

RESOLUTION NUMERIQUE EQUATION DE SCHRÖDINGER

LABLACK Sofiane

27/05/2018

SOMMAIRE

INTRO

POSITION DU PROBLEME

RESULTATS

CONCLUSION

REFERENCES

▮ INTRODUCTION

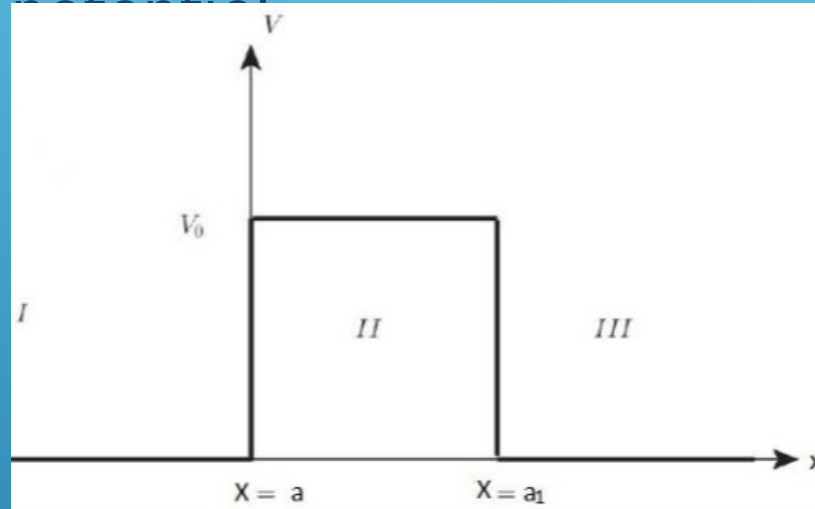
Objectif: -Résoudre numériquement l'équation de Schrödinger stationnaire unidimensionnelle.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right]\psi = E\psi$$

-Déterminer les coefficient de réflexion et de transmission.

POSITION DU PROBLEME

On veut résoudre l'équation de Schrödinger pour une particule qui rencontre une barrière de potentiel.



Solutions en dehors de la barrière connues: Particule libre C.L. d'exponentielles complexes.

