

Remerciement



*Avant toute chose, je tiens à remercier Allah pour m'avoir
donné la force et la patience pour faire ce travail.*

*Je remercie mon encadreur " Dr. BELHOUARI AISSA ", pour
sa patience et ses précieux conseils et mes parents pour leurs
encouragements incessants durant toute la période de la
réalisation de ce travail.*

*Je remercie chaleureusement mes camarades de notre
promotion pour leurs soutiens.*

Dédicaces



Je dédie ce modeste travail

A Mes chers parents

*A mon frère Adbellkader et mes sœurs (Malek ,Houda
et Faïza)*

*A toute ma famille youssef, Fethi, Taher, Mohamed et
Hocine...*

*Aux étudiants de la promotion 2^{ème} année Master
physique 2015/2016 et à tous mes amis sans exception.*

*A tous ceux qui ont sacrifié leur temps pour la science
et à tous ceux qui ont utilisé la science pour le bien
et la prospérité de l'humanité.*



Sommaire

Introduction générale	1
-----------------------------	---

Chapitre I : Application de la mécanique quantique et l'équation de Schrödinger

I.Introduction.....	3
I.1.Rayonnement du corps noir	3
I.1.1.Définition	3
I.2.Spectres atomiques	6
I.2.1. Modèle de Bohr	7
I.3.Postulats de la mécanique quantique	8
I.4.Equation de Schrödinger.....	10
I.4.1.Introduction.....	10
I.4.2.Interprétation de la fonction d'onde	10
I.4.3.Equation de Schrödinger.....	11
I.4.4.Mesure d'énergie	12
I.4.5.Solution de l'équation de Schrödinger pour des systèmes conservatif .	14
I.4.6.Exemples où l'équation de Schrödinger est soluble exactement	15

Chapitre II : Résolution numérique d'équation différentielle par la méthode de différence finie

II. Introduction	25
II.1. Définitions de la Méthode des différences finies (MDF)	25
II.1.1. Opérateurs de différences finis	25
II.1.2. Relation avec la dérivée d'une fonction	26
II.2.Résolution des équations différentielles par la méthode de différence finie	26
II.2.1. Équation différentielle d'ordre 1	26
II.2.2. Équation différentielle du 2 ^{ème} ordre	27

II.3. Résolution d'équation aux dérivées partielles	29
II.3.1. Exemple l'équation de la propagation de chaleur	31

**Chapitre III : Résolution numérique d'équation de Schrödinger
à une dimension**

III.Introduction	33
III.1. Application de méthode différentielle finie à équation à 3 points	33
III.2 Résultats	36
Conclusion générale	39
Bibliographie.....	40

Introduction générale

En mécanique quantique, les phénomènes sont décrits par la fonction d'onde qui contient toutes les informations sur les particules d'un système et son comportement suit l'équation de Schrödinger [1].

La résolution numérique de l'équation de Schrödinger reste un problème très important intervenant dans de nombreux calculs de physique. Cette équation trouve plusieurs méthodes de résolution comme la méthode de la DTF (density functional theory) [2-3], QMC(quantum Monte Carlo) [4], DVR(discret variable presentation)[5], la théorie des perturbation [6], la méthode variationnelle de Ritz [7], la méthode de différence finie, etc. Généralement ces méthodes sont limitées.

L'objectif de notre travail est résolution l'équation de Schrödinger par la méthode de différence finie dans le cas des systèmes unidimensionnels.

Nous avons utilisé le logiciel fortran 90 pour le traitement numérique.

Ce travail se partage sur trois chapitres :

- ✚ Dans le premier chapitre, nous présentons un petit historique de la mécanique quantique et aussi qu'équation de Schrödinger et sa résolution exacte pour des cas particuliers.
- ✚ Dans le deuxième chapitre, nous présentons les notions élémentaires de la méthode différence finie et son application à la résolution d'équations différentielles.
- ✚ Enfin dans le troisième chapitre, en utilisant un programme écrit dans le langage fortran 90, nous présentons les résultats numériques et où les compares avec les résultats exacts.

I. Introduction :

A la fin du dix-neuvième siècle, les diverses branches de la physique s'intégraient dans un édifice cohérent basé sur l'étude de deux types d'objets distincts, la matière et le rayonnement :

- La matière est faite de corpuscules parfaitement localisables dont le mouvement peut être décrit par la mécanique rationnelle de Newton. Les grandeurs physiques associées à ces corpuscules s'expriment en fonction des composantes de la position et de l'impulsion qui sont les variables dynamiques fondamentales.
- Le rayonnement est gouverné par les lois de l'électromagnétisme de Maxwell. Ses variables dynamiques sont les composantes en chaque point de l'espace des champs électriques et magnétiques [8].

Le succès de la physique était à cette époque impressionnant et tous les phénomènes connus trouvaient leur explication dans le cadre de ce programme classique.

A l'aube du vingtième siècle et avec l'essor des progrès technologiques, les physiciens se trouvèrent tout à coup confrontés à des phénomènes nouveaux pour lesquels les prévisions de la théorie classique sont en désaccord flagrant avec l'expérience. Il fallait donc jeter les bases d'une nouvelle théorie susceptible de pallier les insuffisances de la conception classique.

Les phénomènes qui furent sans doute historiquement à l'origine de la naissance de la nouvelle théorie sont le rayonnement du corps noir, l'effet photoélectrique et les spectres atomiques [8].

I.1 Rayonnement du corps noir :

I.1.1 Définition : un corps noir « idéal » est par définition un corps qui absorbe toutes les radiations qu'il reçoit. On le réalise seulement artificiellement en considérant une cavité vide percée d'un petit trou. Toute radiation pénétrant par ce trou n'aura presque pas de chance d'en sortir après avoir été affaiblie par plusieurs réflexions successives sur les parois internes de cette cavité (Fig.I.1) [9]:

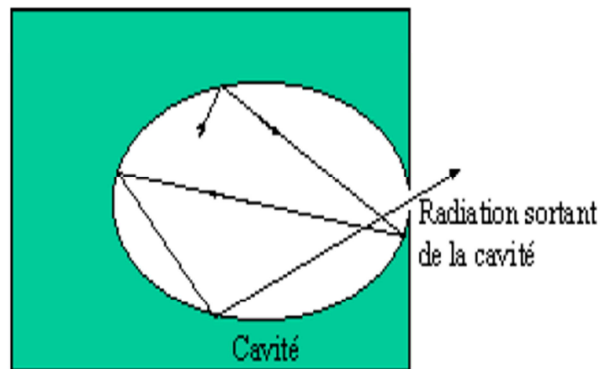


Fig.I.1 : Réflexions multiples à l'intérieur d'un corps noir [9].

Une cavité portée à une température T très grande émet des radiations qui sont régies par les lois dites du rayonnement des corps noirs :

- 1) **Loi de Stefan** (Autriche : 1864-1928)- Boltzmann (Autriche : 1844-1906) : La densité d'énergie (u) du rayonnement du corps noir ne dépend que de la température T de ce corps. Elle est proportionnelle à T^4

$$U = a T^4 \quad (\text{I.1})$$

- 2) La densité d'énergie du rayonnement thermique mesurée expérimentalement présente une forme universelle. Elle est nulle pour des fréquences $\nu \rightarrow 0$ et $\nu \rightarrow \infty$ et passe par un maximum pour une température donnée (Fig.I.2).

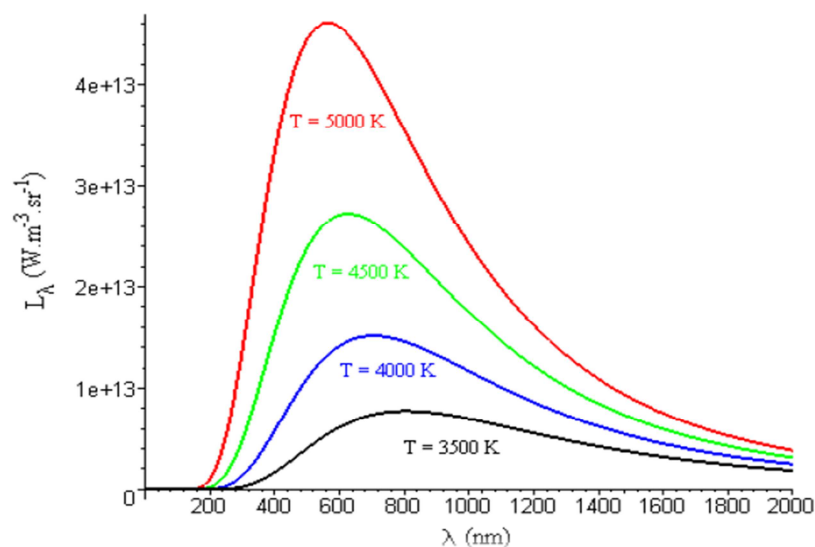


Fig.I.2 : Densité spectrale d'énergie $I(\lambda)$ du rayonnement du corps noir en fonction de la longueur d'onde pour $T=3500\text{K}$, 4000K , 4500K et $T=5000\text{K}$ [9].

- 3) Les première caractéristique théorique classique de cette courbe ont été obtenue par Wien (Autriche :1864-1928)

Le déplacement du maximum suit une loi et $\lambda_{\max} T = 2,898 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}$

Où λ_{\max} est la longueur d'onde pour laquelle l'intensité du rayonnement émis par le corps noir à une température T est maximale.

