

États de diffusion pour l'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension

Alexis Morvan

1 Problème physique et mise en équation

Soit $V(x)$ un potentiel à une dimension et à support compact (i.e. s'annule lorsque $\|x\| \rightarrow \infty$). L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + (V(x) - E)\Psi(x) = 0$$

où E est l'énergie de la particule, considérée ici comme une donnée du problème. Les unités utilisées sont : l'électron-Volt pour les énergies, l'Angström pour les longueurs et la masse de l'électron comme échelle de poids.

Il est possible de définir la constante $c = \frac{\hbar^2}{2m}$ et la fonction $f(x) = \frac{1}{c}(E - V(x))$. Ainsi, l'équation s'écrit :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + f(x) \right] \Psi(x) = 0$$

Les programmes utilisés ont été écrits dans l'optique de cette équation de Schrödinger, mais à la modification de $f(x)$ près, ces méthodes peuvent s'appliquer à n'importe quel système physique ayant une équation du même type. Par exemple, l'équation radiale de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène est une équation de la même forme et pour laquelle le programme peut s'adapter très facilement. Le programme joue d'ailleurs sur cette propriété afin de proposer différents potentiels possibles (créneau, triangle, trapèze, cloche ...).

2 Résolution numérique

2.1 Discrétisation et algorithme « d'Euler »

Pour résoudre numériquement l'équation de Schrödinger, il semble pertinent d'appliquer la méthode de discrétisation de l'espace et des opérateurs. Sous les hypothèses que $\Psi(x)$ est au moins de classe C^2 , un développement de Taylor nous permet d'écrire les deux égalités suivantes :

$$\Psi(x+h) - \Psi(x) = h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^3)$$

$$\Psi(x-h) - \Psi(x) = -h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^3)$$

Le somme de ces deux égalités :

$$\frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} = \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^2)$$

Apparaît alors équivalent discret de l'opérateur Laplacien (à une dimension, mais le cas à trois dimensions s'en déduit aisément). La précision de cette expression est en $O(h^2)$.

En discrétisant l'espace d'un pas " h " et en injectant le résultat précédent dans l'équation de Schrödinger, il vient :

$$\frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} + f(x)\Psi(x) + O(h^2) = 0$$

$$\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x) + h^2 f(x)\Psi(x) + O(h^4) = 0$$

Cette équation peut être réécrite de façon à faire apparaître une relation de récurrence entre les valeurs de Ψ aux noeuds du maillage. Le pas de la discrétisation est fixé à h et l'origine est définie par le point O . La fonction d'onde discrète s'écrit alors $\Psi_n = \Psi(nh)$ avec n un entier. De même, $f_n = f(nh)$. En ces termes, l'équation s'écrit :

$$\Psi_{n+1} = [1 - h^2 f_n] \Psi_n - \Psi_{n-1} + O(h^4)$$

Le potentiel V étant à support compact il existe M tel que V soit nul pour $x < 0$ et $x > M$ (quitte à redéfinir le point O). Les solutions sur ces parties où le potentiel est nul sont connues : ce sont des ondes planes de la forme : pour $k = \sqrt{cE}$

$$\Psi(x < 0) = e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\Psi(x > M) = C e^{ikx}$$

à un terme complexe A près qui n'est pas intéressant ici (ainsi B est directement le coefficient de réflexion en amplitude et C celui de transmission en amplitude).

Lors de la résolution numérique, l'algorithme débute à $x = -2h$. La connaissance des deux premières valeurs de Ψ_n (il s'agit de l'onde plane écrite précédemment) permet d'initier la récurrence qui donne accès à tous les Ψ_n . Une fois que l'algorithme arrive à $x = M$, il renvoie la valeur de C (le coefficient de transmission en amplitude) et refait les calculs dans le sens inverse (par symétrie la formule est la même) une fois revenue à $x = 0$, il renvoie une nouvelle valeur de B .

Pour la bonne valeur de B , la distance entre le complexe d'entrée et celui de sortie est nulle. Il est donc nécessaire de faire appel à un autre algorithme qui va chercher le minimum de la fonction qui prend B comme argument et qui renvoie la distance (au carré) entre le complexe B d'entrée et celui de sortie.

2.2 Recherche de minimum

Il s'agit de minimiser une fonction de deux variables (partie imaginaire et partie réelle). L'algorithme de descente du gradient permet de réaliser une telle minimisation.

Le principe de cet algorithme est le suivant : à partir d'un point quelconque de l'espace, l'algorithme regarde le gradient de cette fonction en ce point. Le vecteur gradient donne alors la direction de plus forte pente de la fonction. Il convient alors d'aller dans la direction opposée au gradient. Le processus est itéré plusieurs fois de suite jusqu'à ce que la norme du gradient devient plus petite que la précision voulue.

2.3 Optimisation : algorithme de Numerov

Une amélioration peut être apportée à l'algorithme de discrétisation de l'opérateur Laplacien : Il s'agit de la méthode de Numerov implémentée et utilisée dans le programme.

L'équation différentielle considérée reste la même : $\left[\frac{d^2}{dx^2} + f(x) \right] \Psi(x) = 0$ où $f(x) = \frac{1}{c}(E - V(x))$.

