

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Abdelhamid Ben Badis - Mostaganem
Faculté des Sciences Exactes et de l'Informatique



Projet de fin d'étude

Présenté en vue d'obtenir le diplôme de MASTER

SPECIALITE : Physique des Matériaux

Elaboré par

Lionnel SANGARE

*Résolution du problème de potentiel central à trois dimensions par le biais de
la mécanique matricielle*

Encadré par

M^r. BELHOUARI Aïssa

Année universitaire
2017 - 2018

Remerciements

En préambule de ce mémoire je tiens à saisir cette occasion et adresser mes remerciements les plus sincères et mes profondes reconnaissances à Monsieur, BELHOUARI Aïssa, qui, en tant que mon encadreur, il s'est toujours montré à l'écoute et très disponible tout au long de l'élaboration de ce mémoire, ainsi pour l'inspiration, l'aide et le temps qu'il a bien voulu me consacrer et sans qui ce mémoire n'aurait jamais vu le jour.

Je tiens à exprimer ma gratitude aux membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail en acceptant de l'examiner et de valoriser par leurs discernements.

Je remercie également l'ensemble des professeurs qui m'ont accueilli dans leur classe, en me donnant leurs précieux enseignements et qui par leurs compétences m'ont soutenu tout au long de mes études.

Enfin, je remercie particulièrement à toutes les personnes de la Faculté des Sciences Exactes et de l'Informatique, qui ont soutenu ce travail.

Merci à tous et à toutes.

Dédicaces

Je dédie ce mémoire

A mes parents pour leur amour inestimable, leur confiance, leur soutien, leurs sacrifices
et toutes les valeurs qu'ils ont su m'inculquer.

A tous les enseignants qui ont accepté de consacrer de leur temps pour mes études.

Table des matières

Dédicace	
Remerciement	
Liste des Figures	
Liste des Tableaux	
Introduction Générale.....	1
Chapitre 1 Le problème du potentiel central.....	2
1.1 Introduction	2
1.2 Résolution de l'équation de Schrödinger.....	3
1.2.1 Les polynômes de Legendre.....	6
1.2.2 Harmonique sphérique	7
1.2.3 L'équation radiale	7
1.3 Exemple de système soumis à un potentiel central	8
1.3.1 L'oscillateur harmonique à trois dimensions	8
1.3.1.1 Résolution de l'équation de radiale	8
1.3.1.2 Les fonctions d'ondes standards	10
1.3.1.3 Les niveaux d'énergies.....	11
1.3.2 L'atome d'hydrogène	13
1.3.2.1 Problème à deux corps	14
1.3.2.2 L'équation radiale	17
1.3.2.3 Le comportement asymptotique	17
1.3.2.4 Les niveaux d'énergies	19
1.3.2.5 Les fonctions propres	20
1.4 Conclusion.....	25
Chapitre 2 Résolution numérique de l'équation différentielle et du problème aux valeurs propres	26
2.1 Introduction	26
2.2 Résolution numérique de l'équation différentielle par la méthode des différences finies	26

2.2.1	Définition des différences finies	26
2.2.2	Opérateurs des différences finies	26
2.2.3	Relation entre les opérateurs des différentielles et les dérivées d'une fonction	27
2.2.3.1	Equation différentielle d'ordre 1	28
2.2.3.2	Equation différentielle du 2ème ordre.....	29
2.3	Equation différentielle aux dérivées partielles	33
2.4	Exemple d'équation de la propagation de chaleur.....	35
2.5	Application de l'équation de Schrodinger	36
2.5.1	Introduction	36
2.5.2	Application de méthode différentielle finie à trois points.....	36
2.6	Le problème aux valeurs propres.....	40
2.6.1	Transformations de Jacobi d'une matrice symétrique.....	41
2.2	Conclusion	42
Chapitre 3 Application à la mécanique matricielle		43
3.1	Introduction	43
3.2	Formulation du problème de la mécanique matricielle	43
3.2.1	Le potentiel de Coulomb	45
3.2.1	Le potentiel de Yukawa.....	53
3.3	Conclusion	57
Conclusion Générale		58
Annexe A.....		59
Annexe B.....		62
Bibliographie.....		73

Liste des figures

Chapitre 2 : Résolution numérique de l'équation différentielle et du problème aux valeurs propres

Figure N°	Titre de la figure	Page
Figure 2.1	Les résultats du potentiel de l'état fondamental pour l'oscillateur harmonique.	46
Figure 2.2	Le résultat du potentiel pour l'oscillateur harmonique au 1 ^{er} état excité.	47
Figure 2.3	Le résultat du potentiel pour l'oscillateur harmonique au 2 ^{ème} état excité.	48

Chapitre 3 : La mécanique matricielle

Figure N°	Titre de la figure	Page
Figure 3.1	Les différents potentiels plongés dans le puits infini Réf [6].	44
Figure 3.2	La variation du rapport $\frac{E_n}{E_0}$ pour le potentiel de Coulomb en fonction de n.	49
Figure 3.3	Les fonctions d'ondes radiales en fonction de r.	52
Figure 3.4	La variation du rapport $\frac{E_n}{E_0}$ pour le potentiel de Yukawa en fonction de μ .	56
Figure 3.5	La fonction d'onde de l'état fondamental en fonction de la coordonnée radiale, r, pour différentes valeurs du paramètre, μ , tandis que A a été varié pour garder l'énergie d'état fixée, $E_1 = -E_0$.	56
Figure 3.6	La fonction $u(r) \equiv rR_{10}(r)$ en fonction de la coordonnée radiale, r, pour différentes valeurs du paramètre du μ , alors que A est maintenu constant à l'unité.	57

Liste des tableaux

Chapitre 3 : La mécanique matricielle

Tableau N°	Titre du tableau	Page
Tableau 3.1	Les résultats de l'énergie pour $a/a_0 = 10$.	8
Tableau 3.2	Les résultats de l'énergie pour $a/a_0 = 20$.	8
Tableau 3.3	Les résultats de l'énergie pour $a/a_0 = 50$.	9
Tableau 3.4	Les énergies de l'état fondamental ($A = 1$) en unités de E_0 , comparées à celles de Réf. [6].	11

RÉSUMÉ

Dans cet mémoire, nous avons montré comment on peut utiliser la mécanique matricielle, avec le plus simple des bases, réussir à obtenir des résultats numériques très précis pour les niveaux bas pour tout potentiel essentiellement tridimensionnel découlant des forces centrales qui prennent en charge les états liés. Les mathématiques nécessaires pour le faire sont minimales. Les énergies d'état lié et les fonctions d'ondes peuvent être facilement obtenues avec la méthodologie décrite ici. Les résultats ont été démontrés pour le potentiel de Coulomb, et le potentiel de Yukawa. Nous avons été en mesure de reproduire le résultat du potentiel de Yukawa.

SUMMARY

In this paper, we have shown how one can use matrix mechanics, with the simplest of bases, to succeed in obtaining very precise numerical results for the low levels for any essentially three-dimensional potential resulting from the central forces that support the bound states. The mathematics needed to do it is minimal. Bound state energies and wave functions can be easily obtained with the methodology described here. The results have been demonstrated for the potential of Coulomb, and the potential of Yukawa. We have been able to replicate the result of Yukawa's potential.