Exemple 1 : Le pic du rayonnement solaire est situé à 500 nm environ, la température

de surface de notre soleil est : $T = \frac{2,898 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}}{\lambda_{\max} \text{ m}} = \frac{2,898 \times 10^{-3}}{500 \times 10^{-9}} = 5,8 \times 10^3 \text{ K}$

- 4) **Rayleigh et Jeans** : ont déduit à partir des lois classiques supposant une évolution contenue de l'énergie une forme générale de la densité spectrale d'énergie du rayonnement :

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^3}{c^3} \quad (\text{I.2})$$

Si cette expression décrit parfaitement la forme expérimentale de la $U(\nu, T)$ pour de très faible fréquences, elle diverge rapidement des valeurs expérimentales. La théorie classique est incapable de décrire la courbe $U(\nu, T)$ en sa totalité. C'est l'échec de la théorie classique :

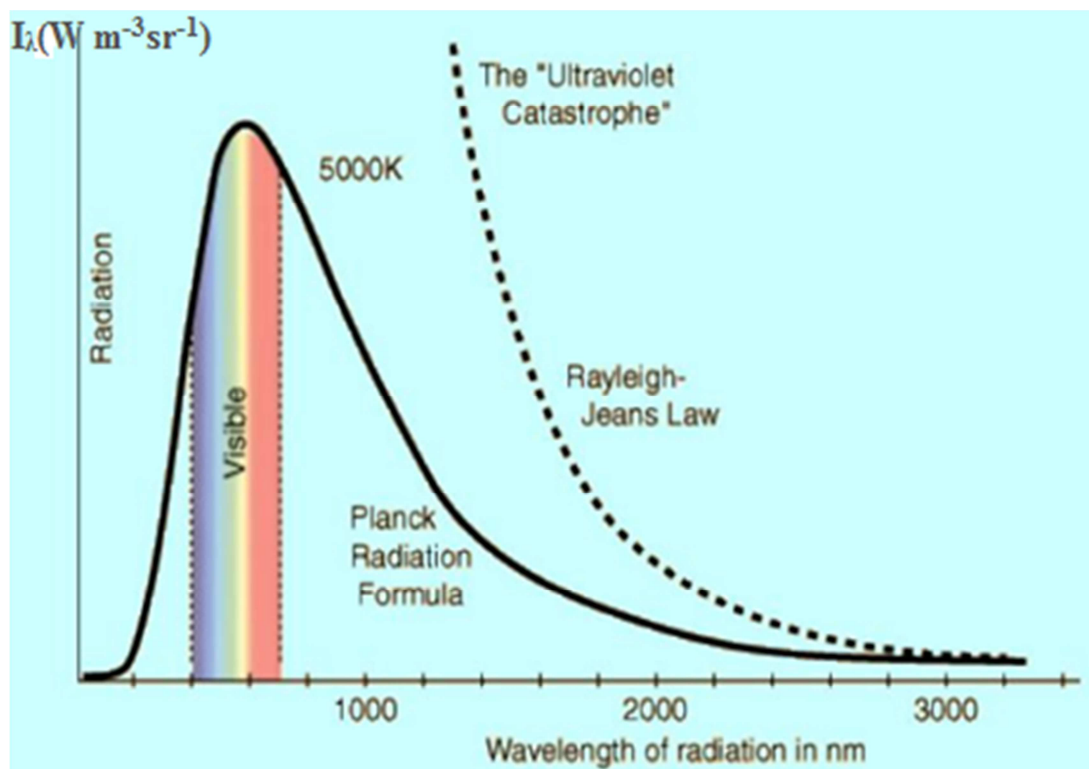


Fig I.3 : Densité d'énergie radiante $I(\lambda)$ en fonction de la longueur d'onde [9].

5) Quantification de l'énergie-Loi de Planck

Pour sortir de cette impasse Max Plank (allemand) (1858-1947) émis son hypothèse générale lourde de conséquences sur toute la physique qui est la quantification de l'énergie. Il annonce l'hypothèse suivante : Les parois du corps noir sont assimilées à des ascillateurs harmoniques qui vibrent et passent d'un état de fréquence déterminé à un autre en émettant ou absorbant un quantum d'énergie $h\nu$ (l'énergie ne peut varier que d'une façon discontinue) ou ν est la fréquence de l'oscillateur et h le quantum de l'action ou constante de Plank ($h=6,62 \cdot 10^{-34}$ J.s) Partant de cette hypothèse Planck Etablit la loi du rayonnement des corps noirs :

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/KT} - 1} \quad (\text{I.3})$$

Cette expression permet de d'écrire en détail et en sa totalité la courbe expérimentale $U(\nu, T)$. Ce succès spectaculaire de la théorie de Planck a donné naissance à la plus belle théorie physique que l'esprit humain n'ait jamais construite : **physique quantique** [9]

I.2 : Spectres atomiques :

Quand le rayonnement émis par les atomes excités d'un tube à décharge ou d'un arc électrique est dispersé à l'aide d'un prisme ou d'un réseau, le rayonnement peut être examiné en fonction de la longueur d'onde, de la fréquence.

Tous les spectres obtenus de cette façon montrent que le rayonnement est formé de plusieurs raies spectrales étroites qui apparaissent sur des diagrammes complexes. Elles sont caractéristiques de l'élément et les atomes sont responsables de l'émission. Ces observation n'out pas été pu expliquées par la physique classique. Le spectre de l'atome d'hydrogène est relativement simple et a été à la base des premières interprétations théoriques. En effet dès 1885 Balmer constat que le spectre de l'atome d'hydrogène est un spectre de raies, c'est a dire que les fréquences émises forment une suite discrète. Il montra en plus, que l'ensemble des raies connues satisfont la relation empirique [8] :

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{avec } m < n \quad (\text{I.4})$$

Ou $R_H = 1,097 \cdot 10^7 m^{-1}$ représente la constante de Rydberg pour l'hydrogène.

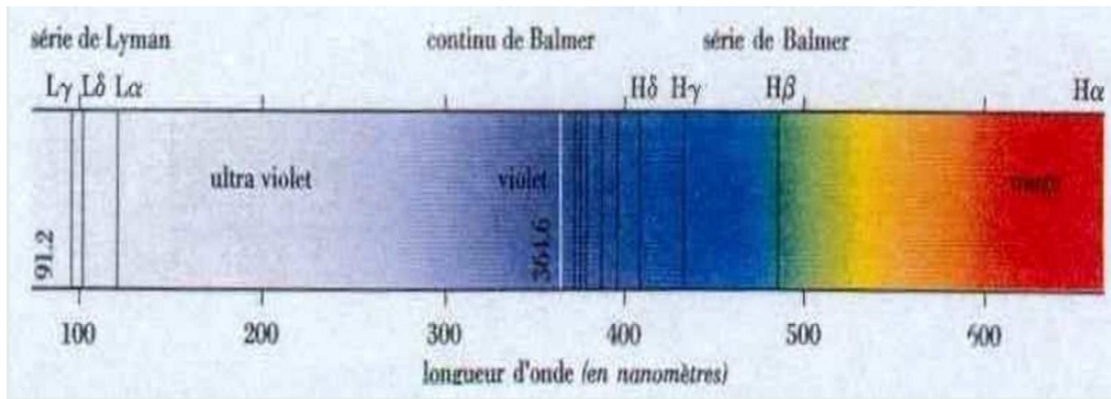


Fig I.4 : Spectre de raies de l'atome d'hydrogène [8].

I.2.1 Modèle de Bohr (1913) :

Pour expliquer observations expérimentales et ces formulations empiriques, Bohr a été amené à admettre deux postulats nouveaux :

- 1- Les électrons ne s'observent que dans des orbites "permises" dans lesquelles ils ont des énergies bien déterminées.
- 2- Quand l'électron décrit une orbite stationnaire, l'atome n'émet (ni n'absorbe) aucun rayonnement. L'émission (ou l'observation) est déterminée uniquement par le passage de l'électron d'une orbite d'énergie E_n a une orbite d'énergie plus petite E_m (fig I.5) la fréquence ν_{nm} du rayonnement émis (ou absorbé) est donnée par [8]:

$$\nu_{nm} = \frac{1}{h} (E_n - E_m) \quad (I.5)$$

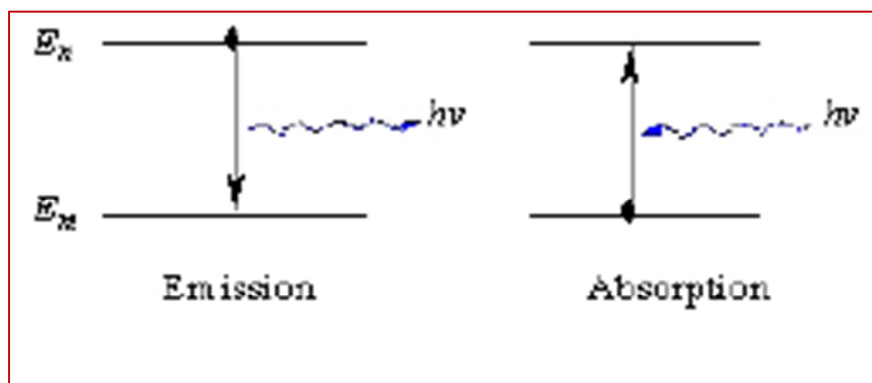


Fig I.5 : Emission et absorption d'un photon par un atome [8].

I.3 Postulats de la mécanique quantique:

Les postulats de la mécanique quantique vont permettre de décrire :

- L'état d'un système physique à un instant donné.
- Les grandeurs physiques associées au système et la prédiction du résultat de leur mesure.
- L'évolution du système au cours du temps.
- Les règles de quantification des grandeurs physiques.

Il faut remarquer que la validité de ces postulats et par conséquent celle de la théorie quantique est plus que largement confortée par toutes les expériences effectuées dans les différents domaines de la physique microscopique [8].

On commencera par énoncer les postulats

➤ Premier postulat : Etat d'un système

L'état d'un système physique est complètement défini à tout instant t par la donnée d'un ket $|\Psi(t)\rangle$ appartenant à l'espace des états ζ . $|\Psi(t)\rangle$ est appelé vecteur d'état [10].

➤ Deuxième postulat : Description d'une grandeur physique:

En mécanique quantique les grandeurs physiques mesurables sont représentées des opérateurs hermétiques et linéaires.

À toute grandeur physique A définie classiquement est associée une observable A obtenue en remplaçant dans l'expression convenablement symétrisée de A , \vec{r} et \vec{p} par les opérateurs \vec{R} et \vec{P} respectivement [10].

➤ Troisième postulat : Mesure d'une grandeur physique:

1. Résultat de la mesure:

La mesure d'une grandeur physique A ne peut donner comme résultat que l'une des valeurs propres de l'observable A correspondante.

À cause de l'hermiticité de A la mesure donnera toujours une valeur réelle et lorsque le spectre de A est discret les résultats qu'on obtient sont quantifiés [10].

2. Prédiction de la mesure:

À la différence de la mécanique classique où le résultat de la mesure d'une grandeur physique est toujours certain et reproductible lorsque la mesure se fait dans les mêmes

conditions, la mécanique quantique introduit un indéterminisme qui fait que la prédiction de la mesure est de type probabiliste.

Cette probabilité dépend à la fois de l'état du système et de la nature du spectre des valeurs propres.

Si l'état $|\Psi\rangle$ du système se confond avec un vecteur propre $|\varphi_n\rangle$ de A correspondant à la valeur propre a_n , le résultat de la mesure de A est certain, c'est a_n .

S'il n'en est pas ainsi on ne peut prévoir que statistiquement le résultat de la mesure.

Les postulats qui suivent et qu'on appelle **postulats de décomposition spectrale** donnent les règles qui permettent de calculer la probabilité de cette mesure [10].

2.1. Spectre discret non dégénère

Lorsqu'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état $|\Psi(t)\rangle$, la probabilité d'obtenir comme résultat la valeur propre non dégénérée de l'observable A correspondante est :

$$P(a_n) = |\langle \varphi_n | \Psi \rangle|^2 \quad (\text{I.6})$$

$|\varphi_n\rangle$ étant le vecteur propre norme de A correspondant à la valeur propre a_n

2.2. Spectre discret dégénère:

Lorsqu'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état $|\Psi(t)\rangle$, la probabilité d'obtenir comme résultat la valeur propre dégénérée de l'observable A correspondante est :

$$P(a_n) = \sum_{\alpha=1}^{g_n} |\langle \varphi_n^\alpha | \Psi \rangle|^2 \quad (\text{I.7})$$

g_n est le degré de dégénérescence de la valeur propre a_n et $\{|\varphi_n^\alpha\rangle\}$ ($\alpha = 1, \dots, g_n$) un système orthonormé de vecteurs propres associée à a_n et sous-tendant le sous-espace de dégénérescence ξ_n .