Les développements de Taylor fait en 2.1 peuvent être poussés plus loin :

$$\begin{aligned} \Psi(x+h) - \Psi(x) &= h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + \frac{h^3}{3!} \frac{d^3\Psi}{dx^3}(x) + \frac{h^4}{4!} \frac{d^4\Psi}{dx^4}(x) + O(h^5) \\ \Psi(x-h) - \Psi(x) &= -h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) - \frac{h^3}{3!} \frac{d^3\Psi}{dx^3}(x) + \frac{h^4}{4!} \frac{d^4\Psi}{dx^4}(x) + O(h^5) \end{aligned}$$

La somme donne :

$$\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x) = h^2 \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + \frac{h^4}{12} \frac{d^4\Psi}{dx^4}(x) + O(h^6)$$

La forme de l'équation permet de ré-écrire les deux termes de gauche : (avec les mêmes notations qu'en 2.1) :

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) &= -f(x)\Psi(x) = -f_n\Psi_n \\ \frac{d^4\Psi}{dx^4}(x) &= -\frac{d^2}{dx^2} \left[f(x)\Psi(x) \right] = -\frac{f_{n+1}\Psi_{n+1} - 2f_n\Psi_n + f_{n-1}\Psi_{n-1}}{h^2} + O(h^2) \end{aligned}$$

Finalement :

$$\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1} - 2\Psi_n = -h^2 f_n \Psi_n - \frac{h^4}{12} \frac{f_{n+1} \Psi_{n+1} - 2f_n \Psi_n + f_{n-1} \Psi_{n-1}}{h^2} + O(h^6)$$

Ce qui nous donne la formule de récurrence suivante :

$$\Psi_{n+1} = \frac{\left(2 - \frac{5h^2}{6} f_n\right) \Psi_n - \left(1 + \frac{h^2}{12} f_{n-1}\right) \Psi_{n-1}}{1 + \frac{h^2}{12} f_{n+1}} + O(h^6)$$

Le résultat est encore une relation de récurrence d'ordre deux, mais avec une précision en $O(h^6)$ ce qui est une nette amélioration par rapport à l'algorithme précédent. C'est cet algorithme qui est utilisé pour les courbes et les résultats des sections suivantes.

3 Résultats numérique : Créneau simple

3.1 Traversée du potentiel

Le programme permet de tracer le profil du carré de l'amplitude de la fonction d'onde à la traversée de la barrière. Deux cas se distinguent : celui où $E \leq V_0$ et celui où $E \geq V_0$. Dans les deux cas, les solutions analytiques sont connues :

Dans le cas où $E \leq V_0$, il y a décroissance exponentielle de l'amplitude dans le potentiel.

Dans le cas où $E \geq V_0$, la fonction d'onde se propage sans atténuation mais avec un vecteur d'onde k différent.

De plus, l'expression analytique du coefficient de réflexion est connue. Le programme propose donc de comparer les coefficients analytiques avec les coefficients numériques obtenus. (Les courbes analytiques et numériques sont si rapprochées qu'il est presque impossible de les distinguer).

3.1.1 Cas où $E \leq V_0$

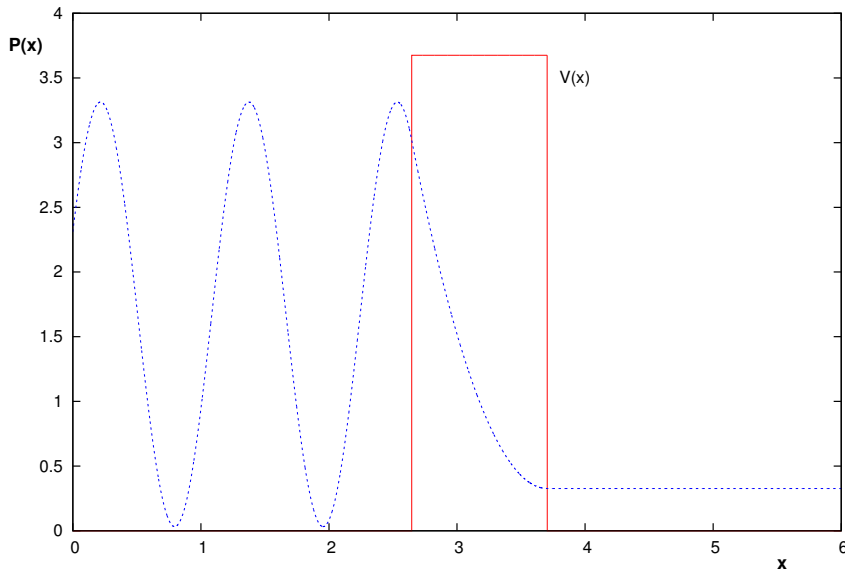


FIGURE 1 – évolution de $|\Psi(x)|^2$ à la traversée du potentiel pour $E \leq V_0$

Lors du passage dans le potentiel, la probabilité décroît exponentiellement. (Ce sont là des résultats connus analytiquement). Il est intéressant de remarquer que la probabilité après la barrière de potentiel est non nulle, ce qui serait impossible en mécanique classique. Il s'agit de l'effet tunnel.

Il faut remarquer que l'état ne peut être normalisé car il s'agit d'ondes stationnaires.

