Oscillateur harmonique à une dimension

Clement Lotteau

May 2020

1 Introduction

On cherche à trouver une solution analytique de l'équation de Schrödinger pour un oscillateur harmonique à une dimension [1]. On rappelle quelques notions. Equation de Schrödinger indépendante du temps :

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle \tag{1}$$

où H est l'opérateur hamiltonien, et E l'énergie de l'état quantique $|\phi\rangle$. En représentation $|x\rangle$:

$$\big[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\big]\phi(x) = E\phi(x) \tag{2}$$

On peut montrer que les valeurs de l'énergie sont discrètes et s'écrivent : $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ où n est un entier positif ou nul. On introduit aussi les opérateurs d'échelle :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \quad et \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) \qquad avec \quad \begin{cases} \hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X \\ \hat{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}P \end{cases} \tag{3}$$

a et $a^\dagger$ sont respectivement les opérateurs d'annihilation et de création. Ils permettent de retirer et d'ajouter la quantité $\hbar\omega$ à l'énergie E_n. L'état fondamental du système a une énergie $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. L'action de $a^\dagger$ sur l'état quantique fondamental $|\phi_0\rangle$ a pour effet de passer de l'énergie E_0 à l'énergie $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$. L'énergie ne pouvant par être inférieure à celle de l'état fondamental, l'action de a sur $|\phi_0\rangle$ est nulle : $a|\phi_0\rangle = 0$. Cette conséquence nous permet de déduire la fonction d'onde de l'état fondamental :

$$a|\phi_0\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}}P\big)|\phi_0\rangle = 0 \tag{4}$$

Ainsi :

$$\big(\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{d}{dx}\big)\phi_0(x) = 0 \tag{5}$$

1. [1]

Cette équation a pour solution : $\phi_0(x) = c^{te} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$ où c^{te} est une constante de normalisation. L'action de $a^\dagger$ sur cette fonction d'onde nous permet d'obtenir celles des états d'énergie supérieure. En répétant l'opération n fois, on obtient la fonction d'onde de l'état d'énergie E_n :

$$\phi_n(x) = \Big[\frac{1}{2^n n!}\Big(\frac{\hbar}{m\omega}\Big)^n\Big]^{1/2}\Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{1/4}\Big[\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{d}{dx}\Big]^n e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}} \tag{6}$$

Ce sont des polynômes d'Hermite. Les fonctions d'onde ϕ_0, ϕ_1, ϕ_2 et ϕ_3 sont :

$$\begin{aligned}
\phi_0(x) &= \Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}} \\
\phi_1(x) &= \Big[\frac{4}{\pi}\Big(\frac{m\omega}{\hbar}\Big)^3\Big]^{\frac{1}{4}} x e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}} \\
\phi_2(x) &= \Big(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\Big)^{\frac{1}{4}}\Big[2\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - 1\Big] e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}} \\
\phi_3(x) &= \frac{1}{\sqrt{3}}\Big[\frac{1}{\pi}\Big(\frac{m\omega}{\hbar}\Big)^3\Big]^{\frac{1}{4}}\Big[2\frac{m\omega}{\hbar}x^3 - 3x\Big] e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}}
\end{aligned} \tag{7}$$

2 Calcul numérique des fonctions d'onde

Dans cette section, on s'intéresse au tracer de ces quatre fonctions d'onde ainsi que de leur module carré. Le programme utilisé pour gérer les données est codé en C++. m, ω et $\hbar$ ont tous été choisis égaux à 1 et le calcul est effectué entre $x = -5$ et $x = +5$ avec un pas de 0,02. Le code calcule dans un premier temps ϕ_0 puis écrit la position, l'amplitude de la fonction d'onde et de son module carré dans un fichier. Il recommence ensuite l'opération avec ϕ_1, ϕ_2 et ϕ_3 pour un total de quatre fichiers. Les données générées sont ensuite traitées dans un programme écrit en Python constistant à tracer les fonctions d'onde et leur modules carré grâce à l'outil Matplotlib.