2.3. Spectre continu non dégénère.

Lorsqu'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état $|\Psi\rangle$, la probabilité $dP(a)$ d'obtenir un résultat a compris entre a et $a + da$ est :

$$dP(a) = |\langle v_\alpha | \Psi \rangle|^2 da \quad (\text{I.8})$$

$|v_\alpha\rangle$ étant le vecteur propre correspondant à la valeur propre continue a de l'observable A associée à A .

➤ **Quatrième postulat : Principe de réduction du paquet d'onde :**

Si la mesure de la grandeur physique A sur le système dans l'état $|\Psi\rangle$ normé donné pour résultat a_m (non dégénère), l'état du système immédiatement après la mesure (avant que le système n'ait le temps d'évoluer) n'est plus $|\Psi\rangle$ mais $|\varphi_m\rangle$; $|\varphi_m\rangle$ étant le vecteur propre associé à la valeur propre a_m .

➤ **Cinquième postulat : Evolution dans le temps**

L'évolution au cours du temps de l'état $|\Psi(t)\rangle$ d'un système physique est décrite par l'équation de Schrödinger :

Où \hat{H} est l'observable associée à son énergie totale. \hat{H} est appelé opérateur hamiltonien. Pour une particule, il s'écrit en représentation $|\vec{r}\rangle$:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\vec{r}) \quad (\text{I.9})$$

L'équation de Schrödinger s'écrit alors dans cette représentation [10]:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\vec{r},t)\right]\Psi(\vec{r},t) \quad (\text{I.10})$$

I.4 .Equation de Schrödinger

I.4.1. Introduction

En physique classique, une particule est décrite par sa position $\vec{r}(t)$. L'évolution de sa position (la trajectoire de la particule) est donnée par l'équation de Newton [11] :

$$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \mathbf{F}(\vec{r}, t) \quad (\text{I.11})$$

En physique quantique, en vertu de la dualité onde-corpuscule, la particule est maintenant décrite par une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ dont nous décrirons la signification et l'équation qui donne son évolution (l'équation de Schrödinger) [12].

I.4.2. Interprétation de la fonction d'onde :

Nous associons maintenant à une particule une quantité Ψ que nous appelons fonction d'onde. Ψ est un champ scalaire dépendant du temps :

$$\Psi = \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.12})$$

$\Psi(\vec{r}, t)$ est en général une fonction complexe : $\Psi(\vec{r}, t) \in \mathbb{C}$ (I.13)

Que représente Ψ ? Nous donnons ici l'interprétation de Born. Cette interprétation relie la quantité.

$$\|\Psi(\vec{r})\|^2 = \Psi(\vec{r}) \Psi^*(\vec{r}) \quad (\Psi^*(\vec{r}) \text{ conjugué complexe de } \Psi) \quad (\text{I.14})$$

À la notion de **densité de probabilité** de trouver la particule en \vec{r} .

$$\|\Psi(\vec{r})\|^2 : \text{Densité de probabilité} \quad (\text{I.15})$$

La **probabilité de trouver la particule** dans un volume $dV = d^3r$ autour de \mathbf{r} est

$$\|\Psi(\vec{r})\|^2 d^3r \quad (\text{I.16})$$

La connaissance de $\Psi(\vec{r}, t)$ permet alors (dans l'interprétation de Born) de connaître l'évolution dynamique de la probabilité de trouver la particule dans un volume d^3r autour de tout point \mathbf{r} en fonction du temps.

I.4.3. Equation de Schrödinger :

La question qui se pose est maintenant la suivante : si on poursuit le parallèle avec le mouvement d'une particule, il faut alors trouver une équation pour décrire la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$. **Mais comment trouver la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$?**

Ce fut le mérite du physicien autrichien E. Schrödinger d'avoir posé l'équation qui donne l'évolution de $\Psi(\vec{r}, t)$, connue sous le nom d'**équation de Schrödinger** :

A un certain temps t_0 l'état du système est entièrement déterminé par la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t_0)$

A un autre instant $t > t_0$ le système pourrait évoluer à un autre état décrit par $\Psi(\vec{r}, t)$ qu'on peut déterminer à partir de $\Psi(\vec{r}, t_0)$ à l'aide de l'équation de Schrödinger suivante :

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.17})$$

Où \hat{H} est appelé Hamiltonien du système, et E la valeur propre associée.

L'énergie du système E est la somme de l'énergie cinétique et énergie potentielle.

L'opérateur Hamiltonien associé est donné par [13] :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\vec{r}, t) \quad (\text{I.18})$$

$$\text{L'opérateur impulsion } \hat{p} : \quad \hat{p} = -i\hbar\nabla \quad (\text{I.19})$$

$$\text{Donc :} \quad \hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\vec{r}, t) \quad (\text{I.20})$$

En remplaçant (I.20) dans (I.17) :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.21})$$

Où :

- $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05457 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
- ∇^2 est le Laplacien,
- m la masse de la particule,
- $\hat{V}(\vec{r}, t)$ l'énergie potentielle de la particule.

L'équation (I.21) est l'équation de Schrödinger dépendante du temps. C'est une équation différentielle aux dérivées partielles linéaire et homogène. Si Ψ_1 et Ψ_2 sont des solutions de ces équations, toute combinaison linéaire $\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2$ de ces fonctions en est également solution. Ainsi ces solutions possèdent la propriété de superposition, caractéristique des ondes en général [13].

L'équation de Schrödinger dépendant du temps est une équation différentielle du premier ordre par rapport au temps. En conséquence, la connaissance de Ψ à un instant initial donné permet de déterminer toute son évolution ultérieure et cette équation de Schrödinger son spectre d'énergie [13].

I.4.4. Mesure de l'énergie :

L'équation de Schrödinger indépendante du temps, $\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$, s'interprète mathématiquement comme une équation aux valeurs propres de l'hamiltonien \hat{H} , c'est-à-dire que l'action de cet opérateur sur la fonction $\Psi(\vec{r})$ consiste en la multiplication de cette même fonction par un coefficient; $\Psi(\vec{r})$ est alors une fonction propre de \hat{H} . Ainsi, résoudre techniquement l'équation de Schrödinger indépendante du temps revient à rechercher l'ensemble des fonctions propres; $\Psi(\vec{r})$ et les valeurs propres de \hat{H} .

A chaque fonction propre est associée une valeur particulière de E , qui est la valeur propre de l'hamiltonien. Cette équation traduit le fait physique important suivant : la mesure de l'énergie dans un état stationnaire donné E , et cette mesure ne perturbe pas l'état de l'objet physique [14].

L'ensemble des valeurs possibles de l'énergie forment le spectre énergétique de l'objet. Deux cas doivent être envisagés.

- i) Si une solution $\Psi(\vec{r})$ existe quelle que soit la valeur E de l'énergie ; le spectre énergétique est alors continu (Fig.I.6) et les états correspondants sont libres.
- ii) Si une solution $\Psi(\vec{r})$ n'existe que pour certaines valeurs E_1, E_2, \dots, E_n de l'énergie ; le spectre énergétique est discret (Fig I.6) à les états correspondants sont libres états liés ou confinés [14].

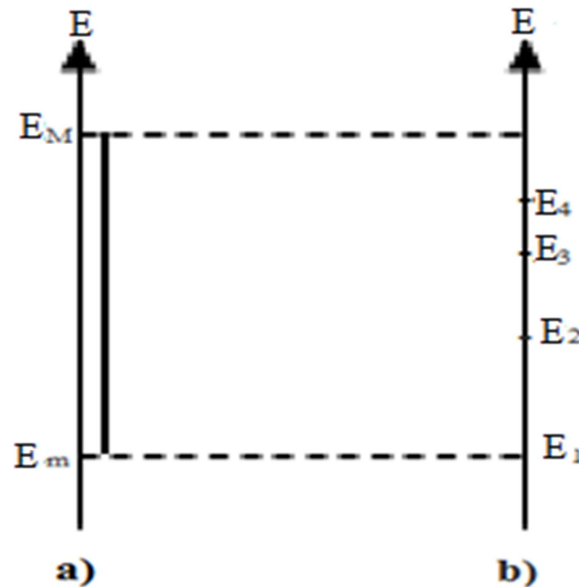


Fig I.6 : Spectre énergétique [14].

Notons que $\Psi(\vec{r})$ coïncide avec la valeur de la fonction d'onde à l'instant initial $t=0$: $\Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}, 0)$

A un instant ultérieur t , la nouvelle de la fonction d'onde est simplement déduite de sa valeur initiale en multipliant cette dernière par le facteur de phase $\exp(-iEt/\hbar)$. L'évolution de l'état de l'objet physique, décrite par l'équation de Schrödinger, s'exprime donc par un simple facteur de phase. Ainsi, à tout instant, le champ d'onde reste une fonction propre de l'opérateur \hat{H} :

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, t) = [\hat{H}\Psi(\vec{r})] \exp(-iEt/\hbar) = E \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.22})$$

Ce résultat traduit bien l'obtention du même résultat E , lors de la mesure de l'énergie, pourvu que l'état soit stationnaire [14].

I.4.5. Solution de l'équation de Schrödinger pour des systèmes conservatif :

Lorsqu'une particule se déplace dans un potentiel indépendant du temps donc [13] :

$$\hat{V}(\vec{r}, t) = \hat{V}(\vec{r}) \quad (\text{I.23})$$

H est indépendant du temps et le système est dit conservatif.

Nous utilisons la méthode de séparation des variables :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \cdot A(t) \quad (\text{I.24})$$

En remplaçant dans la relation (I.21)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\varphi(\vec{r}) \cdot A(t)) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}(\vec{r}) \right] (\varphi(\vec{r}) \cdot A(t)) \quad (\text{I.25})$$

$$i\hbar \frac{\frac{dA(t)}{dt}}{A(t)} = \frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})} \quad (\text{I.26})$$

L'équation (I.26) représente une égalité dont le premier membre ne dépend que du temps alors que le second membre ne dépend que de la position. Ceci n'est possible que si les 2 membres sont égaux à une constante E [13] :

$$\left\{ \begin{array}{l} i\hbar \frac{\frac{dA(t)}{dt}}{A(t)} = E \\ \frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})} = E \end{array} \right. \quad (\text{I.27})$$

D'où :

$$i\hbar \frac{dA(t)}{A(t)} = E \cdot dt \quad (\text{I.28})$$

Dont la solution suivante [13] : $A(t) = e^{-iEt/\hbar}$ (I.29)

La seconde indépendante du temps, et ne dépendant que de la position r :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E \cdot \varphi(\vec{r}) \Rightarrow \nabla^2 \varphi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E + \hat{V}(r)] \cdot \varphi(r) = 0 \quad (\text{I.30})$$

La solution globale de l'équation (I.21) est le produit :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \cdot e^{-iEt/\hbar} \quad (\text{I.31})$$

Et sont appelées **solution stationnaires** [1 3].