3.1.2 Cas où $E \geq V_0$

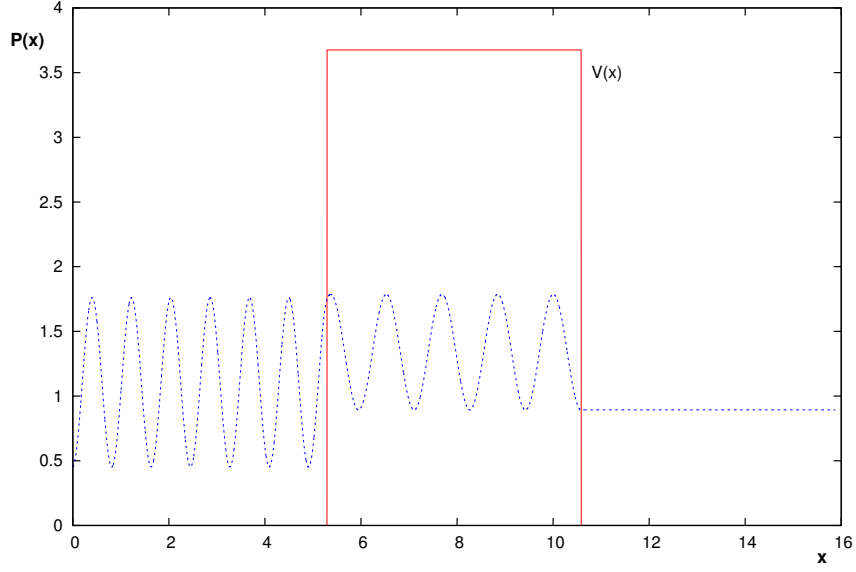


FIGURE 2 – évolution de $|\Psi(x)|^2$ à la traversée du potentiel pour $E \geq V_0$

Les oscillations avant le potentiel sont dues à l'onde réfléchi. Après le potentiel, il n'y a qu'une onde qui se propage dans une seule direction d'où une absence d'oscillations. Comme $E \geq V_0$, l'onde a une structure d'onde plane dans le potentiel.

Le vecteur d'onde dans le potentiel est différent, d'où des oscillations différentes entre la zone avant la barrière et la zone dans la barrière.

3.2 Variation de R en fonction de l'énergie

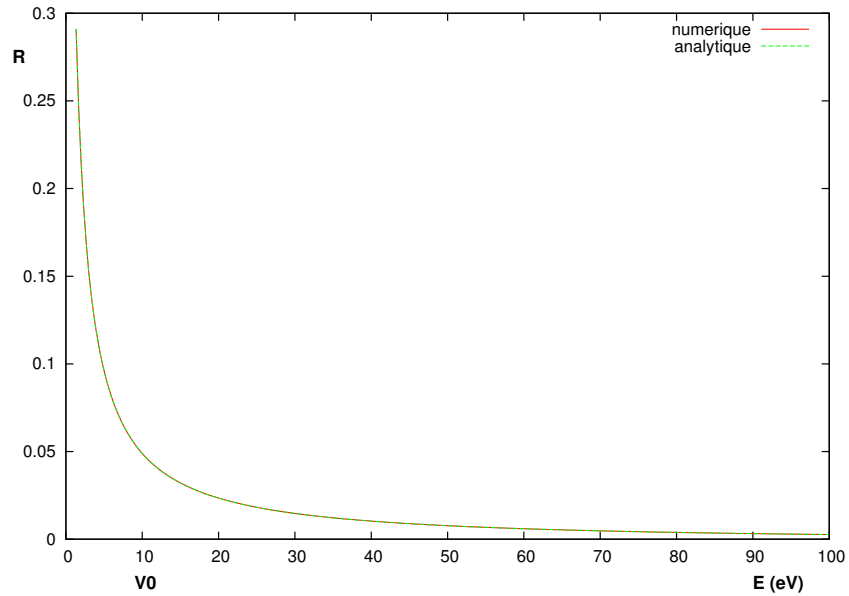


FIGURE 3 – variation de R en fonction de l'énergie pour $V_0 = 10 \text{ eV}$ et $a = 1 \text{ \AA}$

Plus la particule est énergétique, plus le coefficient de réflexion est faible. En effet, plus la particule est énergétique, moins la barrière va “retenir” celle-ci. Il est notable pour $E < V_0$ le coefficient de réflexion n’est pas égal à 1. Il y a transmission : la particule peut passer de l’autre côté de la barrière. Ceci constation met en évidence l’effet tunnel.

Si la largeur de la barrière augmente, un autre phénomène apparait :