Introduction

Le but majeur pour n'importe quel problème en mécanique quantique est la solution des équations de Schrödinger. Pour un système soumis à un potentiel central, c'est-à-dire dans lequel le potentiel est une fonction uniquement de la distance de l'origine, l'équation de Schrödinger est séparable en coordonnées sphériques, la partie angulaire est déterminée analytiquement, en termes d'harmoniques sphériques. La solution de la partie radiale de la fonction d'onde nécessite généralement des mathématiques un peu avancées pour résoudre l'équation différentielle associée pour cela d'autres alternatives ont été envisagées comme la méthode basée sur la mécanique matricielle

Dans ce travail nous présenterons une application de cette méthode pour des cas déjà étudiés dans d'autres travaux Réf [6] nous essayerons de reproduire les résultats obtenus dans cet article pour pouvoir faire une comparaison de nos résultats.

Nous proposons donc une méthode numérique à usage général pour résoudre des problèmes impliquant les forces centrales en trois dimensions. Cette méthode suit celle déjà développée pour un potentiel unidimensionnel dans la Réf [9]. La vertu de cette approche est qu'il ne nécessite des notions avancées d'algèbre linéaire et de calcul d'intégrale.

Nous commençons par un exemple qui peut être abordé par des méthodes standard, le potentiel de Coulomb, spécifiquement pour l'atome d'hydrogène. De cette façon, nous pouvons vérifier facilement nos résultats.

Nous examinerons aussi des solutions pour le potentiel de Yukawa, un potentiel utile tant dans la physique nucléaire et dans la physique de la matière condensée, où il est utilisé pour modéliser les interactions de Coulomb. Des solutions pour ce potentiel nécessitent généralement des méthodes avancées de perturbation ou méthodes variationnelles.

Le problème du potentiel central

Table des matières

1.1	Introduction	2
1.2	Résolution de l'équation de Schrödinger.....	3
1.2.1	Les polynômes de Legendre.....	6
1.2.2	Harmonique sphérique	7
1.2.3	L'équation radiale	7
1.3	Exemple de système soumis à un potentiel central	8
1.3.1	L'oscillateur harmonique à trois dimensions	8
1.3.1.1	Résolution de l'équation de radiale	8
1.3.1.2	Les fonctions d'ondes standards	10
1.3.1.3	Les niveaux d'énergies	11
1.4	L'atome d'hydrogène	13
1.4.1	Problème à deux corps	14
1.4.1.1	L'équation radiale	17
1.4.1.2	Le comportement asymptotique	17
1.4.1.3	Les niveaux d'énergies.....	19
1.4.1.4	Les fonctions propres	20
1.5	Conclusion.....	25

Le problème du potentiel central

Table des matières

1.1	Introduction	2
1.2	Résolution de l'équation de Schrödinger.....	3
1.2.1	Les polynômes de Legendre.....	6
1.2.2	Harmonique sphérique	7
1.2.3	L'équation radiale	7
1.3	Exemple de système soumis à un potentiel central	8
1.3.1	L'oscillateur harmonique à trois dimensions	8
1.3.1.1	Résolution de l'équation de radiale	8
1.3.1.2	Les fonctions d'ondes standards	10
1.3.1.3	Les niveaux d'énergies.....	11
1.3.1	L'atome d'hydrogène	13
1.3.2.1	Problème à deux corps	14
1.3.2.2	L'équation radiale	17
1.3.2.3	Le comportement asymptotique	17
1.3.2.4	Les niveaux d'énergies.....	19
1.3.2.5	Les fonctions propres	20
1.4	Conclusion.....	25

Le problème du potentiel central

1.1 Introduction

Un potentiel est dit central s'il dépend seulement du module de \vec{r} , c'est-à-dire une énergie potentielle qui ne dépend que de la distance r à l'origine:

$$V(\vec{r}) = V(x, y, z) = V(|\vec{r}|) = V(r) = V(x^2 + y^2 + z^2). \quad (1.1)$$

Pour un potentiel central, et pour une particule de masse m , l'hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \quad (1.2)$$

Un exemple de potentiel central est le potentiel de Coulomb entre les charges électriques des particules:

$$V_{\text{Coul}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (1.3)$$

Le moment cinétique orbital joue un rôle fondamental dans tous les problèmes de potentiel central, le système approprié à utiliser dans ce cas est le système de coordonnées sphériques définie par r, θ et φ ($r \geq 0, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$):

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \quad y = r \sin \theta \sin \varphi \quad z = r \cos \theta$$

Les expressions du moment cinétique \vec{L} ainsi que ses composantes à l'aide des coordonnées sphériques sont

$$\vec{L} = -i\hbar \times \vec{\nabla} \quad \text{avec} \quad \vec{\nabla} = u_r \frac{\partial}{\partial r} + u_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + u_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$L_x = i\hbar \left[\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

$$L_y = i\hbar \left[\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (1.4)$$

A cause de la symétrie sphérique l'hamiltonien \hat{H} ; commute avec toutes les composantes de moment cinétique \vec{L} :

$$[\hat{H}, \vec{L}] = 0; [\hat{H}, L^2] = 0; [\hat{H}, \vec{L}_z] = 0 \quad (1.5)$$

$\{\hat{H}, L^2, \vec{L}_z\}$ Forment un ECOOC (ensembles complets d'observables qui commutent)

Soit $|n, l, m\rangle$ est un vecteur propre commun à \hat{H}, L^2 et \vec{L}_z

On a:

$$\begin{aligned} \hat{H}|n, l, m\rangle &= E|n, l, m\rangle \\ L^2|n, l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|n, l, m\rangle \\ L_z|n, l, m\rangle &= \hbar m|n, l, m\rangle \end{aligned}$$

Où l est un entier positif ou nul $-1 \leq m \leq +1$, prenant ainsi $(2l+1)$ valeurs.

L^2 et L_z sont deux opérateurs dont on connaît l'expression en représentation de r , donc il est facile d'écrire les équations différentielles exprimant leurs équations aux valeurs propres.

Si $\psi(r, \theta, \varphi)$ est une fonction propre de $\{\hat{H}, L^2, \vec{L}_z\}$

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \langle \vec{r} | n, l, m \rangle = \langle \vec{r} | \psi_{nlm} \rangle$$

$$\hat{H}\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = E\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \quad (1.6)$$

$$L^2\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1)\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \quad (1.7)$$

$$L_z\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \hbar m\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \quad (1.8)$$

1.2 Résolution de l'équation de Schrödinger

En mécanique quantique la résolution de l'équation consiste à déterminer les niveaux E_n et les fonctions propres associées $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$. Puisque le potentiel ne dépend que de la distance de l'origine, l'hamiltonien possède une symétrie sphérique. Il est donc pratique de représenter l'équation de Schrödinger en termes du système de coordonnées sphériques standard. Le Laplacien dans ce système de coordonnées est donné par :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Avec

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

L'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques s'écrit :

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = E_n \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \quad (1.9)$$

L'approche standard pour résoudre les équations différentielles partielles consiste à utiliser la méthode de séparation des variables. Nous supposons que la fonction d'onde est un produit de fonctions dépendant chacune d'une seule variable.