I.4.6. Exemples où l'équation de Schrödinger est soluble exactement :

✚ Problème à une dimension :

Si le mouvement de la particule est confiné sur une droite, le potentiel est alors une fonction à une seule variable de l'espace. Dans ce cas l'équation de Schrödinger de la particule ne dépend que d'une seule variable de l'espace. L'hamiltonien du type (I.20), s'écrit alors [13]:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (\text{I.32})$$

Ce type de problèmes de mécanique quantique à une dimension et d'une importance capitale en physique du solide où de l'électronique.

Parmi les potentiels les plus utilisés on cite le potentiel harmonique.

➤ Cas d'une particule libre :

Une particule libre n'est soumise à aucun potentiel externe $\widehat{V}(\vec{r}) = 0$, l'équation (I.30) devient :

$$\nabla^2 \varphi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \varphi(\vec{r}) = 0 \quad (\text{I.33})$$

Si on ne considère que la direction suivant x, (I.33) devient :

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \varphi(x) = 0 \quad (\text{I.34})$$

Ou bien :

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + k^2 \cdot \varphi(x) = 0 \Rightarrow \varphi'' + k^2 \cdot \varphi = 0 \quad (\text{I.35})$$

Ou k est le vecteur d'onde :

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad (\text{I.36})$$

L'équation (I.35) est une équation différentielle de second ordre sans second membre. La solution générale d'une telle équation est la suivante :

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (\text{I.37})$$

Elle est constituée du premier terme Ae^{ikx} qui est une onde progressive (une onde qui se déplace dans la direction positive), le second terme Be^{-ikx} est une onde régressive (une onde qui se déplace dans la direction négative) [13].

➤ **Cas d'une particule dans un potentiel $V(x) \neq 0$:**

L'équation de Schrödinger reste de la forme (I.30) :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - \hat{V}(x)] \cdot \varphi(x) = 0 \quad (\text{I.38})$$

On peut la réécrire comme suit [13] : $\varphi''(x) + k^2 \cdot \varphi(x) = 0$ (I.39)

Avec : $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E - \hat{V}(x)]$ (I.40) est toujours le vecteur d'onde dans ce cas la.

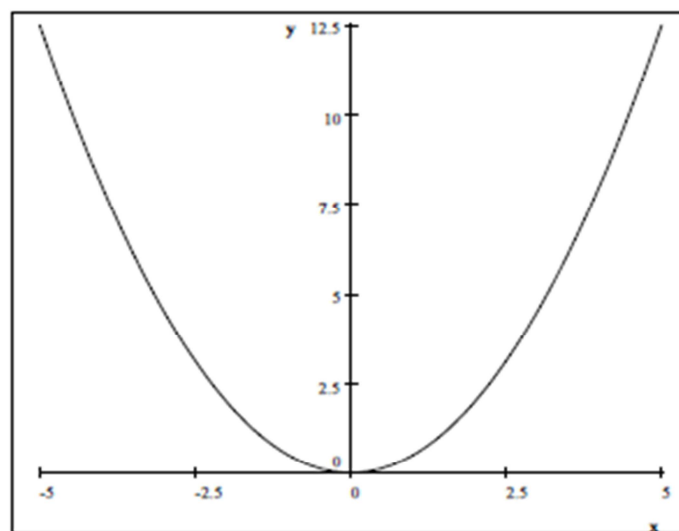
➤ **L'oscillateur harmonique :**

L'exemple le plus classique d'un oscillateur harmonique est celui d'une masse m qui se déplace le long d'une droite Ox , sous l'action d'une force de rappel $\mathbf{F} = -k\mathbf{x}$, au voisinage d'une position d'équilibre stable qu'on peut prendre comme origine. Cette masse a pour énergie potentielle :

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 \quad (\text{I.41})$$

De très nombreux systèmes physiques peuvent être assimilés, en première approximation, à de tels oscillateurs harmoniques dits linéaires. C'est le cas, par exemple, des atomes ou des ions d'un cristal qui peuvent vibrer autour de leur position d'équilibre.

Les vibrations des atomes d'une molécule diatomique peuvent aussi être modélisées, en première approximation, par un oscillateur harmonique à une dimension [15].



FigI.7 : Potentiel harmonique.

a) Équation de Schrödinger :

L'équation de Schrödinger des états stationnaires pour une particule de masse m s'écrit compte tenu du potentiel parabolique [16] :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{1}{2}k x^2\Psi = E\Psi \quad (\text{I.42})$$

Introduisons, comme pour l'oscillateur harmonique en mécanique classique, la grandeur :

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (\text{I.43})$$

Multiplions les deux membres de l'équation (I.42) par $2/\hbar\omega$, de façon à obtenir des coefficients sans dimension, et effectuons les changements de variables suivants :

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad ; \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (\text{I.44})$$

On obtient l'équation différentielle :

$$H'\Psi = \left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^2\right)\Psi = \lambda\Psi \quad (\text{I.45})$$

Où H' joue le rôle d'un hamiltonien « réduit » et λ une constante positive [16].

b) Niveaux d'énergie

Dans cette partie, nous allons développer une méthode permettant d'obtenir le spectre d'énergie de l'oscillateur quantique sans avoir besoin de résoudre directement l'équation (I.45). l'idée est de chercher à obtenir une décomposition de H' en facteurs, analogue à un carré. Pour cela, introduisons les deux opérateurs :

$$A = -\frac{d}{dy} + y \quad ; \quad B = \frac{d}{dy} + y \quad (\text{I.46})$$

Appliquons l'opérateur B à une fonction Ψ , puis l'opérateur A à la fonction $B\Psi$:

On obtient :

$$A(B\Psi) = \left(-\frac{d}{dy} + y\right)\left(\left(\frac{d}{dy} + y\right)\Psi\right) = \left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^2 - 1\right)\Psi \quad (\text{I.47})$$

Selon (I.45), on peut écrire l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$H'\Psi = (AB + 1)\Psi = \lambda\Psi \quad (\text{I.48})$$

L'opérateur hamiltonien n'est pas identique à AB mais on a :

$$H' = AB + 1 \quad (\text{I.49})$$

On peut, avec une démarche analogue, intervertir le rôle des opérateurs A et B ,et parvenir à la formule :

$$H'\Psi = (BA - 1)\Psi = \lambda\Psi \quad (\text{I.50})$$

Montrons à présent que si Ψ est une solution de l'équation de Schrödinger correspondant à l'énergie E, alors $A\Psi$ en est une également correspondant à l'énergie $E + \hbar\omega$ pour cela, faisons agir à gauche l'opérateur A sur chacun des membres de l'équation (I.50), on obtient [16]:

$$(AB - 1)(A\Psi) = \lambda(A\Psi) \quad (\text{I.51})$$

Rajoutons $2A\Psi$ à chaque membre de cette dernière équation ; il vient :

$$(AB + 1)(A\Psi) = (\lambda + 2)(A\Psi) \quad (\text{I.52})$$

L'opérateur qui figure dans le premier membre de (I.52) étant, selon(I.49) l'hamiltonien H' , la fonction $\Psi' = A\Psi$ est une fonction propre de H' .la valeur propre associée à Ψ' est égale à $(\lambda + 2) = \lambda'$,soit ,compt tenu de $\lambda = 2E/\hbar\omega$, $\lambda' = 2E'/\hbar\omega$:

$$E' = E + \hbar\omega \quad (\text{I.53})$$

On arrive ainsi à construire par action de l'opérateur A sur une solution Ψ d'énergie E, une solution d'énergie $\Psi' = A\Psi$ d'énergie $E' = E + \hbar\omega$. Il suffit donc de trouver la solution de plus basse énergie E_0 de l'oscillateur pour obtenir toutes les autres par cette méthode récursive[16].

Pour obtenir, faisons agir à gauche l'opérateur B sur chacun des membres de l'équation (I.48).on obtient l'expression suivant, analogue à (I.52) :

$$H'(B\Psi) = (BA - 1)(B\Psi) = (\lambda - 2)(B\Psi) \quad (\text{I.54})$$

Cette dernière équation est vérifiée lorsque $B\Psi$ est fonction propre non nulle de l'opérateur H' pour la valeur propre $\lambda - 2$, mai également pour le cas trivial $B\Psi = 0$ Or, la profondeur

du potentiel harmonique étant finie, il existe une valeur propre de H' plus petite que toutes les autres, soit λ_0 . Sa fonction propre Ψ_0 obéit nécessairement à la relation :

$$B\Psi_0 = 0 \quad (\text{I.55})$$

Sinon $\lambda_0 - 2$ serait une valeur propre de H' inférieure à λ_0 , ce que contredirait l'hypothèse que λ_0 est la plus petite valeur propre de H' . puisque λ_0 fait partie du spectre de l'opérateur H' , avec comme fonction propre Ψ_0 , on a $H'\Psi_0 = \lambda_0 \Psi_0$ l'expression (I.49) donne alors :

$$A(B\Psi_0) = (\lambda_0 - 1) \Psi_0 \quad (\text{I.56})$$

Puisque $B\Psi_0 = 0$, selon (I.55), et que la fonction Ψ_0 est non nulle, on en déduit : $\lambda_0 = 1$ soit encore :

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (\text{I.57})$$

Les autres énergies sont obtenues en ajoutant successivement un quantum $\hbar\omega$ à la précédente. les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique ont donc pour valeur :

$$E_n = E_0 + n\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (\text{I.58})$$

Avec $n = 0, 1, 2, \dots$. Si les atomes et les molécules qui constituent la matière, peuvent être considérés comme des oscillateurs harmoniques, tout au moins en première approximation, l'expression (I.58) montre que les échanges avec l'extérieur ne peuvent s'effectuer que par des multiples d'un quantum de valeur $\hbar\omega$. Lorsque ces échanges s'effectuent par l'intermédiaire du rayonnement électromagnétique, on retrouve l'hypothèse de Planck relative au corps noir.

c) Fonctions d'onde

Le calcul des fonctions peut s'effectuer par applications successives de l'opérateur A sur la solution de plus basse énergie. Cette dernière s'obtient en utilisant l'équation (I.55) qui, compte tenu de la définition de l'opérateur B, s'écrit :

$$\left(\frac{d}{dy} + y\right) \Psi_0 = 0 \quad (\text{I.59})$$

Cette équation a pour solution :

$$\Psi_0 = N \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) = N \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \quad (\text{I.60})$$

Le coefficient N s'obtient par normalisation de la densité de probabilité. On écrit :

$$\int_{-\infty}^{\infty} N^2 \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right) dx = 1 \quad (\text{I.61})$$

On obtient : $N = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$. La fonction d'onde Ψ_1 correspondant au niveau d'énergie suivant $E_1 = E_0 + \hbar\omega$, s'obtient en appliquant sur Ψ_0 l'opérateur A , d'où, à la constante de normalisation près :

$$\Psi_1' = A\Psi_0 = \left(-\frac{d}{dy} + y\right) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \quad (\text{I.62})$$

Après calcul de la constante de normalisation. On obtient :

$$\Psi_1(x) = \sqrt{2} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} x \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \quad (\text{I.63})$$

La solution généralisée peut être obtenue par récurrence ; on a :

$$\Psi_n(y) = (\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-1/2} \exp(-y^2/2) H_n(y) \quad (\text{I.64})$$

Où les fonctions $H_n(y)$ sont des polynômes d'ordre n , connus sous le nom de polynômes d'Hermite, et définis par :

$$H_n(y) = (-1)^n \exp(y^2) \frac{d^n}{dy^n} \exp(-y^2) \quad (\text{I.65})$$

La fonction d'onde (I.61), correspondant au plus bas niveau d'énergie de vibration, donne pour expression de la densité de probabilité de présence :

$$|\Psi_0(x)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right) \quad (\text{I.66})$$

Cette expression est celle d'une courbe de Gauss. La probabilité de présence maximale de la particule fictive de masse m se situe en sa position d'équilibre $x=0$, au fond du puits de potentiel [16].

