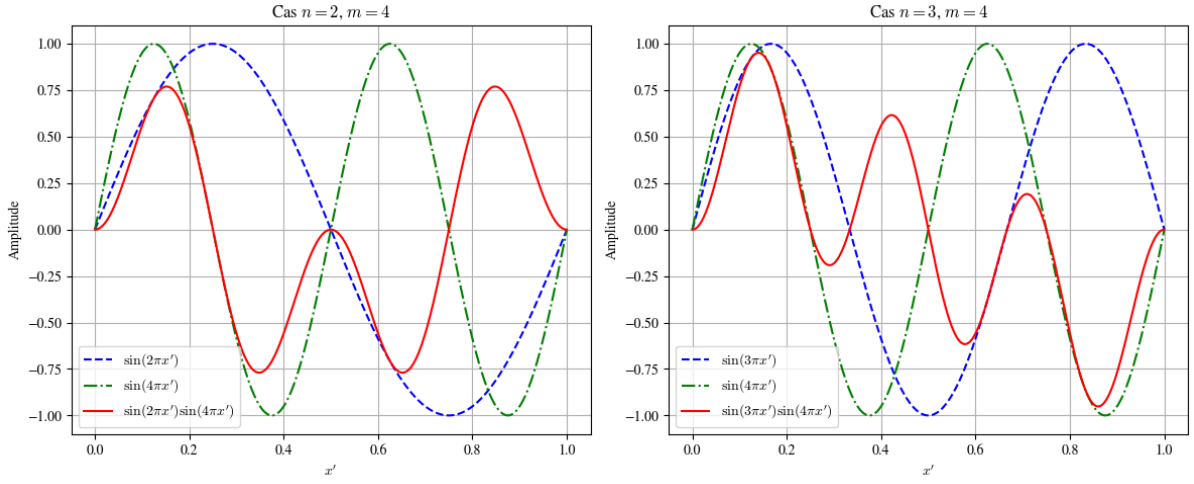
Dans cette partie, nous allons résoudre numériquement le problème précédent à l'aide de Python. Pour cela, nous définissons la taille  $N = 6$  de la matrice  $\mathbf{H}$  et nous posons  $R = 24$ .

### 1.2.1 Matrice $\mathbf{H}$ sous forme numérique

Pour l'intégration, à défaut d'utiliser la méthode des rectangles peu précise, nous utiliserons le module *integrate* de *scipy* qui permet d'intégrer avec précision. D'après (9) nous calculons directement les coefficients de  $\mathbf{H}$ , soit :

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 47.43525281 & 0 & 54 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 104.43525281 & 0 & 64 & 0 & 13.5 \\ 54 & 0 & 119.43525281 & 0 & 67.5 & 0 \\ 0 & 64 & 0 & 129.93525281 & 0 & 69.12 \\ 10 & 0 & 67.5 & 0 & 140.55525281 & 0 \\ 0 & 13.5 & 0 & 69.12 & 0 & 152.43525281 \end{pmatrix}$$

Un terme non-diagonal sur deux dans la matrice est nul, cela est dû au symbole de Kronecker, et au produit des deux sinus dans l'intégrale de l'expression de  $h_{nm}$ .



**Figure 3** – Représentation de la fonction  $\sin(n\pi x')$  pour  $n$  pair et impair, et du produit  $\sin(m\pi x') \sin(n\pi x')$

En effet, d'après l'identité du produit de sinus, nous avons :

$$I = \int_0^1 \sin(n\pi x') v_{OH} \sin(m\pi x') dx' = \frac{1}{2} \int_0^1 (\cos((n+m)\pi x') - \cos((n-m)\pi x')) v_{OH} dx'$$

Et en effectuant le changement de variable  $x'' = x' - \frac{1}{2}$ , nous avons :

$$I = \frac{1}{2} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \left( \cos\left(\frac{\pi}{2}(n+m) + \pi(n+m)x''\right) - \cos\left(\frac{\pi}{2}(n-m) + \pi(n-m)x''\right) \right) v_{OH} dx''$$