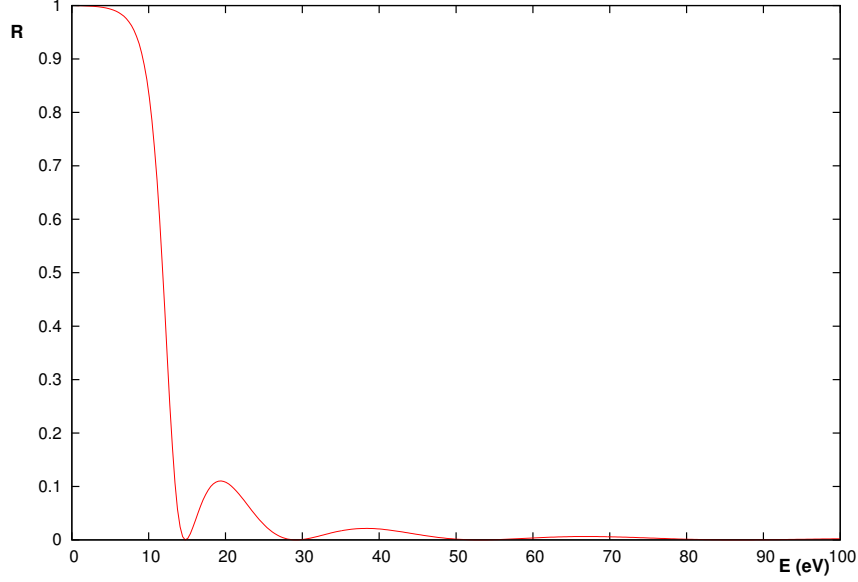


FIGURE 4 – variation de R en fonction de l’énergie pour $V_0 = 10 \text{ eV}$ et $a = 10 \text{ \AA}$

Des petites bosses apparaissent dans la décroissance de R . Ces bosses correspondent à des résonance lorsque la longueur d’onde de l’onde incidente correspond aux modes propres de la barrière.

3.3 Variation en fonction de la masse

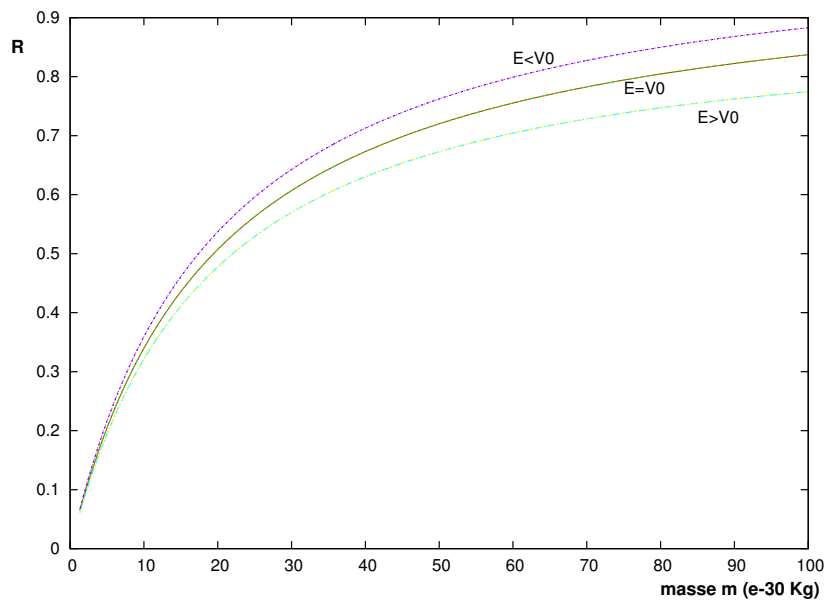


FIGURE 5 – variation de R en fonction de la masse

Plus la masse augmente, plus le coefficient de réflexion est fort. Ceci explique en partie pourquoi des objets macroscopiques ne sont pas sujets à l'effet tunnel.

3.4 Variation de R en fonction de la largeur du créneau

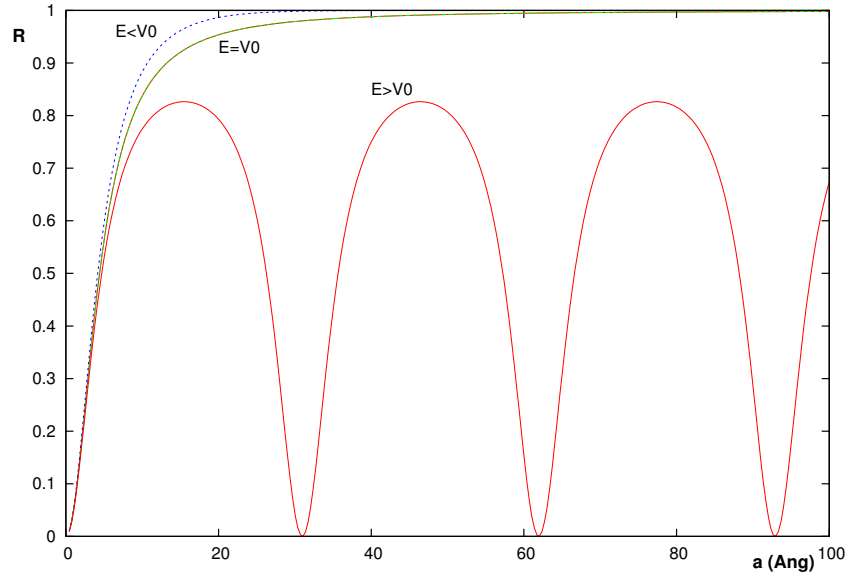


FIGURE 6 – variation de R en fonction de la largeur de la barrière a

Plus la barrière est large, plus le coefficient de réflexion est fort. Ceci donne une autre explication au fait que l'effet tunnel n'est possible qu'à de petites échelles : les barrières de potentiel sont « trop larges ».

Pour $E > V_0$, la courbe change significativement : il y a un phénomène de résonance lorsque l'énergie correspond à un mode propre de la barrière de largeur a .