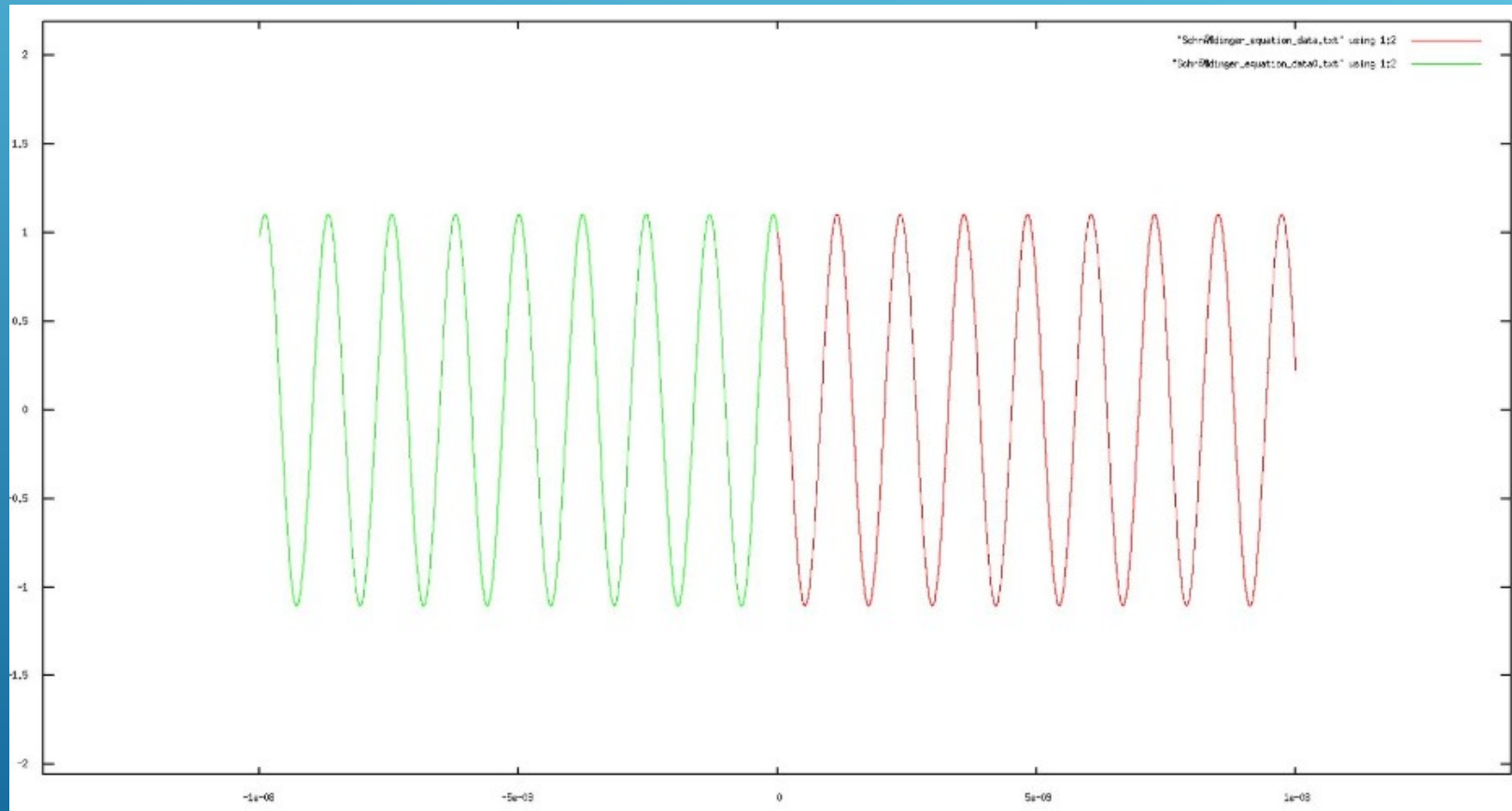
Solutions dans la barrière: C.L. d'exponentielles réelles.

Problème: La continuité de la fonction d'onde et de la dérivée.

▮ Approche résolution

- On trace les solutions analytique avant et après la barrière.
- On écrit les relations de continuités avant et après la barrière.
- On résout dans la barrière à l'aller
- On utilise la continuité pour fixer les nouvelles conditions initiales pour le retour.
- On utilise l'algorithme d'optimisation pour minimiser l'écart entre l'aller et le retour
- On a la bonne phase.