Problème à 3 dimensions :

➤ Particule dans une boîte [17] :

Le Problème d'une particule dans une boîte modélisé un système de molécules d'un gaz dans une enceinte fermée. Un gaz est constitué de molécules qui sont animées en permanence d'une vitesse de déplacement relativement élevée, de l'ordre de 500 ms^{-1} à la température ambiante. Pour un gaz parfait, on considère que les molécules n'interagissent

pas avec leurs voisines et on peut donc déterminer séparément l'énergie cinétique de chaque molécule.

Considérons une molécule placée dans une enceinte parallélépipédique de côtés a , b , c (fig I.8). Supposons que son énergie soit uniquement cinétique et qu'elle ne soit soumise à aucun champ à l'intérieur de l'enceinte. Lorsque la molécule s'approche d'une paroi de l'enceinte, les interactions des atomes constituant cette paroi repoussent la molécule qui « rebondit » sur la paroi. Il existe donc un potentiel $V(x, y, z)$ qui augmente très brusquement au voisinage de la paroi.

:

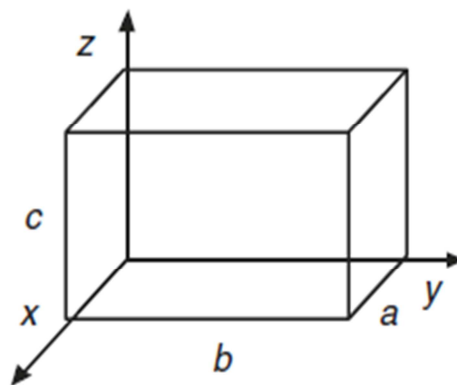


Fig I.8 : une boîte fermée [17].

On peut schématiser ce potentiel sur chacun des axes ; considérons, par exemple, l'axe des x où le potentiel devient brusquement très grand en $x = 0$ et $x = a$ alors qu'il est nul dans l'intervalle $[0, a]$ (Fig I.9). On dit que la molécule est confinée entre deux *murs de potentiel* ; ce potentiel ayant une valeur très élevée, on peut considérer que les murs de potentiel sont infiniment élevés.

Cherchons les états quantiques stationnaires de la molécule dans l'intervalle $[0, a]$. Son équation de Schrödinger indépendante du temps est :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z) \quad (\text{I.67})$$

Où m est la masse de la molécule ; l'énergie potentielle, étant supposée nulle dans $[0, a]$, elle ne figure donc pas dans l'équation. Puisque la molécule est confinée à l'intérieur du récipient, sa fonction d'onde est nulle à l'extérieur. Ainsi la détermination de $\Psi(x, y, z)$ et E se ramène à la résolution de l'équation d'onde (I.67) dans un domaine intérieur à l'enceinte, avec les conditions aux limites :

$$\Psi(0, y, z) = \Psi(a, y, z) = 0 \quad ; \quad \Psi(x, 0, z) = \Psi(x, b, z) = 0 \quad ; \quad \Psi(x, y, 0) = \Psi(x, y, c) = 0 \quad (\text{I.68})$$

Méthode de séparation des variables :

L'hamiltonien H qui figure dans l'équation (I.67) se décompose sous la forme de trois termes indépendants : $H = H_x + H_y + H_z$; on peut donc chercher des solutions sous la forme :

$$\Psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (\text{I.69})$$

Portant cette dernière expression dans l'équation de Schrödinger (I.67), on obtient :

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} + \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \quad (\text{I.70})$$

Chaque terme figurant dans le membre gauche de (I.70) ne dépend que d'une seule variable indépendante. Pour que leur somme soit une constante, chaque terme doit lui-même être égal à une constante, d'où :

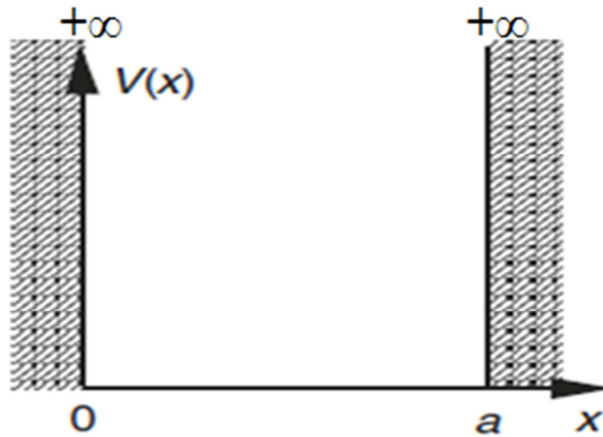


Fig I.9: potentiel $V(x)$ [17]

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E_x \quad \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E_y \quad ; \quad \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E_z \quad (\text{I.71})$$

Avec : $E = E_x + E_y + E_z$. L'équation aux dérivées partielles (I.67) est ainsi scindée en trois équations différentielles à une seule variable. C'est la *méthode de séparation des variables*. Les trois équations (I.71) sont analogues et ont pour solution des sinus ou des cosinus. Les conditions aux limites (I.68) imposent les solutions :

$$X_n(x) = N \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (\text{I.72})$$

Où n est la suite des nombres entiers relatifs et N un coefficient de normalisation qu'on détermine en écrivant :

$$\int_0^a |X_n(x)|^2 dx = |N|^2 \frac{a}{2} = 1 \quad (\text{I.73})$$

Puisque la fonction d'onde est définie à une constante de phase près, on peut choisir la valeur positive de N , d'où :

$$X_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (\text{I.74})$$

Reportant $X_n(x)$ dans l'équation différentielle, on obtient les valeurs de l'énergie :

$$E_{x,n} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (\text{I.75})$$

On obtient une suite discrète de valeurs de l'énergie, caractérisées chacune par un *nombre quantique* n , avec $n = 1, 2, 3, \dots$. À chaque valeur de $E_{x,n}$ correspond une seule fonction propre $X_n(x)$ de plus, la valeur $n = 0$ est à exclure car elle conduit à la solution triviale $X_0=0$ [17].

Fonctions d'onde et niveaux d'énergie d'une molécule

Les fonctions d'onde de la forme (I.69) sont obtenues en multipliant entre elles les solutions (I.74) avec celles analogues en y et z , soient :

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \left(\frac{8}{abc}\right)^{1/2} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \sin \frac{n_2 \pi y}{b} \sin \frac{n_3 \pi z}{c} \quad (\text{I.76})$$

Avec $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$. Ces trois *nombre quantiques* caractérisent un état d'énergie cinétique de la molécule. Les niveaux d'énergie sont donnés par :

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right) \quad (\text{I.77})$$

Pour a, b, c tels que les rapports $a : b : c$ soient des nombres irrationnels, à chaque niveau d'énergie correspond une seule fonction d'onde. Par contre, si l'on considère, par exemple, une enceinte cubique, telle que $a = b = c$, à certains niveaux correspondent alors plusieurs fonctions d'onde. Ainsi, les trois fonctions d'onde $\Psi_{112}, \Psi_{121}, \Psi_{211}$ ont le même niveau d'énergie. On dit que le niveau d'énergie est *dégénéré* [17].

III. Introduction :

La résolution exacte de l'équation de Schrödinger est généralement difficile.

Certains modèles simples, quoique non particulièrement conformes à la réalité, peuvent être résolus analytiquement et s'avèrent particulièrement utiles [13] :

- particule libre (potentiel nul).
- oscillateur harmonique (potentiel quadratique).
- particule dans un réseau unidimensionnel (potentiel périodique).

Dans les autres cas, il faut faire appel aux diverses techniques d'approximation [18]:

- la théorie des perturbations apporte des expressions analytiques sous la forme de développements asymptotiques autour d'un problème non perturbé précisément soluble.
- l'analyse numérique permet d'explorer des situations inaccessibles par la théorie de perturbation.

De nos jours, les problèmes de mécanique quantique à une dimension et d'une importance capitale dans le domaine de la physique du solide ou de l'électronique.

On va comparer par la suite les différentes solutions numériques avec cette solution exacte pour certains cas simple.

III.1. Application de méthode différentielle finie à équation à 3 points :

L'équation de Schrödinger est donné par :

$$\Psi''(x) + (E - V(x)) \frac{2m}{\hbar^2} \Psi(x) = 0 \quad (\text{III.1})$$

- C'est une équation 2^{ème} ordre de la forme :

$$y''(x) + a(x)y'(x) + b(x)y(x) = c(x) \quad (\text{III.2})$$

Pour identification (III.1) et (III.2); on a :

$$b(x) = (E - V(x)) \frac{2m}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad \Psi''(x) + b(x)\Psi(x) = 0 \quad (\text{III.3})$$

On applique la méthode différentielle :

$$\begin{cases} a(x) = 0 \\ b(x) = (E - V(x)) \frac{2m}{\hbar^2} \\ c(x) = 0 \end{cases}$$

Tel que :

$$\Psi_i' = \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_{i-1}}{2h} \quad (\text{III.4})$$

$$\Psi_i'' = \frac{\Psi_{i+1} - 2\Psi_i + \Psi_{i-1}}{h^2} \quad (\text{III.5})$$

On remplace ces équations (III.4) et (III.5) dans l'équation (III.3) :

$$\begin{aligned} \Psi_{i+1} - 2\Psi_i + \Psi_{i-1} + h^2 b(x) \Psi_i &= 0 \\ \Rightarrow \Psi_{i-1} + (h^2 b(x) - 2) \Psi_i + \Psi_{i+1} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

On obtient le schéma récursif suivant :

$$\Rightarrow \Psi_{i+1} = -\Psi_{i-1} - (h^2 b(x) - 2) \Psi_i \quad (\text{III.7})$$

On peut obtenir notre schème récursif : **Algorithme de Numerov** [20]

$$\Psi''(x) = -k^2 \Psi(x) \quad (\text{III.8})$$

$$\Psi''''(x) = \frac{d^2}{dx^2} (\Psi''(x)) = \frac{d^2}{dx^2} (-k^2 \Psi(x)) \quad (\text{III.9})$$