4 Double créneau

Les mêmes courbes sont tracées pour un potentiel en forme de double créneau. Dans ce cas, il n'est pas possible de calculer analytiquement les coefficients .

4.1 Traversée du potentiel

La forme de la fonction d'onde lors de la traversée du potentiel :

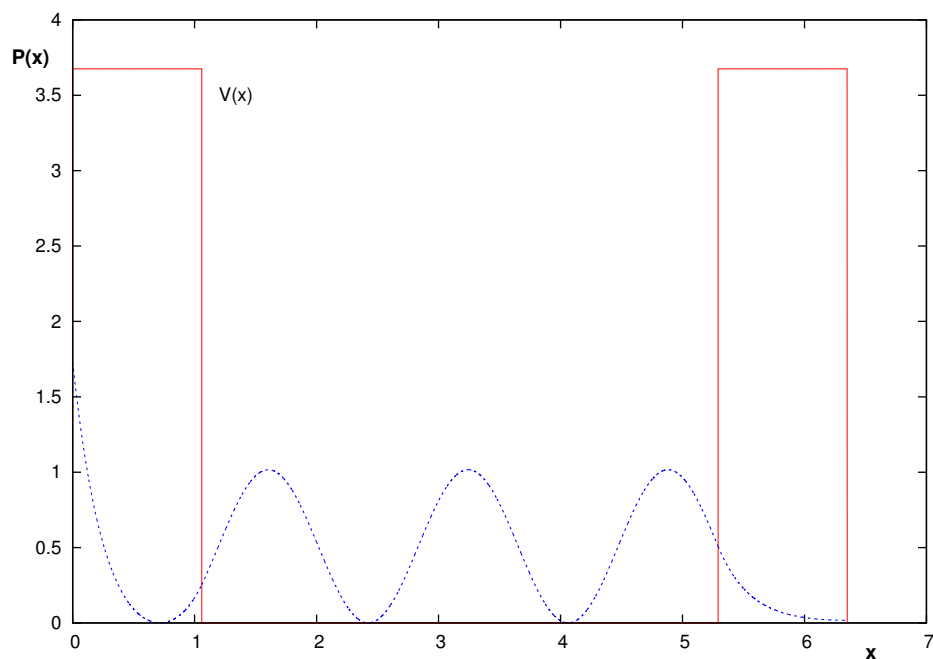


FIGURE 7 – évolution de $|\Psi(x)|^2$ à la traversée du potentiel

L'onde traverse d'abord la première barrière puis traverse ou se refléchi sur la deuxième barrière.

4.2 Variation de R en fonction de l'énergie

4.2.1 Comparaison avec le cas d'une barrière simple

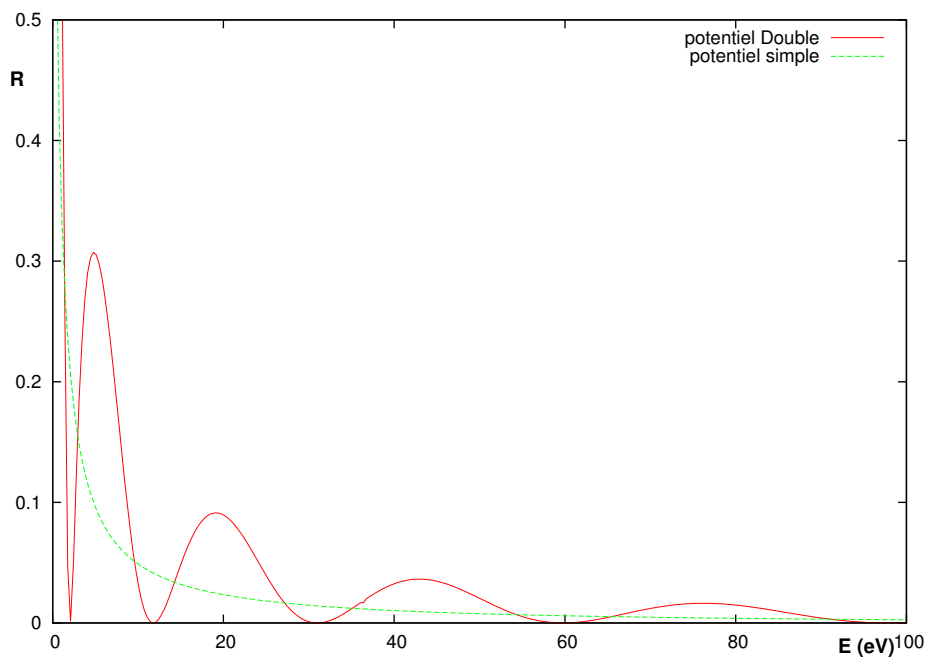


FIGURE 8 – variation de R en fonction de l'énergie E de la particule pour $a = 1\text{\AA}$ et $L = 10\text{\AA}$