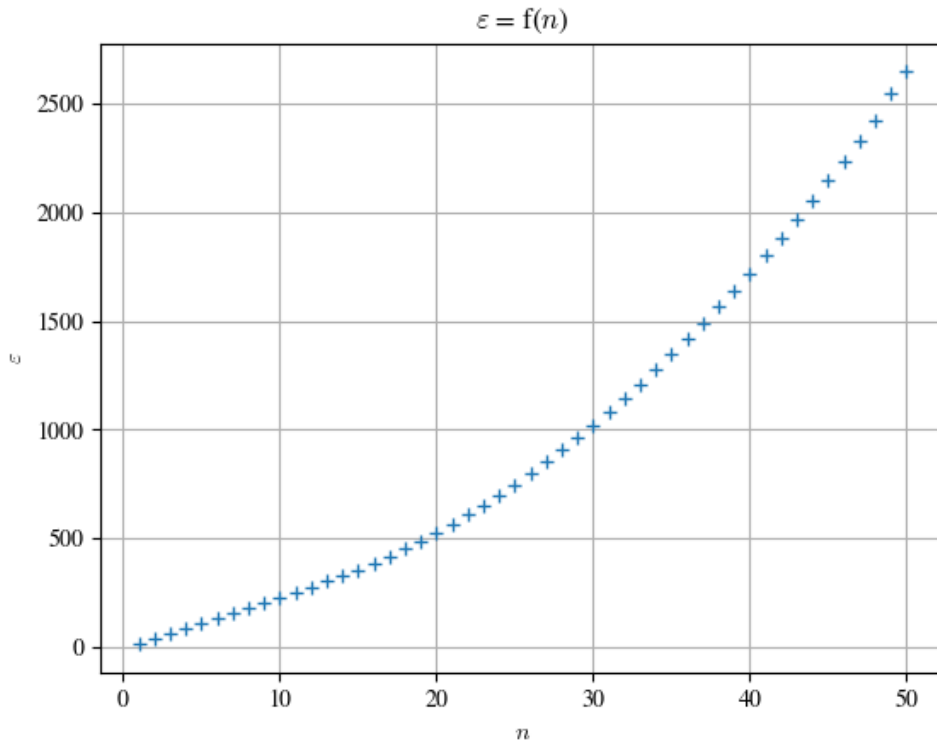
En utilisant la formule  $\cos(a+b) = \cos a \cos b - \sin a \sin b$ , le terme  $\cos(\frac{\pi}{2}(n+m))$  en facteur s'annule quand  $m$  et  $n$  n'ont pas la même parité. Le terme avec les sinus s'annulera aussi si  $m$  et  $n$  n'ont pas la même parité car l'intégrale est centrée sur 0, et une telle intégrale impaire est nulle (sinus étant une fonction impaire). Ainsi, l'intégrale  $I$  sera nulle pour  $n = 2k + 1 + m$  ou  $n = 2k - 1$ , avec  $k \in \mathbb{N}$  (i.e. un terme non-diagonal sur deux). A présent, nous fixons  $N = 50$  et nous nous intéressons aux énergies propres normalisées de la particule, qui s'écrivent :

$$\varepsilon(n) = \frac{E(n)}{E_1^{(0)}}$$

## 1.2.2 Énergies propres

### 1.2.2.1 Valeurs propres

Chaque énergie propre étant non-dégénérée, l'indice  $n$  varie de 1 à  $N$ . Ces énergies propres sont en fait les valeurs propres de la matrice  $\mathbf{H}$  que nous avons normalisée, que nous déterminons et traçons avec Python, nous obtenons le graphe suivant :



**Figure 4** – Tracé des valeurs des énergies propres  $\varepsilon(n)$

### 1.2.2.2 Comparaison des énergies propres

Comme vu en cours, on sait que les énergies propres d'un oscillateur harmonique (non tronqué) s'écrivent :