2.1 Tracer des fonctions d'onde et de leurs modules carrés

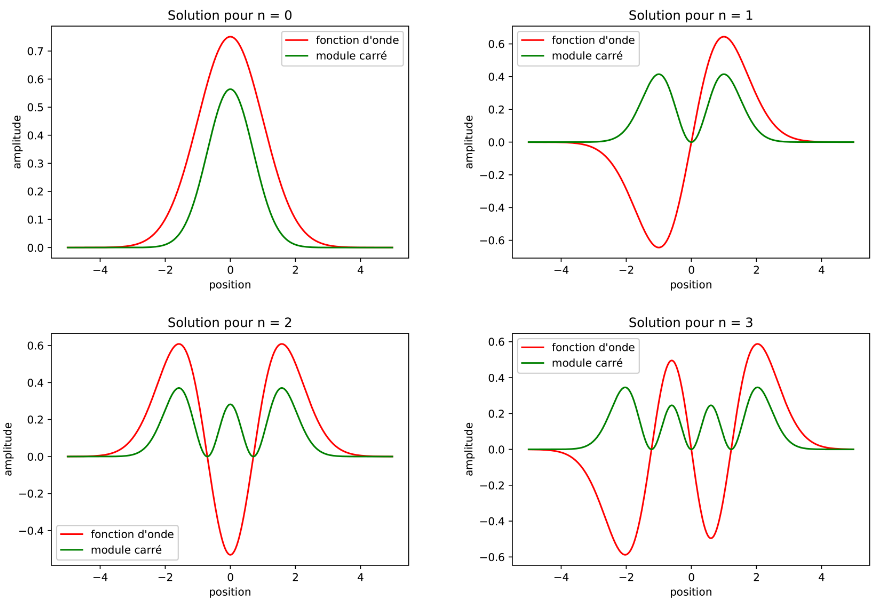

FIGURE 1 – Fonction d'onde (rouge) et module carré (vert). On observe que la partié de la fonction d'onde correspond à la parité de n.

Ici ajouter que ϕ_n a n 0 (p.551). Faire le lien entre valeurs notables de ϕ_n et énergie (p.520) $\rightarrow E_p = E_c$ croissent avec n (p.523)

2.2 Méthode Runge-Kutta d'ordre 4

La méthode RK4 utilisée dans ce projet est une adaptation de la méthode que j'ai créé pour un projet de modélisation numérique en M1.

Projet de modélisation numérique M1 :

Ce projet avait pour but de créer un programme permettant de calculer, pour une barrière d'énergie positive, les coefficients de transmission et de réfléxion d'une particule d'une énergie donnée à travers une barrière de potentiel d'une énergie donnée.

Je détaille ici le programme, puis je détaillerai plus loin la méthode RK4 :

