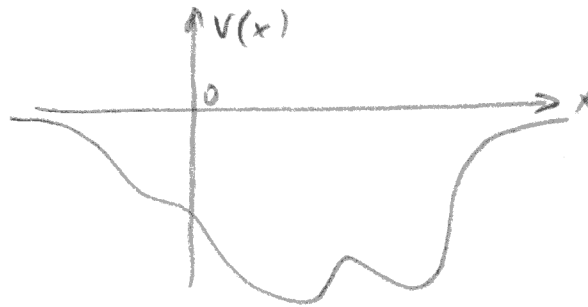


Résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire pour un potentiel quelconque à une dimension

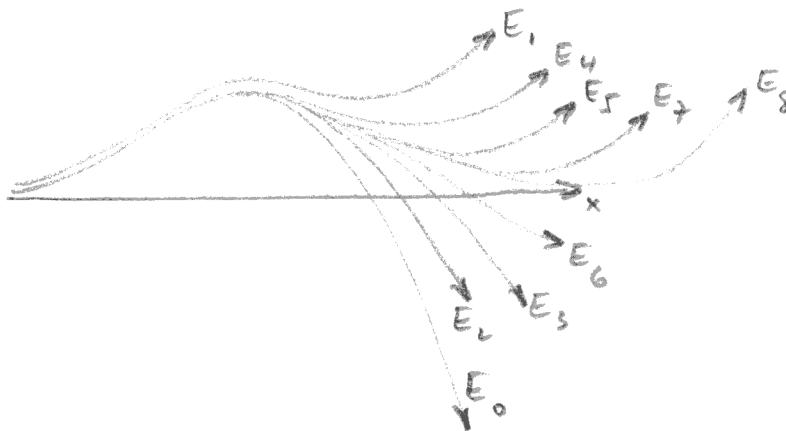
On veut calculer les énergies et fonctions d'onde liées d'une particule dans un potentiel de forme quelconque.

PRINCIPE DE LA MÉTHODE

On considère un potentiel qui a la même limite à gauche et à droite, limite qu'on prend pour origine des énergies. L'adaptation au cas où les limites sont différentes est immédiate. On a donc:



Une méthode de résolution possible est la suivante: on part par exemple de la région asymptotique à gauche, en se donnant une valeur initiale de E (donc $\psi(x)$ à gauche est de la forme $\exp(\sqrt{-2mE/\hbar^2}x)$) et on calcule numériquement $\psi(x)$ par Runge-Kutta (voir formule à la fin). En général E n'est pas une "bonne" énergie et $\psi(x)$ tend vers l'infini à droite. On fait alors varier E jusqu'à obtenir une solution exponentiellement décroissante à droite. On obtient donc des courbes ayant l'allure suivante:



Après avoir trouvé une valeur propre on peut poursuivre l'exploration en E pour en trouver d'autres.

AMÉLIORATIONS

En réalité on procède d'une façon un peu plus automatique.

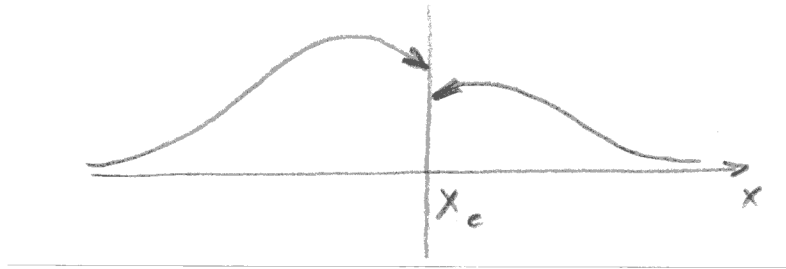
Pour une valeur de E on calcule numériquement $\psi(x)$ de la gauche vers la droite jusqu'à un certain point x_c dénommé point de raccordement. Puis, pour la même valeur de E , on fait de même de la droite vers la gauche. On a:

$$\psi_{\text{gauche}}(x) \sim \exp\left(\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}x\right) \quad \text{pour } x \text{ grand négatif}$$

$$\psi_{\text{droite}}(x) \sim \exp\left(-\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}x\right) \quad \text{pour } x \text{ grand positif}$$

Autrement dit, on a par construction les bons comportements asymptotiques.