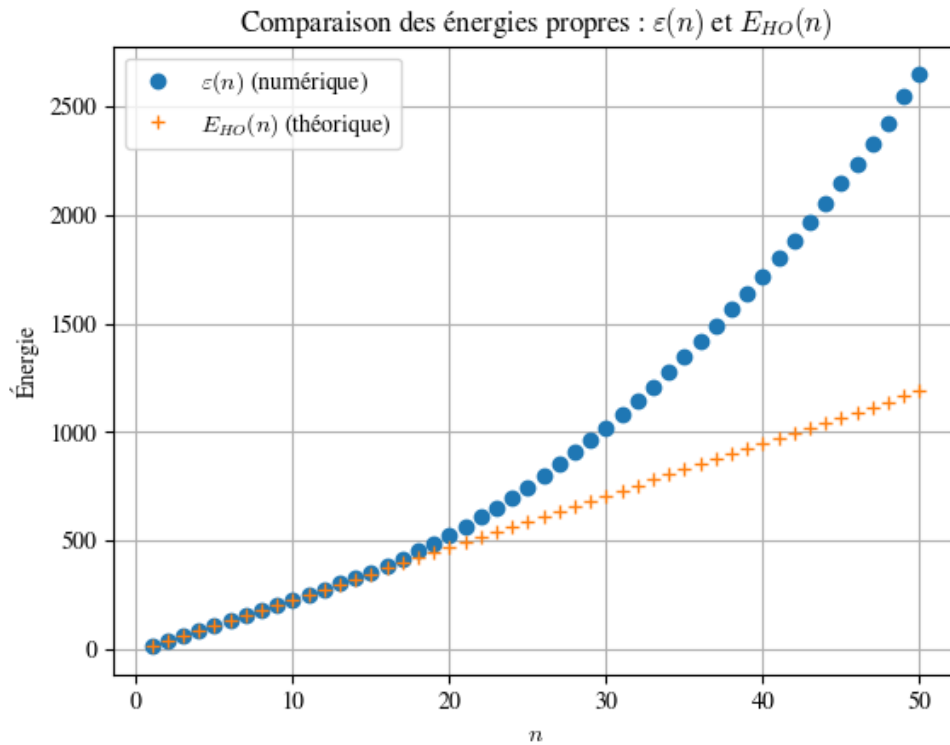
$$E_{HO}(k) = \hbar\omega \left( k + \frac{1}{2} \right) \quad \text{où} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (10)$$

Nous allons déterminer ces valeurs et les tracer, pour pouvoir les comparer aux valeurs de  $\varepsilon(n)$  déterminées précédemment. Pour cela nous allons normaliser les valeurs de  $E_{HO}(k)$  par  $E_1^{(0)}$ , puis effectuer le changement de variable  $n = k + 1$  afin de supprimer le décalage dans les indices. Nous calculons alors :

$$\varepsilon_{HO}(n) = \frac{E_{HO}(n = k + 1)}{E_1^{(0)}} = \frac{\hbar\omega(n - \frac{1}{2})}{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}} = R \left( n - \frac{1}{2} \right)$$

Nous traçons ces énergies propres avec Python et nous les superposons au graphe précédent :