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

$$L^2\Theta(\theta)\Phi(\varphi) = \lambda\hbar^2\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

Avec

$$\lambda = l(l+1)$$

Il devient :

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \Theta(\theta)\Phi(\varphi) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \{ \Theta(\theta)\Phi(\varphi) \} = -\lambda\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \quad (1.10)$$

$$\Rightarrow \frac{\Phi(\varphi)}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{\Theta(\theta)}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} = -\lambda\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

$$\Rightarrow \frac{\Phi(\varphi)}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{\Theta(\theta)}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -\lambda\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

En divisant par : $\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$

On trouve :

$$\frac{1}{\Theta(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi(\varphi) \sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -\lambda$$

En multipliant par : $\sin^2 \theta$

$$\frac{\sin \theta}{\Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -\lambda \sin^2 \theta$$

On obtient :

$$\frac{\sin \theta}{\theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\theta(\theta)}{d\theta} \right) + \lambda \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} \quad (1.11)$$

Notez que seul le dernier terme dépend de φ et qu'aucune autre variable n'apparaît dans ce terme. Cette équation peut être vraie pour toutes les valeurs de r, θ et φ seulement si le dernier terme est égal à une constante.

$$L_z \Theta(\theta) \Phi(\varphi) = \hbar m \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

Avec

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Cela implique

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \{ \Theta(\theta) \Phi(\varphi) \} &= \hbar m \{ \Theta(\theta) \Phi(\varphi) \} \\ \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \Phi(\varphi)}{\partial \varphi} \{ \Theta(\theta) \} &= \hbar m \Phi(\varphi) \{ \Theta(\theta) \} \end{aligned}$$

On simplifie par : $\Theta(\theta)$

$$\Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \Phi(\varphi)}{\partial \varphi} = \hbar m \Phi(\varphi) \quad \Rightarrow \frac{\partial \Phi(\varphi)}{\partial \varphi} = im \Phi(\varphi) \quad \Rightarrow \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} = im \Phi(\varphi)$$

$$\Rightarrow \frac{d\Phi(\varphi)}{\Phi(\varphi)} = im d\varphi \quad \Rightarrow \int \frac{d\Phi(\varphi)}{\Phi(\varphi)} = im \int d\varphi \quad \Rightarrow \Phi(\varphi) = k e^{im\varphi}$$

La normalisation :

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} | \Phi(\varphi) |^2 d\varphi &= 1 \\ \Rightarrow \int_0^{2\pi} | \Phi(\varphi) |^2 d\varphi &= \int_0^{2\pi} k e^{im\varphi} k^* e^{-im\varphi} d\varphi = |k|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi |k|^2 \\ \Leftrightarrow 2\pi |k|^2 &= 1 \Rightarrow |k|^2 = \frac{1}{2\pi} \Rightarrow |k| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \end{aligned}$$

D'où

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (1.12)$$

Maintenant pour déterminer $\Theta(\theta)$ on sait que:

$$\frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} = im \Phi(\varphi) \quad (1.13)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = im \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} = i^2 m^2 \Phi(\varphi) = -m^2 \Phi(\varphi)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -m^2\Phi(\varphi) \quad \Rightarrow -\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = m^2$$

En utilisant l'équation (1.11) on aura

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \lambda \sin^2\theta = m^2 \quad (1.14)$$

En divisant par : $\sin^2\theta$

$$\Rightarrow \frac{1}{\Theta(\theta) \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta} = 0$$

En multipliant par: $\Theta(\theta)$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \left[\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right] \Theta(\theta) = 0 \quad (1.15)$$

C'est l'équation différentielle de Legendre dont les solutions sont les polynômes de Legendre

$$\Theta_1^m(\theta) = C_1^m P_1^m(\cos\theta)$$

$$Y_1^m(\theta, \varphi) = C_1^m P_1^m(\cos\theta) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

1.2.1 Les polynômes de Legendre

On définit les polynômes de Legendre :

$$P_1^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_1(x), \quad m > 0$$

$$P_1^m(x) = (-1)^m \frac{(1+m)!}{(1-m)!} P_1^{|m|}(x), \quad m < 0$$

$$\int_{-1}^1 P_1^m(x) P_1^{m'}(x) dx = \left(\frac{2}{2l+1} \right) \frac{(1+m)!}{(1-m)!} \delta_{11'}$$

$$\Theta_1^m(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \sqrt{\frac{(1-m)!}{(1+m)!}} P_1^m(\cos\theta)$$

$$\int \Theta_1^m(\theta) \Theta_1^{m'}(\theta) \sin\theta d\theta = \delta_{11'}$$

1.2.2 Harmonique sphérique

Nous avons maintenant des solutions pour les fonctions angulaires $\Phi(\varphi)$ et $\Theta(\theta)$. Il est commode de les combiner en une seule fonction normalisée des deux angles. Ces fonctions sont appelées les harmoniques sphériques et sont définies comme :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) \frac{e^{-im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

En particulier,

$$Y_l^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$$

La définition des fonctions de Legendre associées au négatif m peut être utilisée pour montrer que

$$Y_l^m(\theta, \varphi)^* = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \varphi)$$

Les harmoniques sphériques satisfont la condition d'orthogonalité

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_l^{m'}(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta, \varphi)^* = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

1.2.3 L'équation radiale

C'est l'équation aux valeurs propres pour la coordonnée radiale et puisqu'elle dépend explicitement de l'entier l , les fonctions propres seront généralement représentées par $R_{nl}(r)$.

Les solutions complètes de l'équation de Schrödinger peuvent alors être écrites comme

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \tag{1.16}$$

La partie angulaire $Y_l^m(\theta, \varphi)$ de la fonction d'onde est déjà déterminée il reste maintenant la partie radiale $R_{nl}(r)$

L'équation de Schrödinger en coordonnées sphérique s'écrit :

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = E_n \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \tag{1.17}$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = E_n R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r R_{nl}(r)) Y_l^m(\theta, \varphi) + \frac{L^2}{2mr^2} Y_l^m(\theta, \varphi) R_{nl}(r) + V(r) R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = E_n R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \tag{1.18}$$

Or

$$\begin{aligned} L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r R_{nl}(r)) Y_l^m(\theta, \varphi) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} Y_l^m(\theta, \varphi) R_{nl}(r) + V(r) R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \\ &= E_n R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

En simplifiant par : $Y_l^m(\theta, \varphi)$

On obtient :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r R_{nl}(r)) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R_{nl}(r) + V(r) R_{nl}(r) &= E_n R_{nl}(r) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r R_{nl}(r)) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_{nl}(r) &= E_n R_{nl}(r) \end{aligned} \quad (1.19)$$

On pose $u_{nl}(r) = r R_{nl}(r)$

L'équation devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{nl}(r)}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) u_{nl}(r) = E_n u_{nl}(r)$$

Où

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} u_{nl}''(r) + V_{\text{eff}}(r) u_{nl}(r) = E_n u_{nl}(r) \quad (1.20)$$

1.3 Exemple de système soumis à un potentiel central

1.3.1 L'oscillateur harmonique à trois dimensions

Nos objectifs sont:

- Résoudre l'équation radiale
- Trouver des niveaux d'énergie et des fonctions d'ondes stationnaires

1.3.1.1 Résolution de l'équation radiale

Considérons une particule de masse sans spin m soumis au potentiel

Dans le cas de l'oscillateur harmonique, le potentiel est :

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) \quad (1.21)$$

Puisque l'oscillateur est isotrope, nous pouvons utiliser les coordonnées sphériques et le potentiel central :

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \quad (1.22)$$

Où

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \quad (1.23)$$

L'équation radiale devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) + \left[\frac{1}{2} m \omega^2 r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] u(r) = E_n u(r) \quad (1.24)$$

$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ De carré sommable \Rightarrow elle est finie en tout point

Les fonctions d'onde pour les états liés doivent être normalisables. C'est

$$\int d^3 r \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \psi_{nlm}^*(r, \theta, \varphi) = 1$$

Cela implique que

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} R(r) R^*(r) Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^{m*}(\theta, \varphi) r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi &= 1 \\ \Rightarrow \int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi &= 1 \end{aligned}$$

Dans la théorie générale du moment cinétique, il a toujours été supposé que les vecteurs propres sont de norme finie ; cette propriété, jointe aux relations caractéristiques de commutation et au confinement des variables angulaires, est à l'origine de la quantification des nombres l et m , ceci impose aux fonctions Y_l^m d'être de module carré sommable.