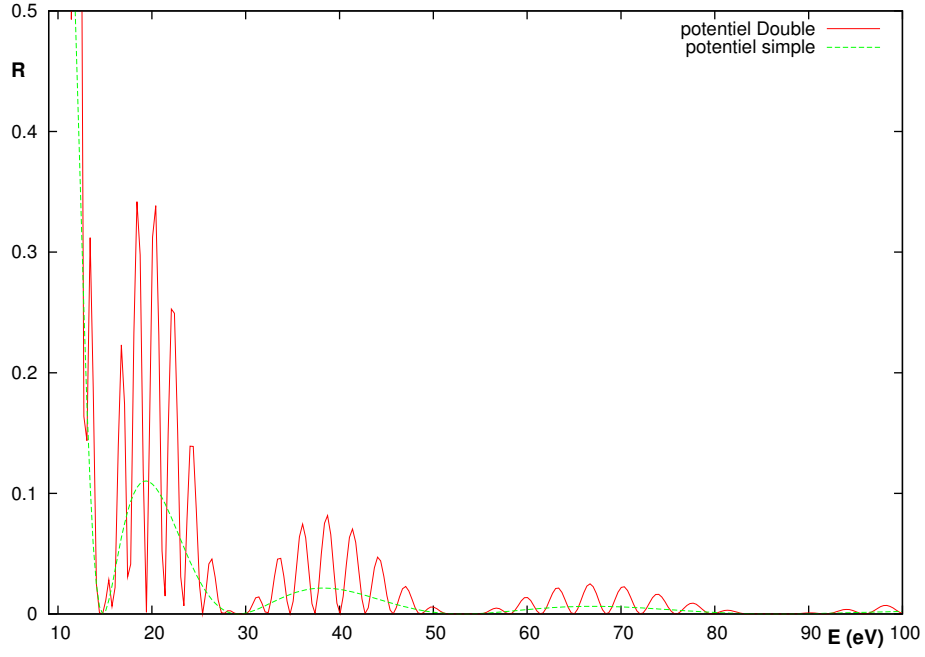


FIGURE 9 – variation de R en fonction de l'énergie E de la particule pour $a = 10\text{\AA}$ et $L = 100\text{\AA}$

Sur ces courbes, les variations de R pour le créneau simple sont comparées aux variations de R pour le créneau double. Il apparaît que les variations dans le cas de la double barrière sont modulées par les variations dans le cas de la simple barrière.

4.2.2 Analogie avec le Fabry-Perot : Filtre

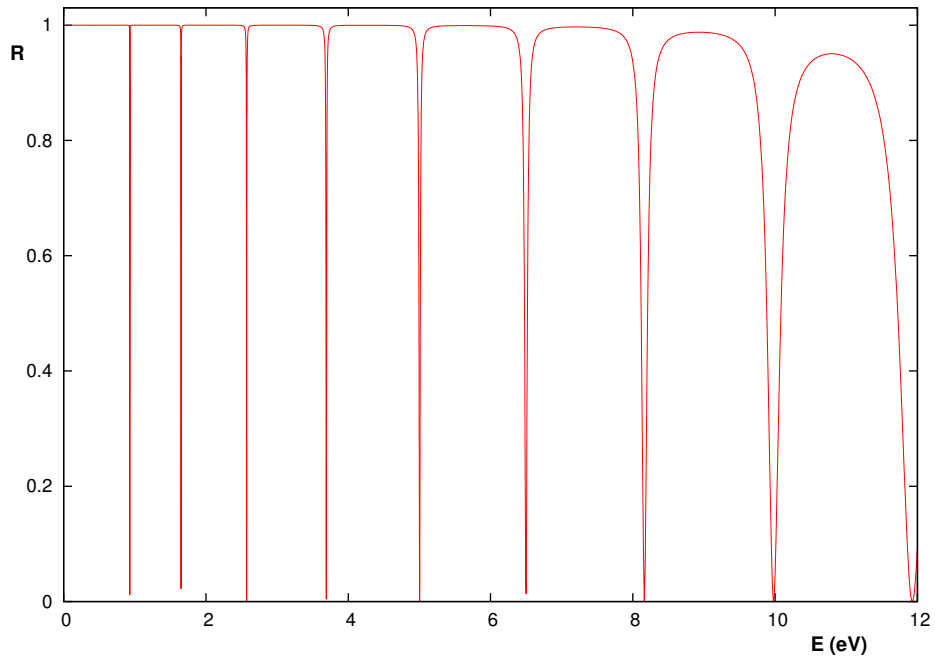


FIGURE 10 – variation de R en fonction de l'énergie E de la particule pour des énergies inférieurs à V_0

Pour des valeurs de E plus petites que V_0 , il apparait des résonances en transmission pour certaines énergies. (les « creux » de R correspondent à des pics pour la transmission T). Ainsi, aux basses énergies (i.e. aux énergies inférieures à V_0), la double barrière se comporte comme un Fabry-Perot et « sélectionne » des longueurs d'ondes précises qu'elle transmet tout en réfléchissant les autres longueurs d'ondes.

Cependant, contrairement au Fabry-Pérot, la distance entre deux pics n'est pas à chaque fois la même, ces écarts croissent.

De plus, plus l'énergie de la particule s'approche de V_0 , plus les pics sont étalés, et lorsque l'énergie dépasse ce seuil, toutes les énergies ne sont que partiellement réfléchies.

Ainsi, pour faire un filtre efficace avec ce genre de système, il faut que la gamme de longueurs d'ondes étudiée soit très inférieure à la longueur d'onde associée à l'énergie de la barrière.