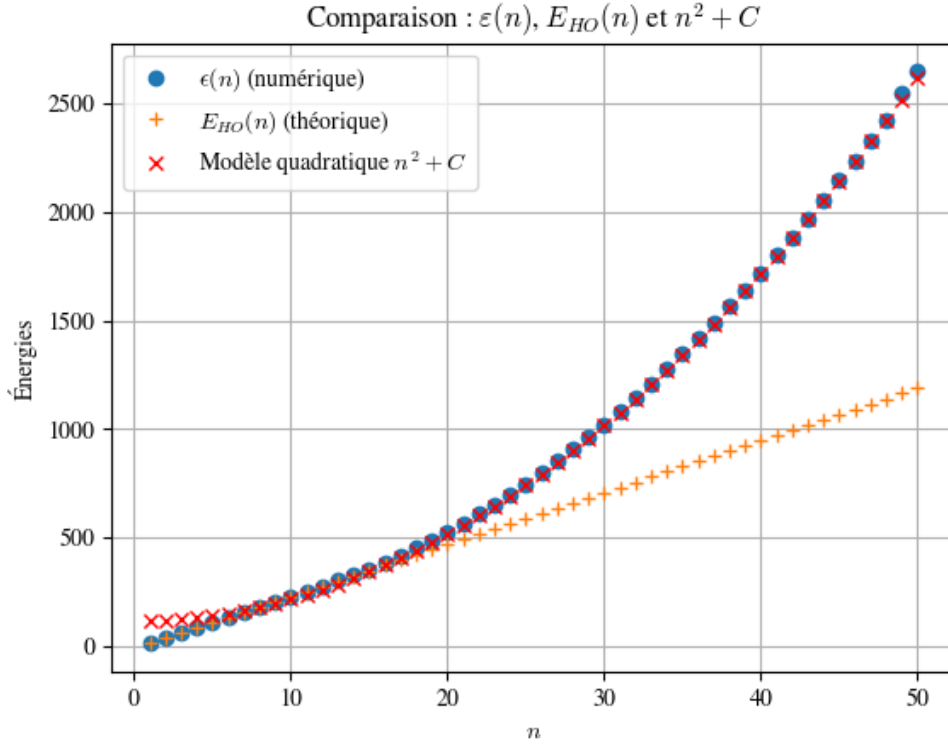


**Figure 5** – Comparaison entre les énergies propres numériques et l'oscillateur harmonique

On remarque bien que les deux courbes semblent superposées pour des  $n$  petits, environ pour des indices  $n < 15$ .

### 1.2.2.3 Comparaison à un modèle quadratique

Les courbes sont confondues pour  $n < 15$ , mais après cette valeur la courbe bleue de  $\varepsilon(n)$  subit un changement d'allure et semble devenir quadratique, ce qui signifierait que les  $\varepsilon(n)$  auraient un comportement du type "puits infini". Pour vérifier cela nous allons alors essayer de modéliser la partie de cette courbe par une fonction  $f$  telle que  $f(n) = n^2 + C$ , avec  $C$  une constante à déterminer. Pour cela, nous effectuons une régression polynomiale avec Python qui nous donne les coefficients de la fonction  $f = an^2 + b$ . Comme prévu nous trouvons  $a = 1$ . Et nous avons une valeur  $b$  (donc  $C$ ) qui vaut  $b = C = 116.09506167665754$ . Nous traçons la courbe de cette régression linéaire que nous superposons aux tracés précédents :



**Figure 6** – Comparaison des énergies propres de  $\mathbf{H}$  obtenus précédemment à une approximation quadratique

On remarque que la courbe de régression linéaire de  $f = n^2 + 116.095$  coïncide parfaitement avec la courbe des  $\varepsilon(n)$  pour les indices  $n > 15$ . En fait pour les  $n < 15$ , le potentiel ne perçoit pas la cavité et a donc le même comportement qu'un oscillateur harmonique. En revanche quand  $n$  devient grand ( $> 15$ ), la cavité devient prédominante et donc le potentiel se comporte comme un puits infini. En reprenant l'équation (9), pour  $n = m$ , nous avons  $h_{nm} = n^2 + 2 \int_0^1 \sin(n\pi x') v_{OH} \sin(m\pi x') dx'$  qui est du type  $f = n^2 + C$ . Ainsi par identification, nous avons :

$$C = 2 \int_0^1 \sin(n\pi x') v_{OH} \sin(m\pi x') dx' \quad (11)$$

#### 1.2.1.4 Transition entre le régime harmonique et le puits de potentiel

Nous cherchons à déterminer pourquoi la transition entre le comportement "oscillateur harmonique" et le comportement "puits de potentiel infini" se fait à partir cet indice précis à  $n = 15$ . Cela est dû au fait que l'indice  $n$  dépend de la valeur de  $R$ . Lorsque  $R$  est petit, l'énergie du potentiel harmonique est relativement faible par rapport à l'énergie fondamentale du puits. En conséquence, le régime harmonique prédomine pour de faibles valeurs de  $n$ . À l'inverse, lorsque  $R$  est grand, l'énergie du potentiel harmonique est significativement plus élevée par rapport à l'énergie fondamentale du puits, prolongeant ainsi la prédominance du régime harmonique vers des valeurs de  $n$  plus élevées.