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

D'où

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = 1 \Rightarrow \int_0^\infty |u(r)|^2 dr = 1$$

$R(r)$ finie au point 0

$$\text{Donc } \lim_{r \rightarrow 0} r R(r) = \lim_{r \rightarrow 0} u(r) = 0$$

Pour le comportement asymptotique :

Quand $r \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{1}{r^2} \rightarrow 0$ et l'équation radiale devient

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 u(r) = 0$$

Car quand $r \rightarrow \infty$ il y a aucune information sur $u''(r)$ et $\frac{1}{2} m\omega^2 r^2$ est assez grand alors que

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \rightarrow 0 \text{ Donc négligeable}$$

Les solutions de cette équation sont : $u(r) \sim e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$

Quand $r \rightarrow 0$ et l'équation radiale devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} u(r) = 0$$

Les solutions sont de la forme : $u(r) \sim r^{l+1}$

Ceux qui implique que :

$$u(r) \sim r^{l+1} f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$$

1.3.1.2 Les fonctions d'ondes standards

On injecte $u(r)$ dans l'équation radiale (voir l'annexe 1) on obtient :

$$f''(r) + 2 \left[\frac{l(l+1)}{r} - \frac{m\omega r}{\hbar} \right] f'(r) + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar} (2l+3) \right] f(r) = 0 \quad (1.25)$$

On a :

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$u_{nl}(r) \sim r^{l+1} f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$$

$$\Rightarrow \frac{u_{nl}(r)}{r} = R_{nl}(r) \sim r^l f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$$

$$\Rightarrow \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \sim r^l f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.26)$$

Avec

$$f(r) = \sum_{p=0}^n a_{2p} r^{2p}$$

La fonction d'onde de l'état fondamental

$$n = 0 \Rightarrow f(r) = \sum_{p=0}^{n=0} a_{2p} r^{2p} = a_0$$

$$\Rightarrow f(r) = a_0$$

Et

$$\psi_{000}(r, \theta, \varphi) = R_{00}(r)Y_0^0(\theta, \varphi)$$

$$\Rightarrow \psi_{000}(r, \theta, \varphi) = a_0 e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} Y_0^0(\theta, \varphi)$$

Avec $Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$$\Rightarrow \psi_{000}(r, \theta, \varphi) = a_0 e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{1.27}$$

Au premier état excité

$$n = 1 \Rightarrow f(r) = \sum_{p=0}^{n=1} a_{2p} r^{2p} = a_0 + a_2 r^2$$

$$\Rightarrow f(r) = a_0 + a_2 r^2$$

Et

$$\psi_{100}(r, \theta, \varphi) = R_{10}(r)Y_0^0(\theta, \varphi)$$

$$\Rightarrow \psi_{100}(r, \theta, \varphi) = (a_0 + a_2 r^2) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} Y_0^0(\theta, \varphi)$$

$$\Leftrightarrow \psi_{100}(r, \theta, \varphi) = (a_0 + a_2 r^2) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{1.28}$$

1.3.1.3 Les niveaux d'énergies

En utilisant la méthode des séries entières on pose que :

$$f(r) = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n$$

$$\Rightarrow f'(r) = \sum n a_n r^{n-1} \quad f''(r) = \sum n(n-1) a_n r^{n-2}$$

L'équation radiale devient :

$$\sum_{n=0}^{+\infty} n(n-1) a_n r^{n-2} + 2 \left[\frac{(l+1)}{r} - \frac{m\omega r}{\hbar} \right] \sum_{n=0}^{+\infty} n a_n r^{n-1} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar} (2l+3) \right] \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n = 0$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \sum_{n=0}^{+\infty} n(n-1)a_n r^{n-2} + 2(1+1) \sum_{n=0}^{+\infty} n a_n r^{n-2} - \frac{2m\omega}{\hbar} \sum_{n=0}^{+\infty} n a_n r^n + \frac{2mE}{\hbar^2} \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n \\ - \frac{m\omega}{\hbar} (2l+3) \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n = 0 \\ \Rightarrow \sum_{n=0}^{+\infty} n(n+2l+1)a_n r^{n-2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2m\omega n}{\hbar} - \frac{m\omega}{\hbar} (2l+3) \right] \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n = 0 \end{aligned}$$

Pour $n \rightarrow n+2$

On a :

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{+\infty} n(n+2l+1)a_n r^{n-2} &= \sum_{n=0}^{+\infty} (n+2)(n+2+2l+1)a_{n+2} r^n \\ \Rightarrow \sum_{n=0}^{+\infty} n(n+2l+1)a_n r^{n-2} &= \sum_{n=0}^{+\infty} (n+2)(n+2l+3)a_{n+2} r^n \\ \Leftrightarrow \sum_{n=0}^{+\infty} (n+2)(n+2l+3)a_{n+2} r^n + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar} (2n+2l+3) \right] \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{n=0}^{+\infty} \left\{ (n+2)(n+2l+3)a_{n+2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar} (2n+2l+3) \right] a_n \right\} r^n &= 0 \\ \Rightarrow (n+2)(n+2l+3)a_{n+2} = \left[\frac{m\omega}{\hbar} (2n+2l+3) - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] a_n &\quad (1.29) \end{aligned}$$

Pour $n = 0$

$$2(2l+3)a_2 = \left[\frac{m\omega}{\hbar} (2l+3) - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] a_0$$

Pour $n = 1$

$$3(2l+4)a_3 = \left[\frac{m\omega}{\hbar} (2l+5) - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] a_1$$

$$a_1 = 0 \Rightarrow a_3 = 0$$

Donc $a_{2p+1} = 0$, $\forall p$

Tous les coefficients s'expriment en fonction de a_0

$$\sum_{n=0}^{+\infty} a_{2n} r^{2n} = a_0 + a_2 r^2 + a_4 r^4 + a_6 r^6 + \dots\dots\dots$$

$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ De carré sommable cela implique

$$f(r) = \sum_{n=0}^p a_{2n} r^{2n}$$

C'est-à-dire que :

$$a_{p+2} = a_{p+4} = \dots = 0$$

$$(n+2)(n+2l+3)a_{n+2} = \left[\frac{m\omega}{\hbar} (2n+2l+3) - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] a_n \quad (1.30)$$

Si $n = p$

$$0 = \left[\frac{m\omega}{\hbar} (2p+2l+3) - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] a_p$$

Avec $a_p \neq 0$

Cela implique

$$\begin{aligned} \frac{m\omega}{\hbar} (2p+2l+3) - \frac{2mE}{\hbar^2} &= 0 \\ \Rightarrow E &= \frac{\hbar\omega}{2} (2(p+l)+3) \end{aligned}$$

En posant que : $N = p + l$

$$\Rightarrow E_N = \hbar\omega \left(N + \frac{3}{2} \right)$$

1.3.2 L'atome d'hydrogène

L'atome d'hydrogène est un système de deux particules: proton, de masse m_p et de charge q , et d'électron, de masse m_e et de charge $-q$

$$m_p = 1.710^{-27} \text{ kg}$$

$$m_e = 0.910^{-30} \text{ kg}$$

$$q = 1.610^{-19} \text{ Coulomb}$$

Le but : La détermination des énergies et les fonctions propres par la solution de l'équation de Schrödinger $\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$

$$\hat{H} = T + V = T_e + T_p + V$$

$T_e = \frac{p_e^2}{2m_e} \rightarrow$ Énergie cinétique de l'électron E_c

$T_p = \frac{p_p^2}{2m_p} \rightarrow$ Énergie cinétique du proton

L'hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{p_p^2}{2m_p} + V(|\vec{r}_e - \vec{r}_p|) \quad (1.31)$$