Comme en général E n'est pas une "bonne" valeur, on obtient la configuration suivante:



Que les fonctions d'onde ne se raccordent pas en x_c n'est pas significatif car l'équation de Schrödinger est linéaire et on peut toujours multiplier l'une par ce qu'il faut pour que $\psi_{\text{gauche}}(x) = \psi_{\text{droite}}(x)$. Mais alors les dérivées ne sont tout de même pas égales. On peut grouper les deux conditions en considérant les dérivées logarithmiques à gauche et à droite, qui devraient être égales. Soit donc $L(E)$ la fonction:

$$L(E) = \frac{\psi'_{\text{gauche}}(x_c)}{\psi_{\text{gauche}}(x_c)} - \frac{\psi'_{\text{droite}}(x_c)}{\psi_{\text{droite}}(x_c)}$$

On cherche donc E telle que $L(E) = 0$.

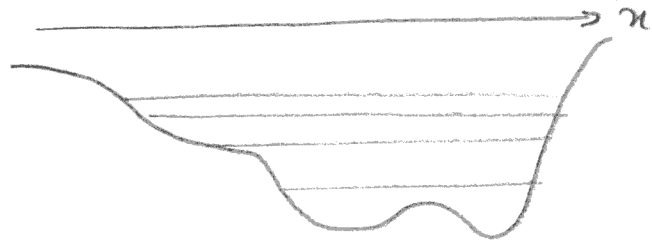
On est ramené à la recherche des racines d'une équation. On utilise la méthode de Newton-Raphston. Partant de E_0 on calcule E_1 telle que:

$$L(E_1) = L(E_0) + (E_1 - E_0) \left(\frac{dL}{dE} \right) = 0 \Rightarrow E_1 = E_0 - \frac{L(E_0)}{L'(E_0)}$$

et on recommence à partir de cette nouvelle valeur E_1 et le processus converge vers une racine de $L(E) = 0$.

COMMENT S'ASSURER QU'ON NE SAUTE PAS DE VALEURS PROPRES?

On balaie tout le domaine d'énergie entre le fond du puits et 0.



La valeur propre vers laquelle le processus converge dépend de la valeur initiale E_0 choisie. On peut vérifier qu'on n'a pas sauté d'énergie en comptant le nombre de nœuds de la fonction d'onde. La fonction d'onde du fondamental n'a pas de nœud, celle du premier niveau excité un, celle du second deux, etc...

REMARQUES

- 1) Pour le point de raccordement, choisir un point tel que $|\frac{dV}{dx}|$ soit le plus grand possible.
- 2) Avant de chercher les racines de $L(E)$, commencer par tracer la courbe de cette fonction.
- 3) On pourra tester le programme en utilisant le potentiel:

$$V(x) = -\frac{V_0}{\cosh^2\left(\frac{x}{a}\right)}$$

L'énergie de l'état fondamental d'une particule de masse m dans ce potentiel est:

$$-V_0 \frac{\lambda^2}{z} \quad \text{avec} \quad z = \frac{2V_0 m a^2}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad \lambda = \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} + z}$$

et la fonction d'onde associée est:

$$\cosh^\lambda \left(\frac{x}{a} \right)$$

~~Formule de Runge-Kutta à l'ordre 4 pour résoudre $y'' = f(x, y)$~~

~~$$y_{n+1} = y_n + h \left(y'_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2) \right)$$~~

~~$$y'_{n+1} = y'_n + \frac{1}{6}k_1 + \frac{2}{3}k_2 + \frac{1}{6}k_3$$~~

~~$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$~~

~~$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}y'_n + \frac{h}{8}k_1\right)$$~~

~~$$k_3 = hf\left(x_n + h, y_n + hy'_n + \frac{h}{2}k_2\right)$$~~