### 1.3 Fonctions propres

Pour simplifier les calculs nous allons maintenant fixer  $a = 1$ . Nous nous intéressons aux fonctions propres de la particule :

$$\psi_n(x) = \langle x | \psi_n \rangle \quad (12)$$

#### 1.3.1 Fonctions d'onde de l'état fondamental

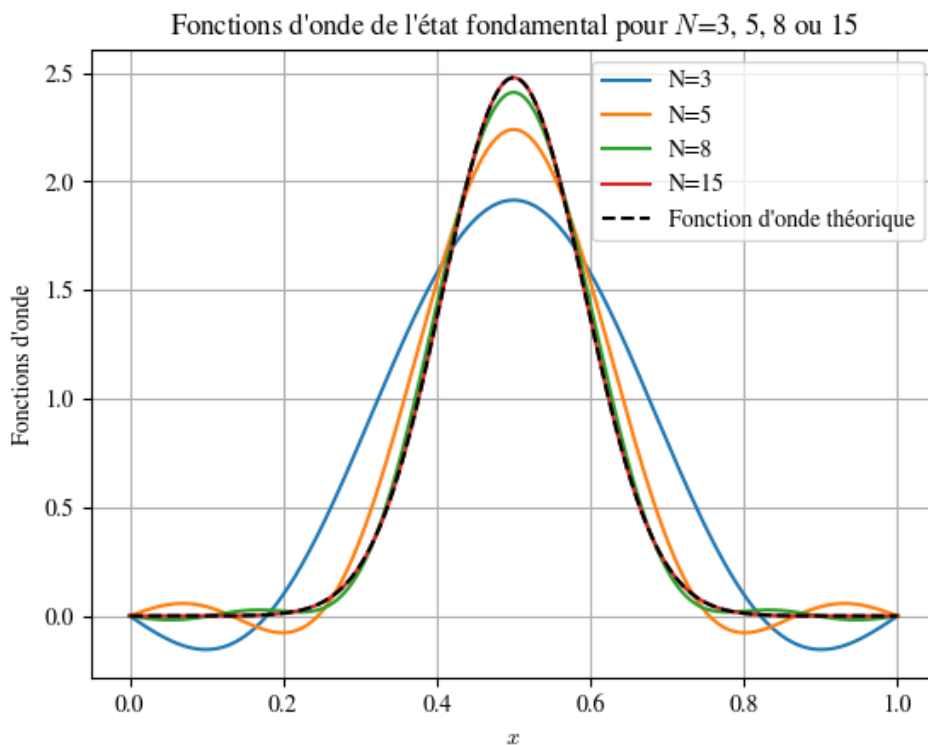
Nous allons déterminer numériquement puis tracer pour plusieurs valeurs de  $N$  ( $N = 3, 5, 8$  et  $15$ ) la fonction  $\psi_0(x)$  à l'état fondamental pour  $x$  compris entre 0 et  $a$ . Pour déterminer  $\psi_0(x)$  nous utilisons le fait que :

$$|\psi_n(x)\rangle = \sum_{m=1}^n c_m |\phi_m\rangle$$

Avec :  $|\phi_m\rangle$  les états propres du puits infini définis précédemment et  $c_m$  les composants du vecteur propre  $n$  de la matrice des vecteurs propres  $\mathbf{H}$ . La première colonne de  $\mathbf{H}$  correspond à l'état fondamental. Nous comparons les graphes de  $\psi_0(x)$  avec la fonction d'onde théorique vue en cours :

$$\Psi_0^{HO}(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x - \frac{a}{2}\right)^2\right) = \left(\frac{\pi R}{2a^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{\pi^2}{4}R\left(\frac{x}{a} - \frac{1}{2}\right)^2\right) \quad (13)$$