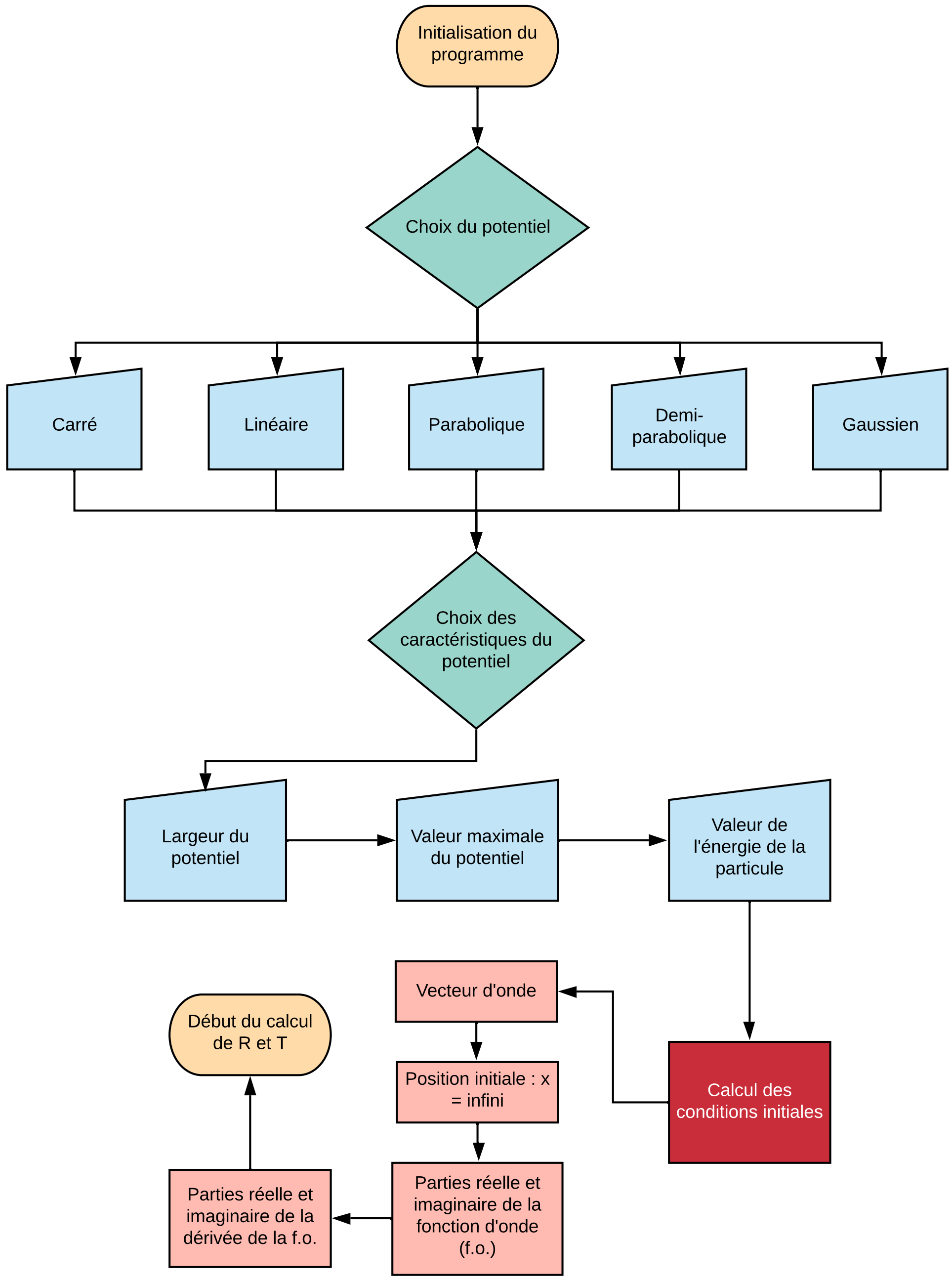

Figure 2 – Logigramme de l'initialisation du programme

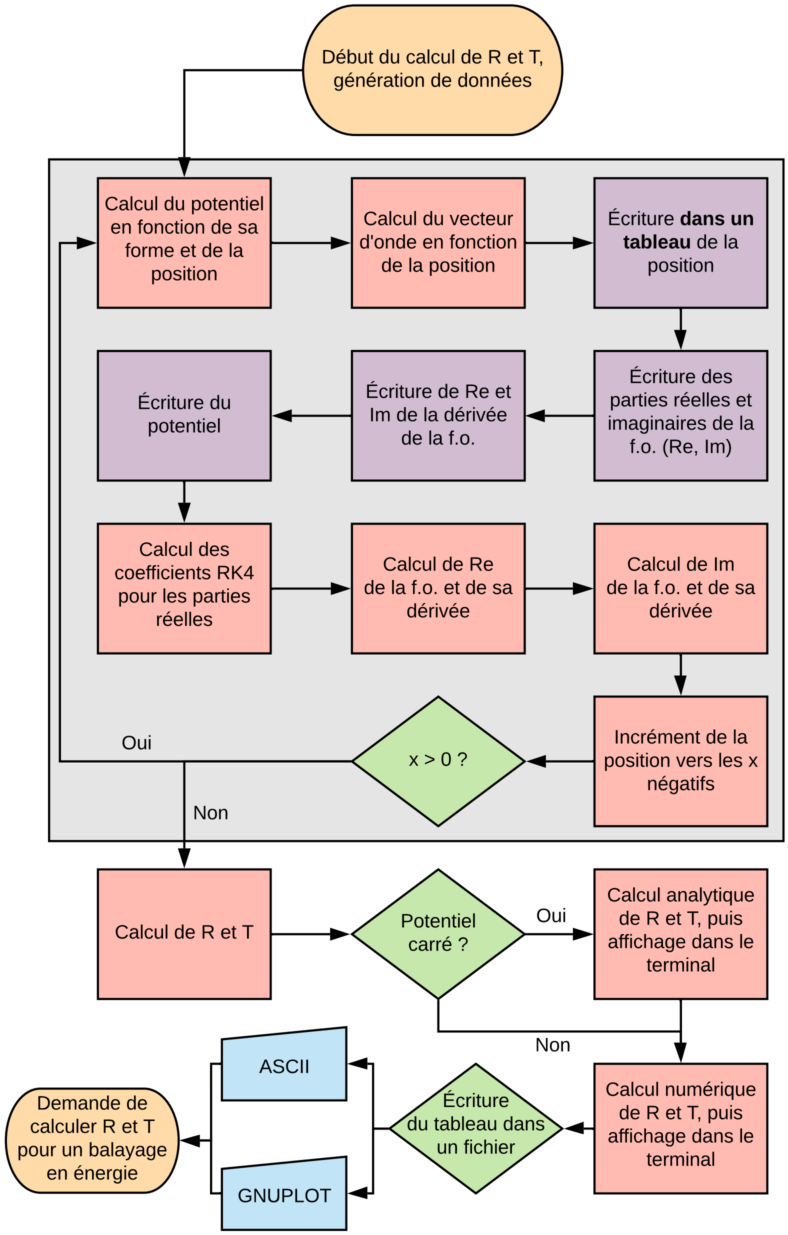

FIGURE 3 – Logigramme du calcul de R et T par le programme

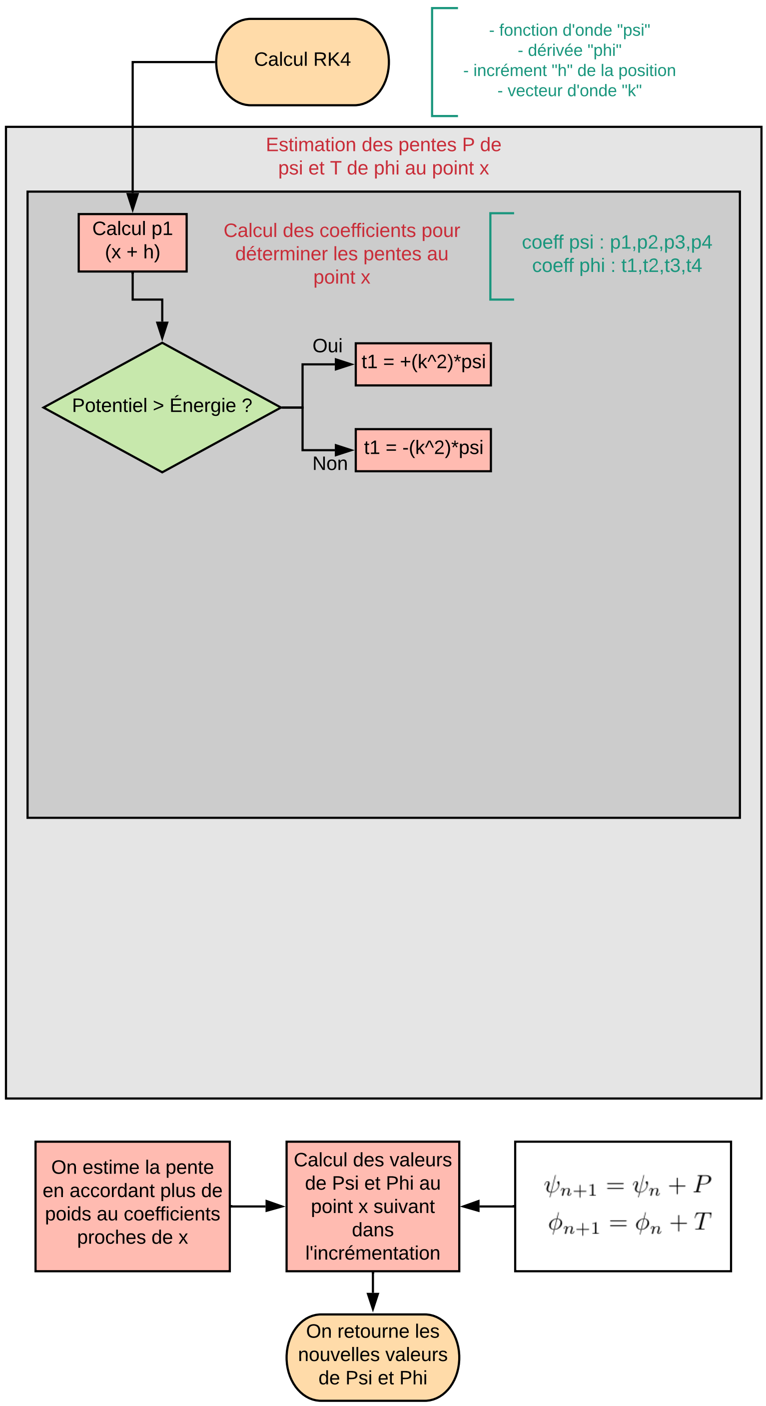

FIGURE 4 – Logigramme de la méthode RK4 utilisée pour calculer la fonction d'onde. PAS TERMINÉ

Références

[1] Franck Laloë CLAUDE COHEN-TANNOUDJI Bernard Diu. *Mécanique quantique Tome 1*. EDP Sciences, 2018, p. 371-378. ISBN : 9782759822874.