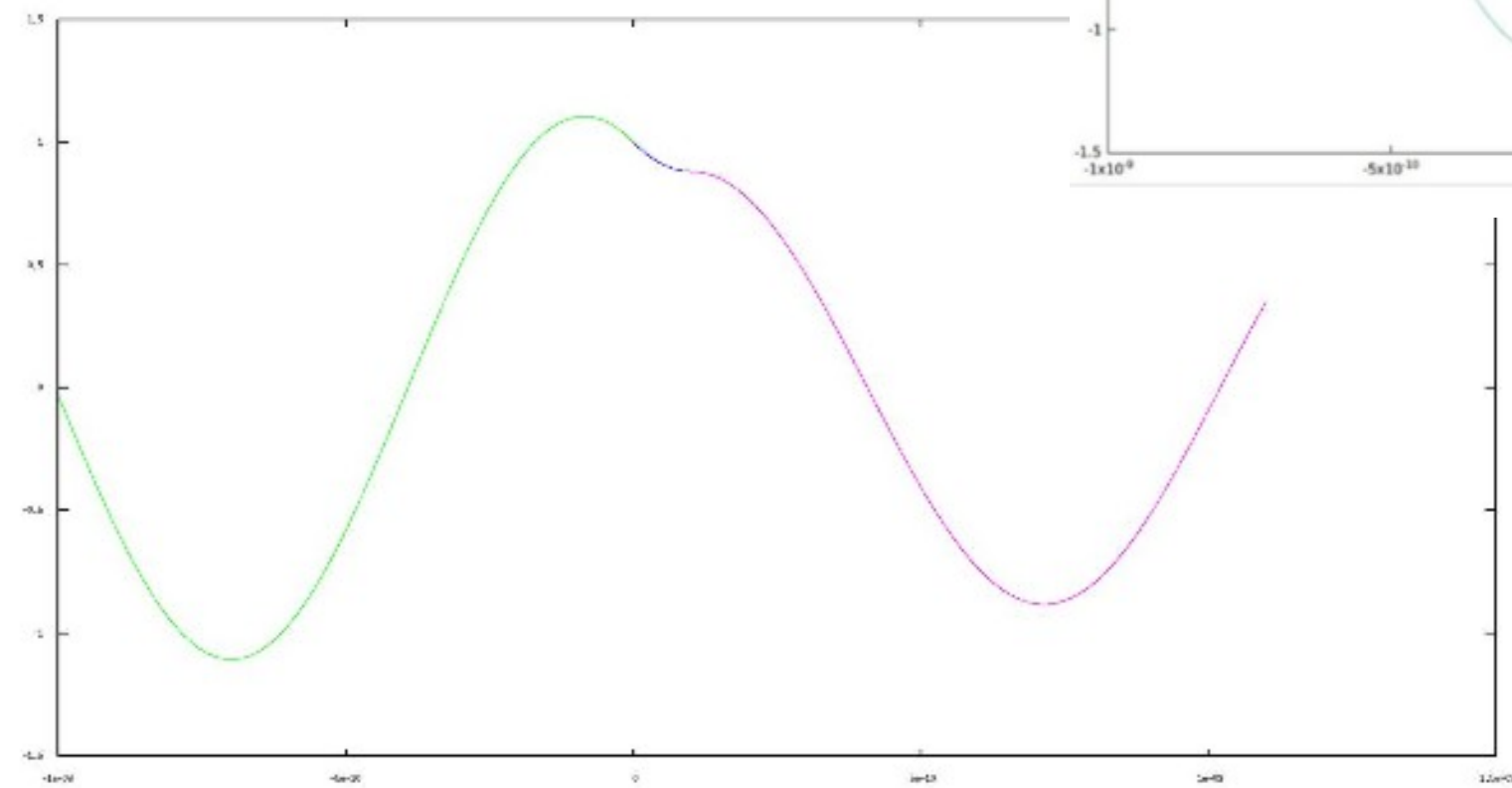
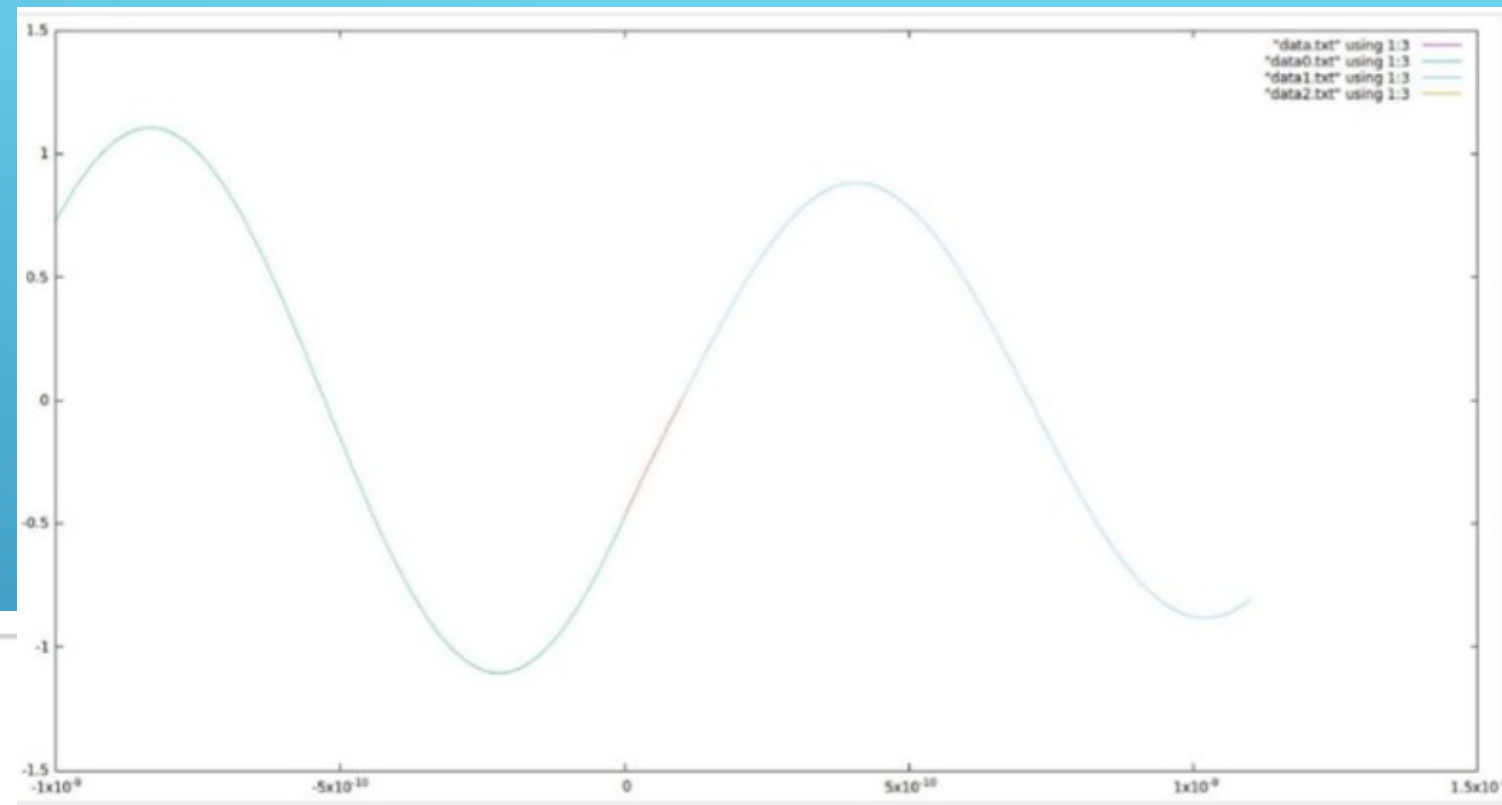
Cas particule libre: On s'assure que ça marche pour un potentiel nul.