Nous obtenons les graphes suivants :



**Figure 7** – Fonctions d'onde  $\Psi_0(x)$  pour différentes valeurs de  $N$  dans le puits de taille  $a = 1$

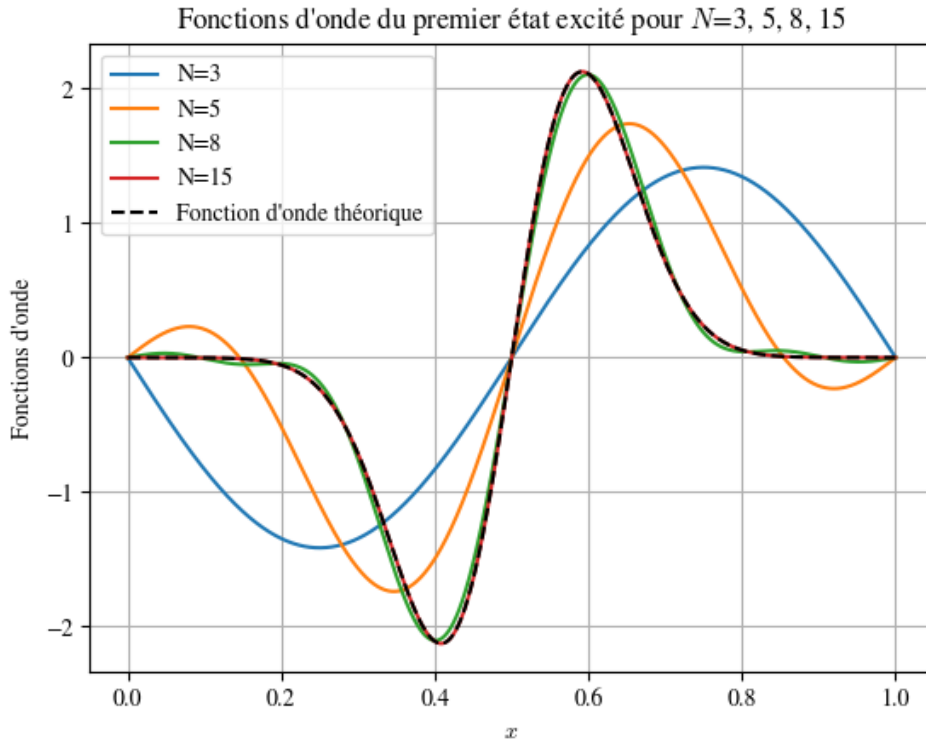
Pour les valeurs de  $N$  à 3, 5 et 8, on obtenait une fonction de signe inversé, donc on a rajouté un signe  $-$  dans le programme pour pouvoir comparer ces fonctions avec les autres. Nous pouvons le faire aisément car un vecteur propre est toujours défini à une phase globale près. Nous remarquons que les courbes de la fonction théorique  $\Psi_0^{HO}(x)$  et celle que nous avons déterminée avec  $N = 15$  sont parfaitement superposées.

### 1.3.2 Fonctions d'onde du premier état excité

Nous allons à nouveau tracer les fonctions d'onde mais cette fois nous nous intéressons au premier état excité. Nous cherchons maintenant à déterminer la fonction  $\psi_1(x)$ , et nous nous intéressons à la deuxième colonne de  $\mathbf{H}$ . La fonction d'onde théorique de  $\Psi_1^{HO}(x)$  est :

$$\Psi_1^{HO}(x) = \left( \frac{\pi^5 R^3}{2a^2} \right)^{\frac{1}{4}} \left( \frac{x}{a} - \frac{1}{2} \right) \exp \left( -\frac{\pi^2 R}{4} \left( \frac{x}{a} - \frac{1}{2} \right)^2 \right) \quad (14)$$

Nous traçons à nouveau les fonctions  $\psi_1(x)$  pour  $N = 3, 5, 8$  et  $15$ , pour  $x$  compris entre 0 et  $a$ . On trace aussi la courbe de  $\psi_1(x)$  théorique et nous obtenons :



**Figure 8** – Fonctions d'onde  $\Psi_1(x)$  pour différentes valeurs de  $N$  dans le puits de taille  $a = 1$

Ici, nous remarquons que la courbe de la fonction théorique  $\Psi_1^{HO}(x)$  est superposée à la fonction  $\Psi_1(x)$  que nous avons déterminé avec  $N = 15$ .