$f(x) = f(x_0) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) + \frac{h^3}{3!} f'''(x) + \frac{h^4}{4!} f''''(x)$ Développement de Taylor

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0) f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!} f''(x_0) + \dots + \frac{(x - x_0)^n}{n!} f^n(x_0)$$

$$= \sum_i a_i f^{(i)}(x_i) \quad \text{avec} \quad a_i = \frac{(x-x_0)^i}{i!}$$

Pour $x_0 = x_n$:

$$\Psi(x) = \Psi(x_n) + (x - x_n)\Psi'(x_n) + \frac{(x - x_n)^2}{2!}\Psi''(x_n) + \frac{(x - x_n)^3}{3!}\Psi'''(x_n) + \frac{(x - x_n)^4}{4!}\Psi''''(x_n) + \dots$$

$$\Psi(x) = \Psi(x_n) + h_0\Psi'(x_n) + \frac{h_0^2}{2!}\Psi''(x_n) + \frac{h_0^3}{3!}\Psi'''(x_n) + \frac{h_0^4}{4!}\Psi''''(x_n) + \dots$$

$$h_0 = (x - x_n) = \Delta x$$

$$\begin{aligned}\Psi(x_{n-1}) &= \Psi_{n-1} \\ &= \Psi(x_n) + (x - x_{n-1})\Psi'(x_n) + \frac{(x - x_{n-1})^2}{2!}\Psi''(x_n) \\ &\quad + \frac{(x - x_{n-1})^3}{3!}\Psi'''(x_n) + \frac{(x - x_{n-1})^4}{4!}\Psi''''(x_n) + \dots\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Psi(x_{n+1}) &= \Psi_{n+1} \\ &= \Psi(x_n) + (x - x_{n+1})\Psi'(x_n) + \frac{(x - x_{n+1})^2}{2!}\Psi''(x_n) \\ &\quad + \frac{(x - x_{n+1})^3}{3!}\Psi'''(x_n) + \frac{(x - x_{n+1})^4}{4!}\Psi''''(x_n) + \dots\end{aligned}$$

$$\text{Tel que : } x - x_{n-1} = -(x - x_{n+1}) = h_0$$

$$\begin{aligned}\Psi_{n-1} + \Psi_{n+1} &= 2\Psi_n + [(x - x_{n-1})(x - x_{n+1})]\Psi'_n + h_0^2\Psi''_n + \frac{h_0^4}{12}\Psi''''_n \\ \Rightarrow \Psi_{n-1} + \Psi_{n+1} - 2\Psi_n &= h_0^2\Psi''_n + \frac{h_0^4}{12}\Psi''''_n \\ \Rightarrow \frac{\Psi_{n-1} + \Psi_{n+1} - 2\Psi_n}{h_0^2} &= \Psi''_n + \frac{h_0^2}{12}\Psi''''_n\end{aligned}\quad (\text{III.10})$$

En remplace (III.8) et (III.9), on trouve :

$$\Psi''''_n = \frac{(-k_{n+1}^2\Psi_{n+1}) - 2(-k_n^2\Psi_n) + (-k_{n-1}^2\Psi_{n-1})}{h^2}\quad (\text{III.11})$$

En remplace (III.11) dans(III.10), on obtient :

$$\Rightarrow \Psi_{n+1} = \frac{2\left(1 - \frac{5}{12}h_0^2k_n^2\right)\Psi_n - \left(1 - \frac{1}{12}h_0^2k_{n-1}^2\right)\Psi_{n-1}}{1 + \frac{1}{12}h_0^2k_{n+1}^2}\quad (\text{III.12})$$

III.2. Résultats

1. Particule libre :

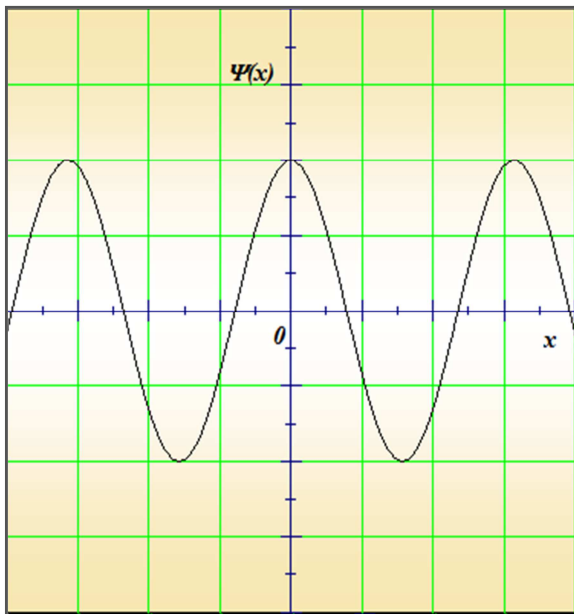
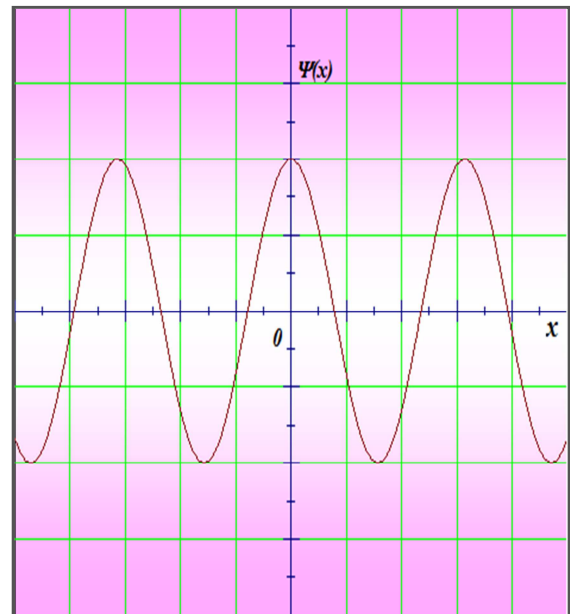


Fig III.1 Résultat numérique par MDF

Fig III.2 Résultat exact de la fonction
 $\Psi(x) = \cos(x)$

2. Oscillateur harmonique :

- L'état fondamental (n=0)

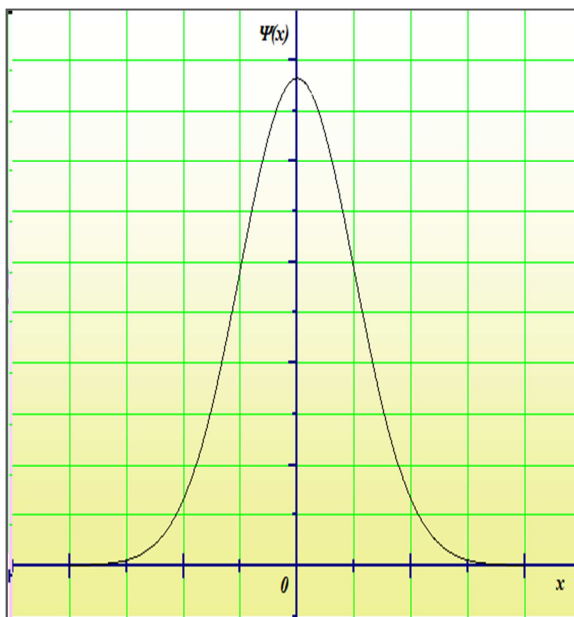
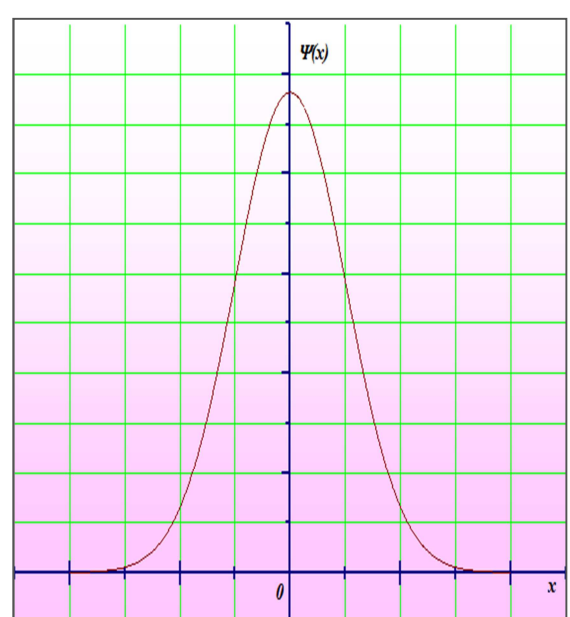


Fig III.3 Résultat numérique par MDF

Fig III.4 Résultat exact de la fonction
 $\Psi_0(x) = \exp(-x^2/2)$

- 2^{ème} état excité (n=1)

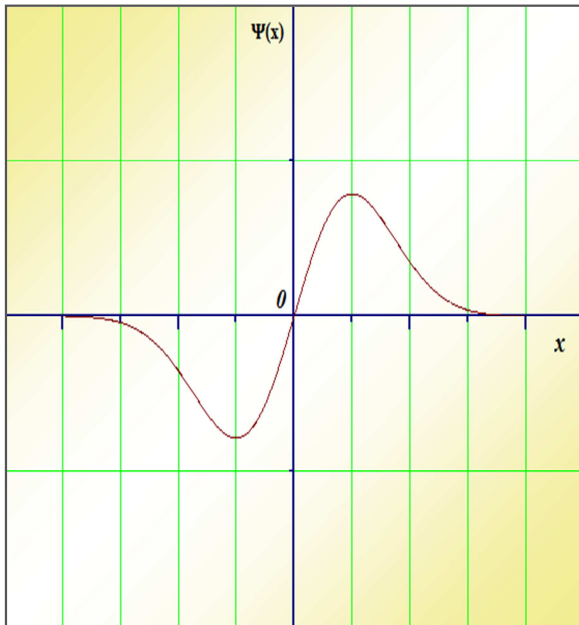


Fig III.5 Résultat numérique par MDF

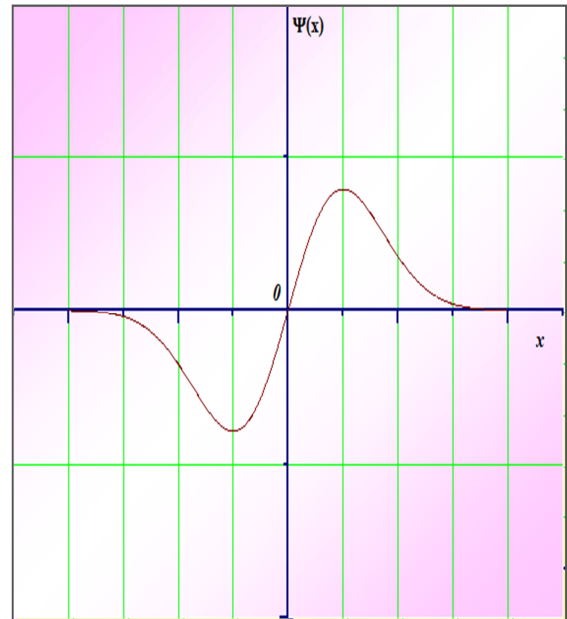


Fig III.6 Résultat exact de la fonction

$$\Psi_1(x) = \left(x - \frac{\partial}{\partial x}\right) \exp(-x^2/2)$$

- 3^{ème} état excité (n=2)

