Simulation de l'équation de Schrödinger

Quelques commentaires sur le fonctionnement des deux notebooks Python "App Schroedinger InDep" and "App Schroedinger Dep".

I) Équation de Schröedinger indépendante du temps

Le script python "App Schroedinger InDep" résout par voie numérique l'équation de Schröedinger indépendante du temps en fonction de différents potentiels $V(x)$. Les premiers niveaux énergétiques et les fonctions d'ondes associées sont ensuite affichés.

Pour un potentiel $V(x)$ donné et isolé dans un puits de potentiel infini de largeur a, l'équation de Schröedinger indépendante du temps est donné par:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Phi(x) = E\ \Phi(x) \tag{1}$$

dans le puits de potentiel infini et les conditions aux limites imposent

$$\Phi(x) = 0, x \leq -a/2 \text{ et } x \geq a/2. \tag{2}$$

La méthode des différences finies permet de résoudre l'équation. Avec un pas régulier Δx, l'équation se réécrit:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{(\Delta x)^2}\left(\Phi_{i-1} - 2\Phi_i + \Phi_{i+1}\right) + V_i\Phi_o = E\ \Phi_i \tag{3}$$

avec les conditions limites:

$$\Phi_1 = \Phi(-a/2) = 0 \text{ et } \Phi_n = \Phi(+a/2) = 0. \tag{4}$$

Un système de n-2 équations associés aux valeurs propres $E_{2-(n-1)}$ peut s'écrire sous la forme:

$$(a\mathbf{A} + \mathbf{B})\Phi = E\Phi \tag{5}$$

en posant

$$a = \frac{-\hbar^2}{2m\Delta x^2}, \tag{6}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & ... & 0 \\ ... & .... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & 0 & 0 & ... & -2 & 1 \end{pmatrix} \tag{7}$$

et

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & V_2 & 0 & 0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 0 & V_3 & 0 & 0 & ... & 0 \\ ... & .... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & 0 & 0 & ... & V_{n-1} & 0 \end{pmatrix} \tag{8}$$

II) Equation de Schröedinger dépendante du temps

Le script python "App Schroedinger Dep" permet de résoudre numériquement l'équation de Schröedinger dépendante du temps en fonction d'un potentiel $V(x)$ donné. L'évolution temporelle d'un paquet d'ondes plongé dans ce potentiel est alors visualisée.

L'équation de Schröedinger dépendante du temps en fonction d'un potentiel $V(x)$ est:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) \tag{9}$$

Cette équation peut être résolue par la méthode des différences finies. En discrétisant l'espace par pas de Δx et le temps par pas de Δt, l'évolution temporelle de la fonction d'onde est décrite par:

$$\Psi(x,t+1) = M^{-1}L\ \Psi(x,t) \tag{10}$$

où

$$M = \begin{pmatrix} m1 & 1 & 0 & ... & 0 \\ 1 & m2 & 1 & ... & 0 \\ 0 & 1 & m3 & ... & 0 \\ ... & .... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m_{xNum} \end{pmatrix} \tag{11}$$

et

$$L = \begin{pmatrix} l1 & 1 & 0 & ... & 0 \\ 1 & l2 & 1 & ... & 0 \\ 0 & 1 & l3 & ... & 0 \\ ... & .... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & 0 & 0 & l_{xNum} \end{pmatrix} \tag{12}$$

en posant:

$$C_i = \frac{4m}{\hbar}\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}, \tag{13}$$

$$C_r = \frac{2m}{\hbar^2}(\Delta x)^2, \tag{14}$$

$$m_k = i.C_i - (C_r.V_k + 2) \tag{15}$$

et

$$l_k = i.C_i + (C_r.V_k + 2) \tag{16}$$