4.3 Variation de R en fonction de la masse

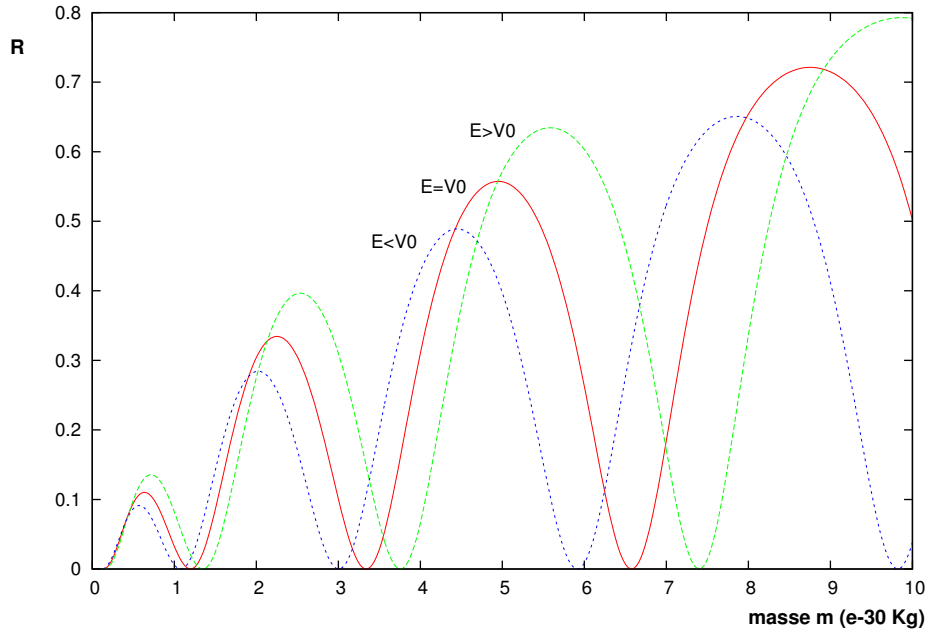


FIGURE 11 – variation de R en fonction de la masse de la particule

Même constat que précédemment, l'évolution n'est plus strictement monotone mais présente des résonances.

5 Autres formes de potentiels

Enfin, quelques profils pour des barrières de formes différentes.