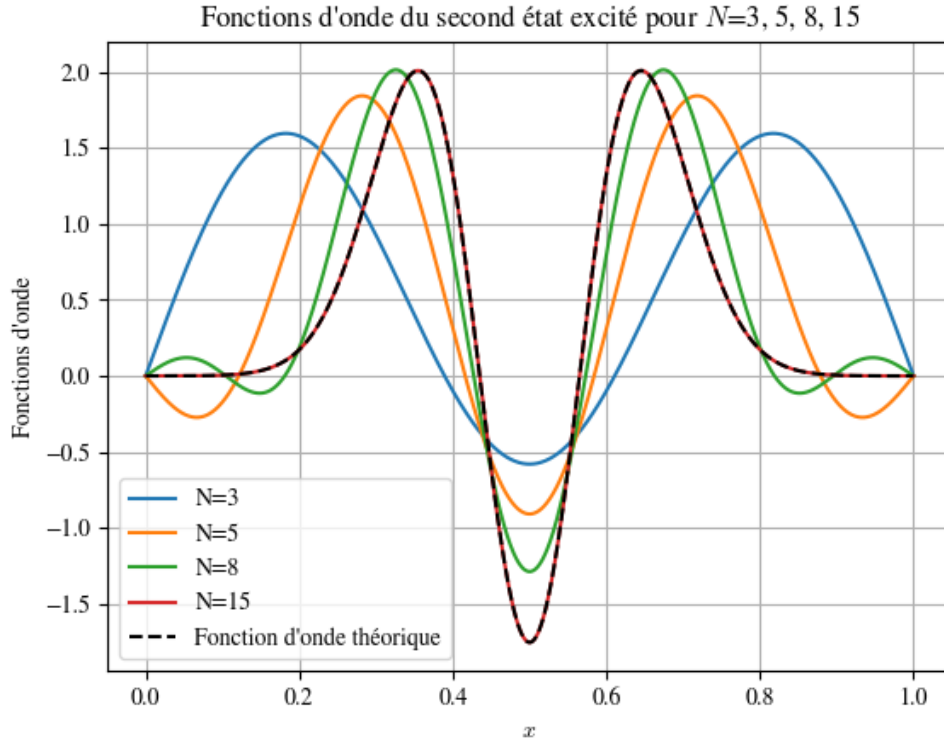
### 1.3.3 Fonctions d'onde du deuxième état excité

Nous réitérons le même processus mais en s'intéressant au deuxième état excité et donc en utilisant la troisième colonne de  $\mathbf{H}$ . On trace les fonctions  $\psi_2(x)$  pour  $N = 3, 5, 8$  et

15, pour  $x$  compris entre 0 et  $a$ , en ajoutant la fonction d'onde théorique  $\Psi_2^{HO}(x)$ , dont l'expression est :

$$\Psi_2^{HO}(x) = \left(\frac{\pi R}{8a^2}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\pi^2 R \left(\frac{x}{a} - \frac{1}{2}\right)^2 - 1\right) \exp\left(-\frac{\pi^2 R}{4} \left(\frac{x}{a} - \frac{1}{2}\right)^2\right) \quad (15)$$

Nous obtenons les graphes suivants :



**Figure 9** – Fonctions d'onde  $\Psi_2(x)$  pour différentes valeurs de  $N$  dans le puits de taille  $a = 1$

Cette fois on remarque que la courbes de la fonction théorique  $\Psi_2^{HO}(x)$  est superposée à la fonction  $\Psi_2(x)$  qu'on a déterminée avec  $N = 15$ .