Pour l'atome d'hydrogène, le potentiel qui dépend de la distance r entre le proton et l'électron est :

$$V(|\vec{r}_e - \vec{r}_p|) = -\frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_p|} \quad (1.32)$$

\vec{r}_e : Rayon vecteur de l'électron

\vec{r}_p : Rayon vecteur de proton

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_p} \Delta_p - \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_p|} \quad (1.33)$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_p} \Delta_p - \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_p|} \right] \psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p) = E \psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p) \quad (1.34)$$

$$\Delta_e = \frac{\partial^2}{\partial x_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \quad \text{et} \quad \Delta_p = \frac{\partial^2}{\partial x_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_p^2}$$

1.3.2.1 Problème à deux corps

Considérons deux particules sans spin de masses m_1 et m_2 et les positions \vec{r}_1 et \vec{r}_2 respectivement, et supposons que la force entre les particules dérive d'un potentiel

$$V(r) = V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

L' hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{1}{2} m_1 V_1^2 + \frac{1}{2} m_2 V_2^2 + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \quad (1.35)$$

L'étude du mouvement des deux particules est simplifiée en introduisant les coordonnées du

centre de masse $\vec{R}_c = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$

Les coordonnées relatives $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

Où M est la masse totale du système

$$M = m_1 + m_2$$

On a :

$$\begin{aligned}\vec{r}_1 &= \vec{R}_c + \frac{m_2}{M} \vec{r} \quad \text{et} \quad \vec{r}_2 = \vec{R}_c - \frac{m_1}{M} \vec{r} \\ \vec{v}_1 &= \frac{d\vec{r}_1}{dt} = \vec{V}_c + \frac{m_2}{M} \vec{V} \quad \text{et} \quad \vec{v}_2 = \frac{d\vec{r}_2}{dt} = \vec{V}_c - \frac{m_1}{M} \vec{V} \\ \vec{v}_c &= \frac{d\vec{R}_c}{dt} \quad \text{et} \quad \vec{V} = \frac{d\vec{r}}{dt}\end{aligned}$$

L'hamiltonien devient :

$$\hat{H} = \frac{1}{2} m_1 \left(\vec{V}_c + \frac{m_2}{M} \vec{V} \right)^2 + \frac{1}{2} m_2 \left(\vec{V}_c - \frac{m_1}{M} \vec{V} \right)^2 + V(r) \quad (1.36)$$

Qui peut être réécrit en termes de nouvelles coordonnées comme :

$$\hat{H} = \frac{1}{2} M V_c^2 + \frac{1}{2} \mu V^2 + V(r) = \hat{H}_c + \hat{H}_r \quad (1.37)$$

Où μ est la masse réduite :

$$\text{Avec} \quad \mu = \frac{m_1 \times m_2}{M}$$

On peut écrire :

$$\hat{H}_c = \frac{1}{2} M V_c^2 \quad \text{et} \quad \hat{H}_r = \frac{1}{2} \mu V^2 + V(r)$$

\hat{H}_c et \hat{H}_r commute : $[\hat{H}_c, \hat{H}_r] = 0$

Et satisfont ainsi les équations aux valeurs propres avec le vecteur propre commun

$$\hat{H}_c |\psi\rangle = E_c |\psi\rangle$$

$$\hat{H}_r |\psi\rangle = E_r |\psi\rangle$$

Ce qui implique que

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

On a :

$$r = |\vec{r}_e - \vec{r}_p|$$

$$\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_e \quad \text{et} \quad \vec{r}_2 \rightarrow \vec{r}_p \Rightarrow \vec{R}_c, \vec{r}$$

$$\Rightarrow [\hat{H}_c + \hat{H}_r] \psi(\vec{R}_c, \vec{r}) = E \psi(\vec{R}_c, \vec{r}) \quad (1.38)$$

Cela implique

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r - \frac{e^2}{r} \right] \psi(\vec{R}_c, \vec{r}) = E \psi(\vec{R}_c, \vec{r})$$

Si \vec{R}_c, \vec{r} sont indépendants

On peut écrire

$$\psi(\vec{R}_c, \vec{r}) = \psi_c(\vec{R}_c) \psi_r(\vec{r}) \quad (1.39)$$

Equivalant à dire que:

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(r) \right] \psi(\vec{R}_c, \vec{r}) = E \psi(\vec{R}_c, \vec{r}) \\ \Rightarrow & \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(r) \right] \psi_c(\vec{R}_c) \psi_r(\vec{r}) = E \psi_c(\vec{R}_c) \psi_r(\vec{r}) \\ \Rightarrow & \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c \psi_c(\vec{R}_c) \right] \psi_r(\vec{r}) + \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r \psi_r(\vec{r}) + V(r) \psi_r(\vec{r}) \right] \psi_c(\vec{R}_c) = E \psi_c(\vec{R}_c) \psi_r(\vec{r}) \end{aligned}$$

On trouve :

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c \psi_c(\vec{R}_c)}{\psi_c(\vec{R}_c)} + \frac{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r \psi_r(\vec{r}) + V(r) \psi_r(\vec{r})}{\psi_r(\vec{r})} = E$$

Donc les deux termes sont constants :

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c \psi_c(\vec{R}_c)}{\psi_c(\vec{R}_c)} = c_1$$

On trouve :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c \psi_c(\vec{R}_c) = c_1 \psi_c(\vec{R}_c) = E_c \psi_c(\vec{R}_c) \quad (1.40)$$

Et

$$\begin{aligned} & \frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(r) \right] \psi_r(\vec{r})}{\psi_r(\vec{r})} = c_2 \quad \text{avec} \quad V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \\ \Rightarrow & \frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi_r(\vec{r})}{\psi_r(\vec{r})} = c_2 \end{aligned}$$

On obtient :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi_r(\vec{r}) = c_2 \psi_r(\vec{r}) = E_r \psi_r(\vec{r})$$

Où

$$E = E_c + E_r = c_1 + c_2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c \rightarrow \frac{p_c^2}{2M}$$

Dont l'énergie est :

$$E_c = \frac{p_c^2}{2M}$$

La solution qui décrit le mouvement d'une particule fictive libre est :

$$\psi_c(\vec{R}_c) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\vec{k}\vec{R}_c} \quad \text{avec} \quad \vec{k} = \frac{\vec{p}_c}{\hbar} \quad (1.41)$$

1.3.2.2 L'équation radiale

L'équation radiale pour la fonction est $u(r)$ donc :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] u(r) = E u(r) \quad (1.42)$$

Où l est l'entier naturel donnant la valeur propre $\hbar^2 l(l+1)$ pour le carré du moment cinétique orbital.

L'équation radiale s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} u''(r) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] u(r) = E u(r)$$

Le potentiel effectif est :

$$V_{\text{eff,Coul}}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

1.3.2.3 Le comportement asymptotique

On a deux comportements :

Dans le premier cas $l = 0$

Il n'y a pas le terme de centrifuge et la limite de $V_{\text{eff,Coul}}(r)$ est :

$$\lim_{r \rightarrow 0} V_{\text{eff,Coul}}(r) = -\infty$$

Dans le deuxième cas $l > 0$

La limite de $V_{\text{eff,Coul}}(r)$ est :

$$\lim_{r \rightarrow 0} V_{\text{eff,Coul}}(r) = +\infty$$

Avec $u(r) = rR(r)$

Le comportement asymptotique

Quand $r \rightarrow 0$ $u(r) = rR(r) \Rightarrow \frac{u(r)}{r} = R(r)$

$$\lim_{r \rightarrow 0} rR(r) = \lim_{r \rightarrow 0} u(r) = 0$$

L'équation devient :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu} u''(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} u(r) &= 0 \\ \Rightarrow -u''(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) &= 0 \end{aligned}$$

Les solutions sont de la forme :

$$u(r) \sim r^{l+1}$$

Quand $r \rightarrow +\infty$ on obtient pour l'équation radiale

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu} u''(r) &= Eu(r) \\ \Rightarrow u''(r) + \frac{2\mu E}{\hbar^2} u(r) &= 0 \end{aligned}$$

Cela implique

$$\lambda^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

Donc pour $E < 0$

$$\lambda = \pm \sqrt{\frac{2\mu(-E)}{\hbar^2}}$$

L'équation radiale est une équation différentielle du second membre.