5.1 Potentiel triangle

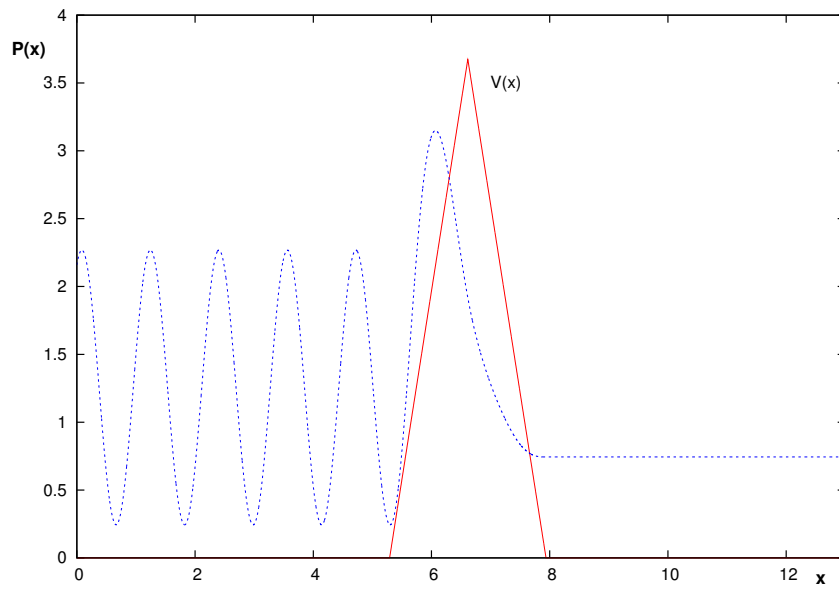


FIGURE 12 – évolution de $|\Psi(x)|^2$ à la traversée du potentiel en triangle

5.2 Potentiel trapèze

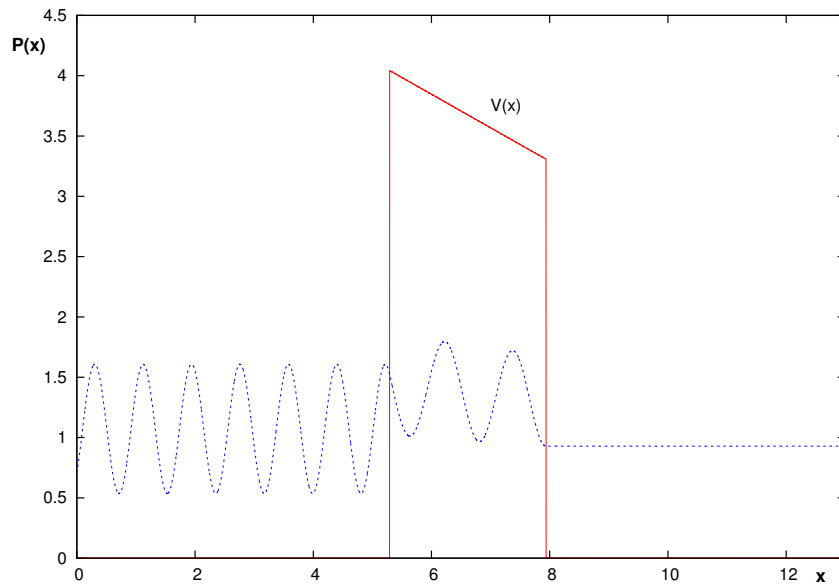


FIGURE 13 – évolution de $|\Psi(x)|^2$ à la traversée du potentiel en trapèze

5.3 Potentiel cloche C^∞

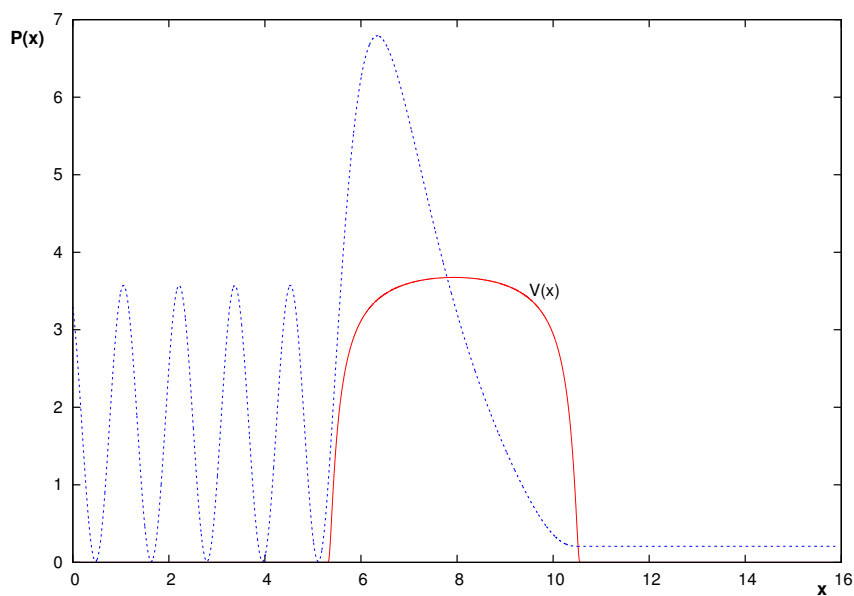


FIGURE 14 – évolution de $|\Psi(x)|^2$ à la traversée du potentiel en cloche

5.4 Comparaison

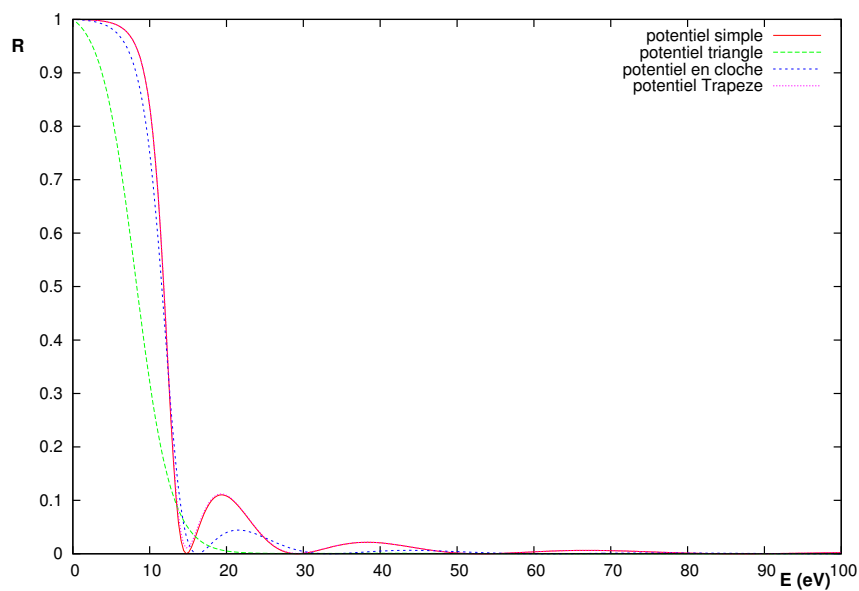


FIGURE 15 – variation de R en fonction de l'énergie E de la particule pour différents type de potentiel

Ce graphique permet de comparer l'effet des différentes barrières.

6 Conclusion

Le programme proposé permet donc de retrouver numériquement les résultats connus analytiquement pour le cas d'une barrière simple en créneau. Il permet aussi d'étudier le comportement d'une onde plane au travers

d'une double barrières de créneaux. Ceci a permis de mettre en évidence la possibilité d'une résonance en transmission et donc la possibilité de construire des filtres à énergies pour des particules au moyen d'une double barrière de potentiel.

Ce programme peut aussi permettre l'étude générale de barrières de la forme quelconque (pourvu qu'elle soit à support compact). Il serait intéressant de voir l'impact de la forme des barrières sur la fonction R pour des doubles barrières. Voir si par exemple la résonance subsiste.

Une autre possibilité est l'étude de n barrières identiques pouvant modéliser un cristal à une dimension. Le programme écrit, moyennant quelques arrangement, pourrait servir à étudier la propagation d'une onde de matière dans un cristal mono-dimensionnel puis être généralisé pour des cristaux à trois dimensions.