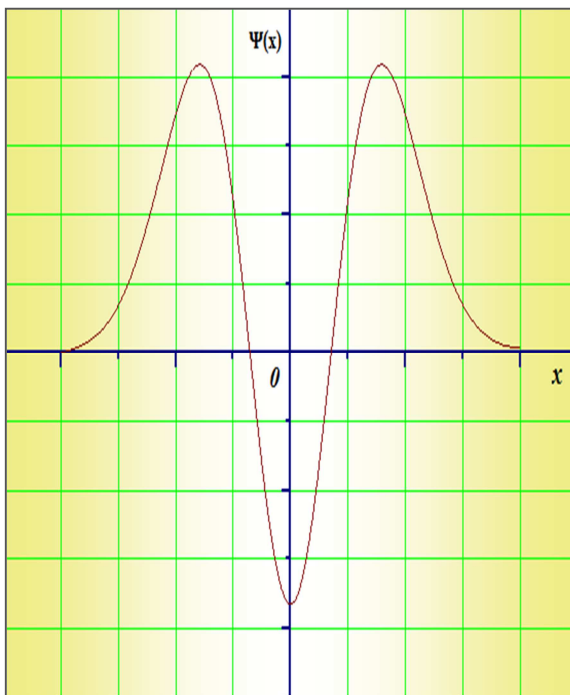


Fig III.7 Résultat numérique par MDF

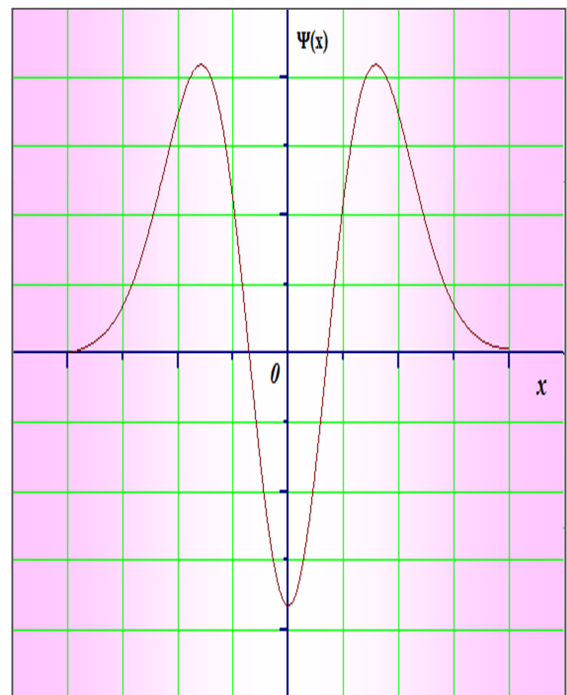


Fig III.8 Résultat exact de la fonction

$$\Psi_2(x) = \left(x - \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \exp(-x^2/2)$$

Les résultats obtenus sont satisfaisants car une comparaison avec les solutions exactes montre un très bon accord avec les résultats numériques.

II. Introduction

Parmi les méthodes de résolutions couramment pratiquées, **la méthode des différences finies (MDF)** est la plus facile d'accès, puisqu'elle repose sur deux notions : la discrétisation des opérateurs de dérivation/différentiation (assez intuitive) d'une part, et la convergence du schéma numérique ainsi obtenu d'autre part.

II.1. Définitions de la Méthode des différences finies (MDF) :

Cette méthode est basée sur la technique du développement en séries de Taylor qui permet d'approximer la valeur d'une fonction en un point donné si on connaît la valeur de la dite fonction ainsi que toute ces dérivées en un point voisin. Cette technique permet de développer des schémas pour remplacer les dérivées premières et secondes d'une fonction [18].

Une différence finie est une expression de la forme : $\Delta f(x) = f(x) - f'(x)$

II.1.1. Opérateurs de différences finis :

On note $y_i = f(x_i)$ C'est la valeur de la fonction $f(x)$ au point x_i

- **Opérateur différence avant :**

$$\Delta f(x) = f(x + h) - f(x) \quad \text{Où } h \text{ est le pas}$$

$$\Delta f(x_i) = f(x_{i+1}) - f(x_i)$$

$$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i \quad \text{où } y_i = f(x_i)$$

- **Opérateur différence arrière :**

$$\nabla f(x) = f(x) - f(x - h)$$

$$\nabla f(x_i) = f(x_i) - f(x_{i-1})$$

$$\nabla y_i = y_i - y_{i-1}$$

- **Opérateur différence centrées :**

$$\delta f(x) = f(x + h) - f(x - h)$$

$$\delta f(x_i) = f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})$$

$$\delta y_i = y_{i+1} - y_{i-1}$$

II.1.2. Relation avec la dérivée d'une fonction :

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \underbrace{\frac{f(x+h) - f(x)}{h}}_{\text{avant}} = \lim_{h \rightarrow 0} \underbrace{\frac{f(x) - f(x-h)}{h}}_{\text{arrière}} = \lim_{h \rightarrow 0} \underbrace{\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}}_{\text{centré}}$$

$$f'(x) \cong \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \frac{\Delta f(x)}{h}$$

$$f'(x) \cong \frac{f(x) - f(x-h)}{h} = \frac{\nabla f(x)}{h}$$

$$f'(x) \cong \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = \frac{\delta f(x)}{2h}$$

II.2. Résolution des équations différentielles par la méthode de différence finie :

Résolution des équations différentielles par la méthode de différence finie repose sur deux étapes [19].:

- **La discrétisation** : choix d'un nombre finie de points équidistants dans l'intervalle $[a, b]$, $(x_0 = a) \dots x_1, x_2, x_3, \dots (x_n = b)$

$$x_0 = a \quad , \quad x_1 = x_0 + h \quad , \quad x_2 = x_1 + h = x_0 + 2h \quad \dots \quad x_i = x_0 + i \times h$$

Avec : h est le pas $h = x_{i+1} - x_i$

- **Ecriture de l'équation différentielle en chaque point x_i :**

En remplacent les dérivées pour leur expressions obtenues par application de la méthode de des différences finies

II.2.1 Équation différentielle d'ordre 1 :

La forme générale d'une équation différentielle d'ordre 1 : (**Méthode Euler** [19].)

$$y'(x) + a(x)y(x) = b(x) \tag{II.1}$$

Qu'on peut écrire aussi sous la forme :

$$y'(x) = g(x, y) \quad \text{avec}$$

$$y(0) = y_0 \quad \text{Condition initiale} \quad x \in [a, b]$$

Après discrétisation $(x_0 = a) \dots x_1, x_2, x_3, \dots (x_n = b)$

On écrit l'équation différentielle $y'(x) = g(x, y)$ en chaque point x_i :

$$y'_i = g(x_i, y_i)$$

$$\frac{\Delta y_i}{h} = g(x_i, y_i) \quad \Rightarrow \quad \frac{y_{i+1} - y_i}{h} = g(x_i, y_i)$$

$$y_{i+1} = h \times g(x_i, y_i) + y_i \quad \text{Schéma récursif} \quad (\text{II.2})$$

Ce schéma permet de connaître la valeur approchée de la solution y_i en chaque point x_i

On calcule y_1 connaissant y_0 puis on calcule y_2 connaissant y_1 et ainsi de suite.

II.2.2 Équation différentielle du 2^{ème} ordre :

La forme générale d'une équation différentielle d'ordre 2 :

$$y''(x) + a(x)y'(x) + b(x)y(x) = c(x) \quad (\text{II.3})$$

- **Problème avec Condition initiale**

$$x \in [a, b]$$

$$y(a) = y_0$$

$$y'(a) = y'_0$$

$$y''(x_i) = y''_i = \frac{\Delta^2 y_i}{h^2}$$

$$\Delta^2 y_i = \Delta(y'_i) = \Delta(y_{i+1} - y_i) = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i$$

$$= (y_{i+2} - y_{i+1}) - (y_{i+1} - y_i)$$

$$\Delta^2 y_i = y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i \quad (\text{II.4})$$

On a une autre possibilité :

$$\Delta(\nabla y_i) = \Delta(y_i - y_{i-1}) = \Delta y_i - \Delta y_{i-1} = (y_{i+1} - y_i) - (y_i - y_{i-1})$$

$$\Delta(\nabla y_i) = y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1} \quad (\text{II.5})$$

En cherchant le schéma récursif :

$$y''(x) + a(x)y'(x) + b(x)y(x) = c(x)$$

On cherche la valeur approchée de y en tous les points : $[x_0 = a, x_1, x_2, x_3, \dots, x_n = b]$

$$\frac{\Delta^2 y_i}{h^2} + a(x_i) \frac{\Delta y_i}{h} + b(x_i)y(x_i) = c(x_i)$$

$$\frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i}{h^2} + a(x_i) \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + b(x_i)y(x_i) = c(x_i)$$

Ce qui donne le schéma récursif suivant :

$$\Rightarrow y_{i+2} = h^2 c_i + [2 - ha_i] y_{i+1} + [ha_i - h^2 b_i - 1] y_i \quad \text{Schéma récursif} \quad (\text{II.7})$$

On peut calculer y_1 à partir :

$$\begin{aligned} y(a) &= y_0 & y'(a) &= y'_0 \\ y'_0 &= \frac{\Delta y_0}{h} = \frac{y_1 - y_0}{h} \Rightarrow y_1 = hy'_0 + y_0 \end{aligned} \quad (\text{II.8})$$

2éme possibilité :

$$\begin{aligned} y''_i &= \frac{\Delta(\nabla y_i)}{h^2} \Rightarrow \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + a_i \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + b_i y(x_i) = c_i \\ &\Rightarrow [1 + ha_i]y_{i+1} = h^2 c_i + [2 + ha_i - h^2 b_i]y_i - y_{i-1} \\ y_{i+1} &= \frac{[h^2 c_i + [2 + ha_i - h^2 b_i]y_i - y_{i-1}]}{1 + ha_i} \end{aligned} \quad (\text{II.9})$$

On peut calculer y_{-1} à partir :

$$y'_0 = \frac{\nabla y_0}{h} = \frac{y_0 - y_{-1}}{h} \Rightarrow y_{-1} = -hy'_0 + y_0 \quad (\text{II.10})$$

• **Problème avec Condition initiale**

$$y''(x) + a(x)y'(x) + b(x)y(x) = c(x)$$

Avec : $x \in [a, b]$; $y(a) = \delta_1$; $y(b) = \delta_n$

$$y''_i = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \quad (\text{II.11})$$

$$\left. \begin{aligned} y'_i &= \frac{\Delta y_i}{h} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \\ y'_i &= \frac{\nabla y_i}{h} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \end{aligned} \right\} y'_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \quad (\text{II.12})$$