$E=1,602e-19J;$
 $M=9,109e-31kg;$
 $V=2*E J;$
 $Hbar=1,05e-34J.s;$
 $B0=-1 ; B1=0 ;$
 $a=1e-10m$

Particule dans un potentiel

- $E = 1,602 \times 10^{-19} \text{ J};$
- $M = 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg};$
- $V = 2 \cdot E \text{ J};$
- $\hbar = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J.s};$
- $h = 1,5;$
- $B_0 = B_1 = 0;$
- $B_0 = 1,49 \times 10^{-4}; B_1 = -0,47;$



▯ Particule dans un potentiel

$$E=1,602\text{e-}19\text{J};$$

$$M=9,109\text{e-}31\text{kg};$$

$$V=2\cdot E\text{ J};$$

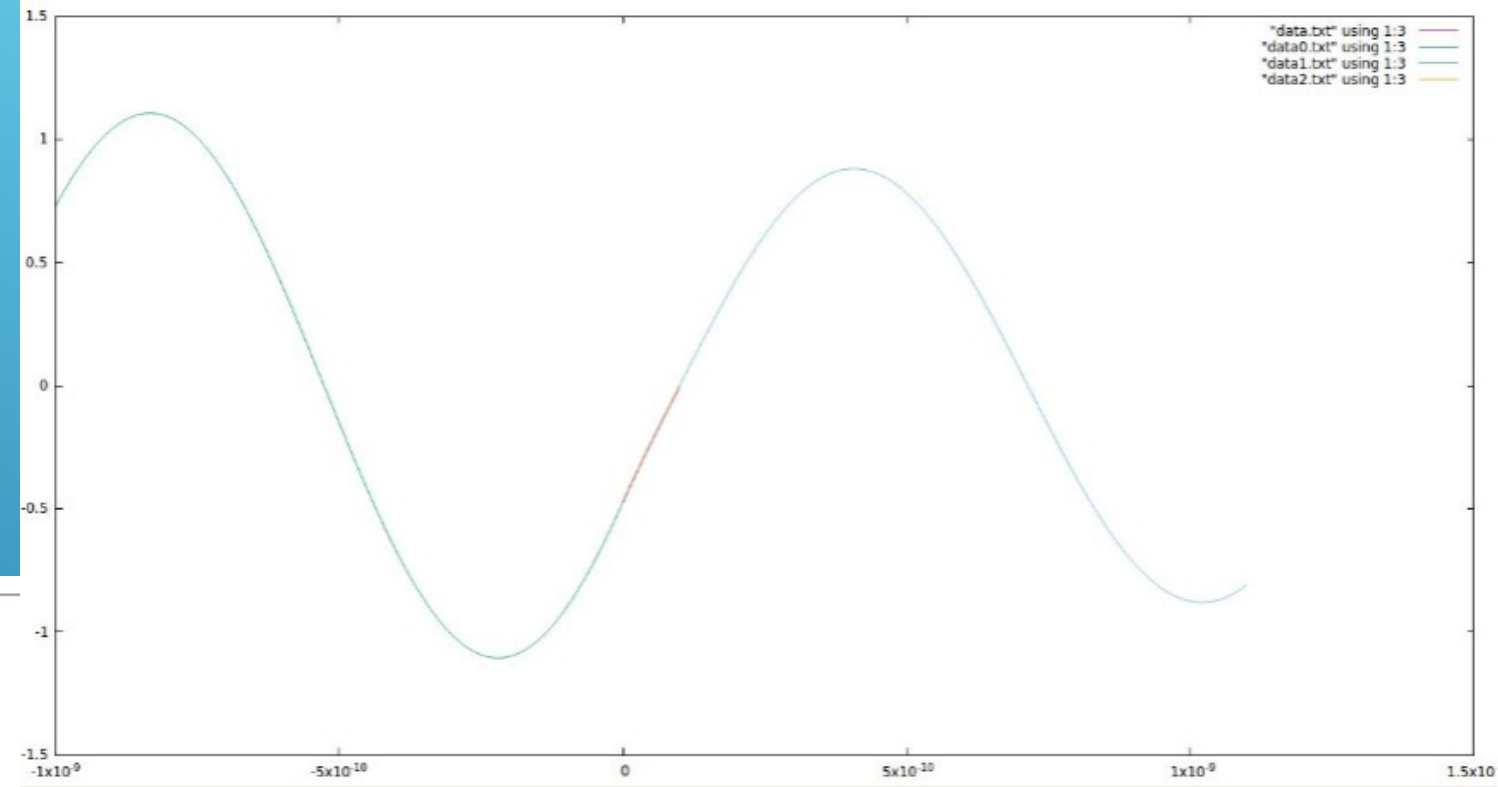
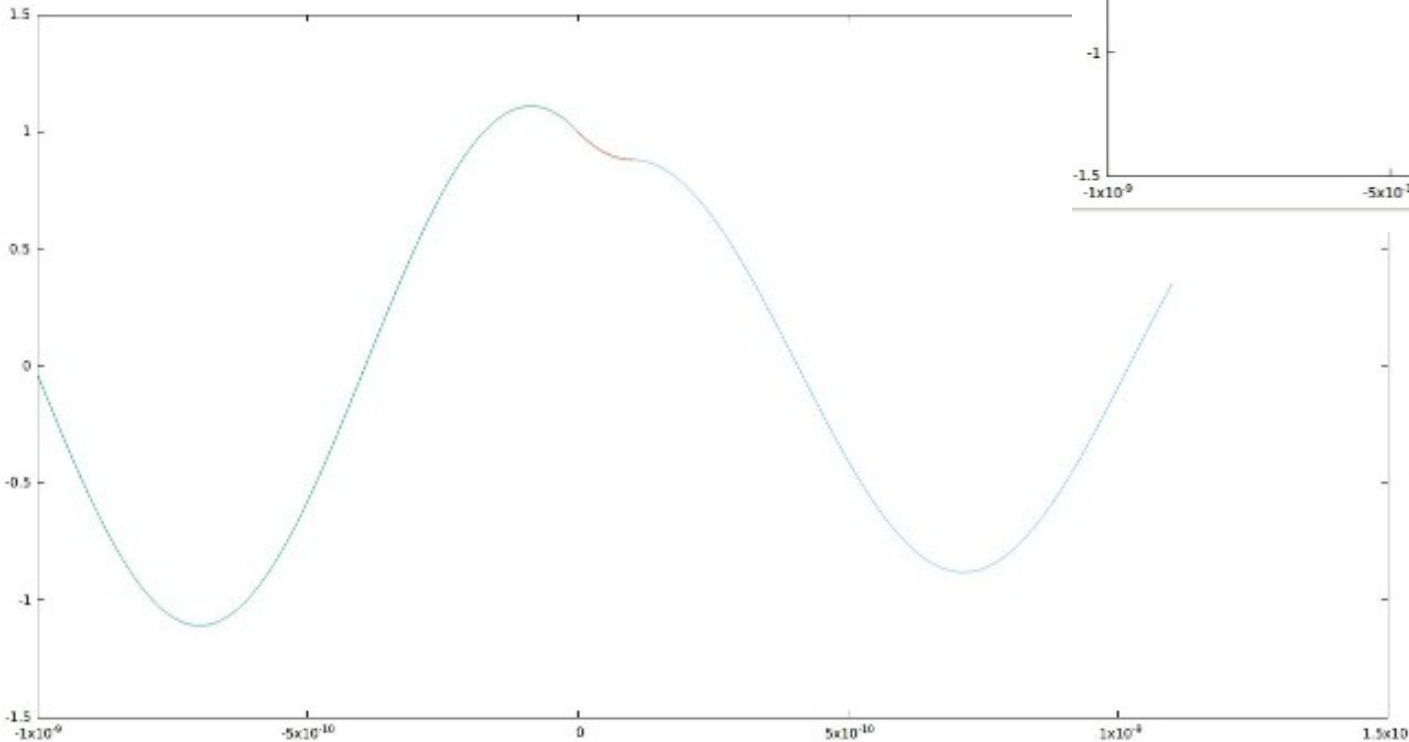
$$\hbar=1,05\text{e-}34\text{J.s};$$

$$h=1,5;$$

$$B0=-1\text{ ; }B1=0;$$

$$B0=1,252\text{e-}3\text{ ; }B1=-0,476;$$

$$R=0,226\text{ ; }=>0,774;$$



REFERENCES

- ▮ Claude Cohen-Tannoudji - Bernard Diu - Franck Laloë "Mécanique quantique Tome I". chez Dunod
- ▮ D. Marchand : POTENTIELS « CARRES » OU CONSTANTS PAR « MOR-CEAUX »,ESPCI <https://cours.espci.fr/site.php?id=73&fileid=382>
- ▮ Brian P. Flannery, Saul Teukolsky, William Press et William T. Vetterling :
- ▮ Numerical Recipes in C : The Art of Scientific Computing Chapter 16.Integration of Ordinary Differential Equations
- ▮ <http://www.aip.de/groups/soe/local/numres/bookcpdf/c16-1.pdf>