La solution générale d'une telle équation est la suivante :

$$u(r) = Ae^{-\lambda r} + Be^{\lambda r}$$

Comme

$$\int_0^{+\infty} |u(r)|^2 dr = 1 \Rightarrow u(r) \sim e^{-\lambda r}$$

Donc

$$u(r) \sim r^{l+1} f(r) e^{-\lambda r}$$

1.3.2.4 Les niveaux d'énergies

Les dérivées de $u(r)$ (voir l'annexe 1).

On remplace dans l'équation radiale $f(r)$ vérifie :

$$f''(r) + 2 \left[\frac{(1+1)}{r} - \lambda \right] f'(r) + 2 \left[-\lambda \frac{(1+1)}{r} + \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] f(r) = 0 \quad (1.43)$$

La méthode des séries entières

En posant que :

$$f(r) = \sum_{k=0}^{+\infty} a_k r^k$$

$$\Rightarrow f'(r) = \sum k a_k r^{k-1} \quad f''(r) = \sum k(k-1) a_k r^{k-2}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{k=0}^{+\infty} k(k-1) a_k r^{k-2} + 2 \left[\frac{(1+1)}{r} - \lambda \right] \sum_{k=0}^{+\infty} k a_k r^{k-1} + 2 \left[-\lambda \frac{(1+1)}{r} + \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] \sum_{k=0}^{+\infty} a_k r^k = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{+\infty} k(k-1) a_k r^{k-2} + 2(1+1) \sum_{k=0}^{+\infty} k a_k r^{k-2} - 2\lambda \sum_{k=0}^{+\infty} k a_k r^{k-1} - 2\lambda(1+1) \sum_{k=0}^{+\infty} a_k r^{k-1} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k=0}^{+\infty} a_k r^{k-1} = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{+\infty} k(k+2l+1) a_k r^{k-2} + 2 \left[-\lambda(k+1) + \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] \sum_{k=0}^{+\infty} a_k r^{k-1} = 0$$

Par exemple :

$$\sum_{k=0}^{+\infty} A_k x^{k-1} = \sum_{k=1}^{+\infty} A_{k-1} x^{k-2}$$

$$\Rightarrow \sum_{k=1}^{+\infty} \left\{ k(k+2l+1) a_k + 2 \left[-\lambda(k+1) + \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] a_{k-1} \right\} r^{k-2} = 0$$

Or $r^{k-2} \neq 0$

$$\Rightarrow k(k + 2l + 1)a_k + 2 \left[-\lambda(k + 1) + \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] a_{k-1} = 0$$

$$\Rightarrow k(k + 2l + 1)a_k = 2 \left[\lambda(k + 1) - \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] a_{k-1}$$

Et

$$f(r) = \sum_{k=0}^p a_k r^k = a_0 + a_1 r^1 + a_2 r^2 + \dots + a_p r^p$$

C'est-à-dire que : $a_{p+1} = a_{p+2} = \dots = 0$

Si $k = p + 1$

$$0 = 2 \left[\lambda(p + 1 + 1) - \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] a_p$$

p et l sont des entiers et on pose que :

$$n = p + 1 + l$$

D'où $\lambda n = \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$

Le rayon de Bohr $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2}$

$$\lambda n = \frac{1}{a_0} \Rightarrow \lambda = \frac{1}{na_0}$$

Or $\sqrt{\frac{2\mu(-E)}{\hbar^2}} = \lambda$

$$\Leftrightarrow \sqrt{\frac{2\mu(-E)}{\hbar^2}} = \frac{1}{na_0}$$

On obtient :

$$E_n = - \frac{\hbar^2}{2\mu n^2 a_0^2}$$

1.3.2.5 Les fonctions propres

$f(r)$ est totalement déterminée : on exprime tous les coefficients en a_k en fonction de a_0 puis on calcule a_0 en utilisant la condition de normalisation.

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

On a : $n = p + 1 + l \Rightarrow p = n - l - 1$

A l'état fondamental

$$n = 1 ; l = 0 ; p = 0 \Rightarrow f(r) = \sum_{k=0}^{p=0} a_k r^k = a_0$$

$$\Leftrightarrow f(r) = a_0$$

Le minimum : $p = 0 \Rightarrow n = 1 + l$

$$\Rightarrow l \leq n - 1$$

$$\Rightarrow \psi_{100}(r, \theta, \varphi) = R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \varphi)$$

On a :

$$u(r) = rR(r) \Rightarrow R_{10}(r) = \frac{u_{10}(r)}{r}$$

Or

$$u(r) \sim r^{l+1} f(r) e^{-\lambda r}$$

$$\Rightarrow R_{10}(r) = \frac{u_{10}(r)}{r} = \frac{r^{0+1} f(r) e^{-\lambda r}}{r} N_{10}$$

$$\Rightarrow R_{10}(r) = N_{10} f(r) e^{-\lambda r}$$

$$\Rightarrow R_{10}(r) = N_{10} a_0 e^{-\lambda r}$$

La normalisation :

$$\int_0^{+\infty} |R_{10}(r)|^2 r^2 dr = 1$$

$$\Rightarrow \int_0^{+\infty} |N_{10} a_0 e^{-\lambda r}|^2 r^2 dr = 1$$

$$\Rightarrow N_{10}^2 a_0^2 \int_0^{+\infty} e^{-2\lambda r} r^2 dr = 1$$

Or $\int_0^{+\infty} x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}}$

$\lambda = \frac{1}{na}$ où a est le rayon de Bohr

$$\Rightarrow N_{10}^2 a_0^2 \int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{na}} dr = 1$$

Comme $n = 1$

$$\Leftrightarrow N_{10}^2 a_0^2 \int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{a}} dr = 1$$

$$\int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{a}} dr = \frac{2!}{\left(\frac{2}{a}\right)^{2+1}} = \frac{a^3}{4}$$

$$\Rightarrow N_{10}^2 a_0^2 \frac{a^3}{4} = 1$$

On sait que : $a_0 = \frac{2}{a^{3/2}}$

Avec $N_{10} = 1$

On trouve :

$$R_{10} = N_{10} f(r) e^{-\lambda r} = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-\frac{r}{a}}$$

Donc

$$\psi_{100}(r, \theta, \varphi) = R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-\frac{r}{a}} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (1.44)$$

Avec $Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

Au premier état excité

$$n = 2 ; l = 0 ; p = 1 \Rightarrow f(r) = \sum_{k=0}^{p=1} a_k r^k = a_0 + a_1 r$$

$$\Rightarrow \psi_{200}(r, \theta, \varphi) = R_{20}(r) Y_0^0(\theta, \varphi)$$

Et

$$R_{20}(r) = \frac{u_{20}(r)}{r} = f(r) e^{-\lambda r} = N_{20} f(r) e^{-\lambda r}$$

$$\Rightarrow R_{20}(r) = N_{20} (a_0 + a_1 r) e^{-\lambda r}$$

Avec

$$\lambda = \frac{1}{na} = \frac{1}{2a}$$

Cela implique

$$R_{20}(r) = N_{20} (a_0 + a_1 r) e^{-\frac{r}{2a}}$$

Pour $k = 1$; $l = 0$

On obtient l'équation radiale :

$$2a_1 = 2 \left[\lambda - \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] a_0$$

$$\Rightarrow a_1 = \left[\lambda - \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] a_0$$