En remplaçant dans (II.3) :

$$\Rightarrow \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + a_i \left[\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \right] + b_i y(x_i) = c_i \quad (\text{II.13})$$

En rassemblant les termes :

$$q_i y_{i-1} + p_i y_i + r_i y_{i+1} = d_i \tag{II.14}$$

$$q_i = 2 - h a_i$$

$$p_i = 2h^2 b_i - 4$$

$$r_i = 2 + h a_i$$

$$d_i = 2h^2 c_i$$

$$q_1 y_0 + p_1 y_1 + r_1 y_2 = d_1 \quad , y_0 = y(x_0) = y(a) = \delta_1$$

$$p_1 y_1 + r_1 y_2 = d_1 - q_1 \delta_1$$

$$q_2 y_1 + p_2 y_2 + r_2 y_3 = d_2$$

$$q_3 y_2 + p_3 y_3 + r_3 y_4 = d_3$$

⋮

⋮

$$q_{n-1} y_{n-2} + p_{n-1} y_{n-1} + r_{n-1} y_n = d_{n-1}$$

$$q_{n-1} y_{n-2} + p_{n-1} y_{n-1} = d_{n-1} - r_{n-1} \delta_n$$

On écrit se forme matrice : $[A][Y] = [F]$

$$\begin{pmatrix} p_1 & r_1 & 0 & 0 & \dots \\ q_2 & p_2 & r_2 & 0 & \dots \\ 0 & q_3 & p_3 & r_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ \vdots \\ F_{n-1} \end{pmatrix}$$

$$F_1 = d_1 - q_1 \delta_1$$

$$F_2 = d_2 \quad , \quad F_3 = d_3$$

$$F_{n-1} = d_{n-1} - r_{n-1} \delta_n$$

On recherche les "y" par :

$$y_i = \frac{\det(A_i)}{\det(A)}$$

II.3 Résolution d'équation aux dérivées partielles :

$$f \left(u(x_1, x_2, \dots, x_n), \frac{\partial u}{\partial x_1}, \frac{\partial u}{\partial x_2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} \dots \right) = 0 \tag{II.15}$$

Exemple l'équation de Laplace $\Delta(u(x, y, z)) = 0$

Soit $u(x, y)$ une fonction de deux variable : $x \in [a, b]$ et $y \in [c, d]$, expression approchée des dérivés partielles [18]:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \cong \frac{u(x+h,y)-u(x,y)}{h} \tag{II.16}$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} \cong \frac{u(x,y+k)-u(x,y)}{k} \tag{II.17}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \cong \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \cong \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x+h,y) - \frac{\partial u}{\partial x}(x,y)}{h} \tag{II.18}$$

Quand on utilise le dérivé arrière, on trouve :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \cong \frac{u(x+h,y) - 2(u(x,y)) + u(x-h,y)}{h^2} \tag{II.19}$$

On discrétisé l'intervalle des : $x \in [a, b]$

$$x_0 = a, x_1 = x_0 + h \dots, x_i = x_0 + ih \dots$$

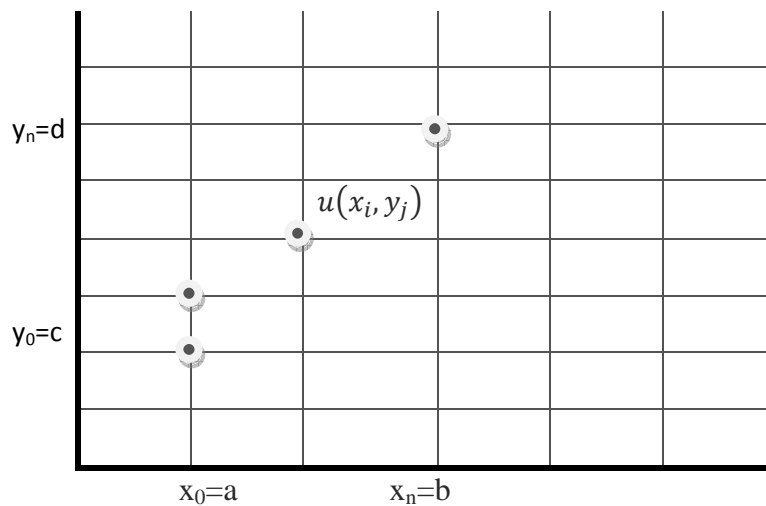
Puis on discrétisé l'intervalle des : $y \in [c, d]$

$$y_0 = c, y_1 = y_0 + k \dots, y_j = y_0 + jk \dots$$

Donc on a :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j) = \frac{u(x_{i+1}, y_j) - 2(u(x_i, y_j)) + u(x_{i-1}, y_j)}{h^2} \tag{II.20}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x_i, y_j) = \frac{u(x_i, y_{j+1}) - 2(u(x_i, y_j)) + u(x_i, y_{j-1})}{k^2} \tag{II.21}$$



On a :

$$x_i = x_0 + ih \quad , \quad h = \frac{b-a}{n}$$

$$y_j = y_0 + jk \quad , \quad k = \frac{c-d}{m}$$

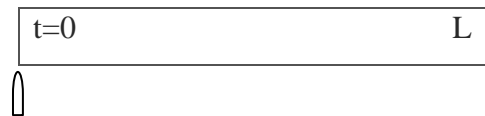
$$\frac{\partial^2 u_{ij}}{\partial x^2} = \frac{u_{i+1j} - 2u_{ij} + u_{i-1j}}{h^2} \tag{II.22}$$

On même chose pour y :

$$\frac{\partial^2 u_{ij}}{\partial y^2} = \frac{u_{ij+1} - 2u_{ij} + u_{ij-1}}{k^2} \tag{II.23}$$

II.3.1. Exemple de l'équation de la propagation de chaleur :

On chauffe un extrait d'une barre métallique [18].



$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u(x_i, t_j)}{\partial x^2}$$

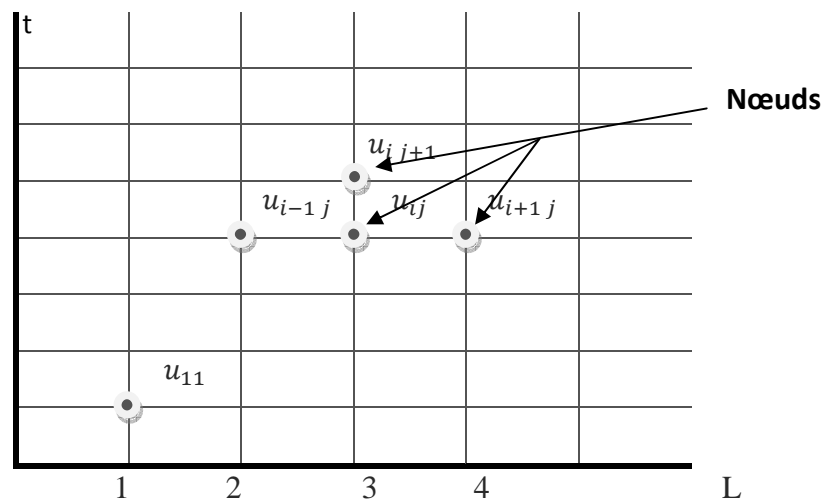
Avec a^2 le coefficient de propagation correspond au métal utilisé.

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{ij}}{k} = a^2 \frac{u_{i+1j} - 2u_{ij} + u_{i-1j}}{h^2} \tag{II.24}$$

$$u(x, 0) = \varphi(x)$$

$$u(L, t) = \Psi_1(t)$$

$$u(0, t) = \Psi_2(t)$$



Donc :

$$u_{ij+1} = \frac{ka^2}{h^2} [u_{i+1j} + u_{i-1j}] + \left[\frac{1}{k} - \frac{2a^2}{h^2} \right] u_{ij} \tag{II.25}$$

La connaissance des valeurs de $u(x, t)$ aux points (u_{i+1j}) , (u_{i-1j}) , (u_{ij}) permet de calculer la valeur de $u(x, t)$ au point $(i, j + 1)$.

Conclusion générale

Le travail de notre mémoire est concerné à la résolution de l'équation de Schrödinger par la méthode de différentielle finie on a testé le programme élaboré pour différents cas, particule libre et oscillateur harmonique les résultats obtenus sont satisfaisants car une comparaison avec les solutions exactes montre un très bon accord avec les résultats numériques.

Comme perspective il serait intéressant de généraliser le programme pour des cas plus complexes spécialement des problèmes à deux et trois dimensions

Références

- [1] **C. Chauvin, J. Math** : *Les ondelettes comme fonctions de base dans le calcul de structures électroniques*, I. N. Pol. de Grenobl, 2005.
- [2] **H. Löwen, J. Phys.:** *Condens. Matter* 15, V1 ,2003.
- [3] **R. J. Furnstahl, J. Phys.** G 31, S1357 ,2005.
- [4] **J.V. Lill, G.A. Parker, and J.C. Light, Chem. Phys. Lett.** 89, 483 (1982);
J.Chem. Phys. 85, 900 (1986).
- [5] **S. L. Altmann, C. J. Bradley, Proc. Phys. Soc. London** 86, 915 ,1965.
- [6] **M. Kossow, Annal. Phys: Quantum field theory and composite fermions in the fractional quantum Hall effect**, 18N5, 285-377, 2009.
- [7] **R. M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods**, Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [8] **Bouchriha Habib. Introduction à la physique quantique, cours et application** [Cours], Alger, 2002, p978.
- [9] **Najib.H. Généralités sur la quantification du rayonnement**, [Cours], Maroc, Fév, 2005.
- [10] **Christophe Texier. Mécanique Quantique I**, 2^{ème} édition, DUNOD, 5 Novembre 2014, p358.
- [11] **P. Amiot, L. Marleau. Mécanique Classique II**,U.Laval, 2006.
- [12] **L. Landau et E. Lifchitz. Mécanique quantique**, EMIR, Moscou, 1966.
- [13] **C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Mécanique quantique**, Hermann, Paris, 1977, p1509.
- [14] **Pérez, Carles, Pujol. Quantique fondements et applications**, de boeck, Paris, Septembre 2013, p136.

- [15] **Jeam Hladik, Michel Chysoss et Al.** *MECANIQUE QUANTIQUE Atomes et noyaux*, Application technologique, 3^{ème} édition, Dunod, Paris, 2009, p79.
- [16] **Jeam Hladik, Michel Chysoss.** *Introduction à la mécanique quantique cours et exercices corrigés*, 1^{ème} édition, Dunod, Paris, 2000, p119-122.
- [17] **Jeam Hladik, Michel Chysoss et Al.** *MECANIQUE QUANTIQUE Atomes et noyaux*, Application technologique, 3^{ème} édition, Dunod, Paris, 2009, p14-15.
- [18] Jean-Morc Huré. METHODES NUMERIQUES Elément d'un premier parcours,p232.
- [19] Franck.Jedrzejewski. Introduction à la méthode numérique, 2^{ème} édition, Paris, P167.
- [20] **Numerov, Boris Vasil'evich** , *A method of extrapolation of perturbations*, 1924.