On sait que :

$$\lambda n = \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \quad \text{ou} \quad \lambda n = \frac{1}{a}$$

$$\Rightarrow a_1 = \left[\frac{1}{2a} - \frac{1}{a} \right] a_0$$

On trouve :

$$a_1 = -\frac{1}{2a} a_0$$

$$\Rightarrow R_{20}(r) = N_{20} \left(a_0 - \frac{a_0}{2a} r \right) e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$\Rightarrow R_{20}(r) = N_{20} a_0 \left(1 - \frac{1}{2a} r \right) e^{-\frac{r}{2a}}$$

La normalisation :

$$\int_0^{+\infty} |R_{20}(r)|^2 r^2 dr = 1$$

$$\Rightarrow \int_0^{+\infty} \left| N_{20} \left(a_0 - \frac{a_0}{2a} r \right) e^{-\frac{r}{2a}} \right|^2 r^2 dr = 1$$

$$\Rightarrow N_{20}^2 \int_0^{+\infty} r^2 \left(a_0 - \frac{a_0}{2a} r \right)^2 e^{-\frac{r}{a}} dr = 1$$

$$\Rightarrow N_{20}^2 \int_0^{+\infty} r^2 \left(a_0^2 - \frac{a_0^2}{a} r + \frac{a_0^2}{4a^2} r^2 \right)^2 e^{-\frac{r}{a}} dr = 1$$

$$\Rightarrow N_{20}^2 a_0^2 \int_0^{+\infty} r^2 \left(1 - \frac{1}{a} r + \frac{1}{4a^2} r^2 \right)^2 e^{-\frac{r}{a}} dr = 1$$

$$\Rightarrow N_{20}^2 a_0^2 \left\{ \int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{r}{a}} dr - \frac{1}{a} \int_0^{+\infty} r^3 e^{-\frac{r}{a}} dr + \frac{1}{4a^2} \int_0^{+\infty} r^4 e^{-\frac{r}{a}} dr \right\} = 1$$

En calculant les intégrales :

$$\int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{r}{a}} dr = \frac{2!}{\left(\frac{1}{a}\right)^{2+1}} = 2a^3$$

$$\int_0^{+\infty} r^3 e^{-\frac{r}{a}} dr = \frac{3!}{\left(\frac{1}{a}\right)^{3+1}} = 6a^4$$

$$\int_0^{+\infty} r^4 e^{-\frac{r}{a}} dr = \frac{4!}{\left(\frac{1}{a}\right)^{4+1}} = 24a^5$$

Ce qui équivaut à dire que :

$$N_{20}^2 a_0^2 \left\{ 2a^3 - \frac{1}{a} 6a^4 + \frac{1}{4a^2} 24a^5 \right\} = 1$$

$$\Rightarrow 2N_{20}^2 a_0^2 a^3 = 1$$

$$\Rightarrow N_{20}^2 = \frac{1}{2a_0^2 a^3}$$

Or

$$a_0 = \frac{2}{a^{3/2}}$$

$$\Rightarrow N_{20}^2 = \frac{1}{2a^3 \left(\frac{2}{a^{3/2}}\right)^2} = \frac{(a^{3/2})^2}{8a^3} = \frac{1}{8}$$

D'où

$$N_{20} = \frac{1}{\sqrt{8}} = \frac{1}{2\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow R_{20}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \times \frac{2}{a^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}$$

On obtient :

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}a^3} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}$$

Donc

$$\psi_{200}(r, \theta, \varphi) = R_{20}(r)Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (1.46)$$

1.4 Conclusion

Dans ce chapitre en premier lieu nous avons pu résoudre l'équation de Schrödinger analytiquement pour certains systèmes simple soumis à un potentiel central c.à.d. obtenir les niveaux d'énergies et les états propres associés. Mais dans la plus part des cas quand l'expression du potentiel est compliquée ceci n'est pas possible et la résolution numérique de l'équation reste le dernier recours.

Résolution numérique de l'équation différentielle et du problème aux valeurs propres

Table des matières

2.1	Introduction	26
2.2	Résolution numérique de l'équation différentielle par la méthode des différences finies	26
2.2.1	Définition des différences finies	26
2.2.2	Opérateurs des différences finies	26
2.2.3	Relation entre les opérateurs des différentielles et les dérivées d'une fonction	27
2.2.3.1	Equation différentielle d'ordre 1	28
2.2.3.2	Equation différentielle du 2ème ordre.....	29
2.3	Equation différentielle aux dérivées partielles	33
2.4	Exemple d'équation de la propagation de chaleur.....	35
2.5	Application de l'équation de Schrodinger	36
2.5.1	Introduction	36
2.5.2	Application de méthode différentielle finie à trois points.....	36
2.6	Le problème aux valeurs propres.....	40
2.6.1	Transformations de Jacobi d'une matrice symétrique.....	41
2.2	Conclusion	42

Résolution numérique de l'équation différentielle et du problème aux valeurs propres

2.1 Introduction

Les niveaux d'énergies et les états quantiques correspondants d'un système sont obtenus soit par la résolution d'une équation différentielle $\hat{H} \psi(r) = E\psi(r)$ ou du problème de valeurs propres $\hat{H} |\psi\rangle = E|\psi\rangle$

Pour cela dans ce chapitre on présenter quelques techniques utilisées pour calculer numériquement la solution d'équation différentielle ainsi que du problème

$$AX = \lambda X$$

2.2 Résolution numérique de l'équation différentielle par la méthode des différences finies

Les méthodes aux différences finies sont une classe de méthodes numériques très utilisée encore aujourd'hui, afin de résoudre des équations différentielles non solubles analytiquement.

2.2.1 Définition des différences finies

C'est une expression de la forme $f(x') - f(x)$, c'est la différence entre les valeurs d'une en deux points quelconques soit x' et x .

2.2.2 Opérateurs des différences finies

On considère en général uniquement les différences « *en avant* », « *en arrière* » et « *centrés* ».

On note $f(x_i) = y(x_i) = y_i$

❖ **Opérateur différence avant :**

L'opérateur de différence avant Δ_h est défini par

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

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

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

❖ **Opérateur différence arrière :**

De même, l'opérateur de différence arrière ∇_h est défini par

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

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

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

❖ **Opérateur différence centrées :**

Enfin, l'opérateur de différence centrée δ_h est défini par

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

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

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

2.2.3 Relation entre les opérateurs des différentielles et les dérivées d'une fonction

On obtient la relation entre les dérivées :

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

Ainsi, appliquant la formule de différence finie à la dérivée de f' en x , on obtient une approximation de la dérivée de f .

$$f'(x) \cong \frac{f(x+h)-f(x)}{h} = \frac{\Delta f(x)}{h}, \quad h \ll 1$$

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

$$h \rightarrow 2h$$

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

De manière analogue, on peut obtenir des approximations de dérivées d'ordre supérieur.

2.2.3.1 Equation différentielle d'ordre 1

Pour résoudre numériquement une équation différentielle on doit discrétiser l'intervalle et remplacer les dérivées par leurs expressions approchées en utilisant les opérateurs des différences finies.

La discrétisation :

Soit un intervalle $[a, b]$ sur lequel on définit une fonction $y(x) = f(x)$ et soit l'ensemble des points équidistants $x_0, x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n$

$$\text{On a: } x_{i+1} = x_i + h$$

$$x_0 = a, \quad x_1 = x_0 + h, \quad x_2 = x_1 + h = x_0 + 2h \quad \dots \quad x_n = b$$

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

$$y_{i+1} = h \times g(x_i, y_i) + y_i$$

La forme générale d'une équation différentielle d'ordre 1

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

Qu'on peut écrire sous la forme

$$y'(x) = b(x) - a(x)y(x) = g(x, y)$$

Ecrire l'équation différentielle en chaque point :

$$y'_i = h \times g(x_i, y_i)$$

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

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

Ce schéma permet de connaître la valeur approchée de la solution y_i en chaque point x_i (Méthode Euler)

2.2.3.2 Equation différentielle du 2^{ème} ordre

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

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

❖ Cas avec Condition initiale

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

$$y(a) = y(x_0) = y_0$$

$$y'(a) = y'(x_0) = y'_0$$

On discrétise l'intervalle :

$$x_0 = a, \quad x_1, x_2, x_3, \dots, x_i \dots, x_n = b$$

On écrit l'équation différentielle en x_i

$$y''(x_i) + a(x_i)y'(x_i) + b(x_i)y(x_i) = d(x_i)$$

$$y''_i + a_i y'_i + b_i y_i = d_i$$

$$y^n(x) \approx \frac{\Delta^n y}{h^n} \approx \frac{\nabla^n y}{h^n}$$

Ou encore

$$y^n(x) = \frac{\Delta^m \nabla^{n-m} y}{h^n}$$

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

$$y_i'' = \frac{1}{h^2} [y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i]$$

On a :

$$y_i' = \frac{\Delta y_i}{h} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}$$

En cherche le schéma récursif :

$$y_i'' + a_i y_i' + b_i y_i = d_i$$

$$\Rightarrow \frac{1}{h^2} [y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i] + a_i \frac{1}{h} [y_{i+1} - y_i] + b_i y_i = d_i$$

$$\Rightarrow y_{i+2} = h^2 d_i + [2 - ha_i] y_{i+1} + [ha_i - h^2 b_i - 1] y_i$$

Schéma récursif

On peut calculer y_1 à partir :

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y'(a) = y'_0 \end{cases}$$

$$y'_0 = \frac{\Delta y_0}{h} = \frac{y_1 - y_0}{h}$$

$$\Rightarrow y_1 = h y'_0 + y_0$$

2^{ème} possibilité :

$$y_i'' = \frac{\Delta \nabla y_i}{h^2} = \frac{\Delta(\nabla y_i)}{h^2} = \frac{\Delta(y_i - y_{i-1})}{h^2}$$

$$y_i'' = \frac{1}{h^2} [y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}]$$

Le schéma récursif :

$$\begin{aligned} y_i'' + a_i y_i' + b_i y_i &= d_i \\ \Rightarrow \frac{1}{h^2} [y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}] + a_i \frac{1}{h} [y_{i+1} - y_i] + b_i y_i &= d_i \\ \Rightarrow [1 + ha_i] y_{i+1} &= h^2 d_i + [2 + ha_i - h^2 b_i] y_i - y_{i-1} \\ \Rightarrow y_{i+1} &= \frac{[h^2 d_i + [2 + ha_i - h^2 b_i] y_i - y_{i-1}]}{1 + ha_i} \end{aligned}$$

On peut calculer y_{-1} à partir :

$$y_0' = \frac{\nabla y_0}{h} = \frac{y_0 - y_{-1}}{h} \Rightarrow y_{-1} = -h y_0' + y_0$$

❖ **Problème aux limites :**

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

Avec : $x \in [a, b]$ et $y(a) = \mu_1$, $y(b) = \mu_n$

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$$

On sait que :

$$y_i' = \frac{\Delta y_i}{h} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}$$

Où encore : $y_i' = \frac{\nabla y_i}{h} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}$

$$\Leftrightarrow \frac{y_{i+1} - y_i}{h} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}$$

$$\Rightarrow y_i = \frac{y_{i+1} + y_{i-1}}{2}$$

D'où $y'_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$

En remplaçant dans l'équation différentielle

On trouve :

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + a_i \left[\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \right] + b_i y_i = d_i$$

$$\Rightarrow [2 - ha_i]y_{i-1} + [2h^2b_i - 4]y_i + [2 + ha_i]y_{i+1} = 2h^2d_i$$

En posant que :

$$\alpha_i = 2 - h a_i \quad \beta_i = 2h^2 b_i - 4 \quad \gamma_i = 2 + h a_i \quad \delta_i = 2h^2 d_i$$

$$\alpha_i y_{i-1} + \beta_i y_i + \gamma_i y_{i+1} = \delta_i$$

$$\alpha_1 y_0 + \beta_1 y_1 + \gamma_1 y_2 = \delta_1 \quad , y_0 = y(x_0) = y(a) = \mu_1$$

$$\beta_1 y_1 + \gamma_1 y_2 = \delta_1 - \alpha_1 \mu_1$$

$$\alpha_2 y_1 + \beta_2 y_2 + \gamma_2 y_3 = \delta_2$$

$$\alpha_3 y_2 + \beta_3 y_3 + \gamma_3 y_4 = \delta_3$$

\vdots \vdots
 \vdots \vdots

$$\alpha_{n-1} y_{n-2} + \beta_{n-1} y_{n-1} + \gamma_{n-1} y_n = \delta_{n-1}$$

$$\alpha_{n-1} y_{n-2} + \beta_{n-1} y_{n-1} = \delta_{n-1} - \gamma_{n-1} \mu_n$$

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

$$\begin{pmatrix} \beta_1 & \gamma_1 & 0 & 0 & \dots \\ \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & 0 & \dots \\ 0 & \alpha_3 & \beta_3 & \gamma_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ \vdots \\ F_{n-1} \end{pmatrix}$$

$$F_1 = \delta_1 - \alpha_1 \mu_1$$

$$F_2 = \delta_2, \quad F_3 = \delta_3$$

$$F_{n-1} = \delta_{n-1} - \gamma_{n-1} \mu_n$$

On recherche les " y " par :

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

2.3 Equation différentielle aux dérivées partielles (E.D.A.D.P)

Définition :

Une équation aux dérivées partielles est une relation de la forme :

$$F\left(u(x_i, x_j, \dots, x_n), \frac{\partial u}{\partial x_i}, \frac{\partial u}{\partial x_j}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_i x_j}, \dots, \frac{\partial^n u}{\partial x_i \partial x_{\dots n}}\right) = 0$$

$$\Delta(u(x, y, z)) = 0$$

E.D.A.D.P d'ordre 2 :

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D \frac{\partial u}{\partial x} + E \frac{\partial u}{\partial y} + Fu(x, y) = 0$$

On dérive par x et y

Tel que $x \in [a, b]$ et $y \in [c, d]$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u(x+h, y) - u(x, y)}{h}, \quad h \ll 1$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} \approx \frac{u(x, y+k) - u(x, y)}{k}, \quad k \ll 1$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \approx \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{u(x+h, y) - u(x, y)}{h} \right] = \frac{\frac{\partial u(x+h, y)}{\partial x} - \frac{\partial u(x, y)}{\partial x}}{h}$$

En utilisant l'opérateur différences avant

$$\frac{\partial u(x+h, y)}{\partial x} \approx \frac{u(x+2h, y) - u(x+h, y)}{h}$$

$$\frac{\partial u(x, y)}{\partial x} \approx \frac{u(x+h, y) - u(x, y)}{h}$$

On obtient :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u(x+2h, y) - 2(u(x+h, y)) + u(x, y)}{h^2}$$

En discrétisant l'intervalle de x avec $x \in [a, b]$

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

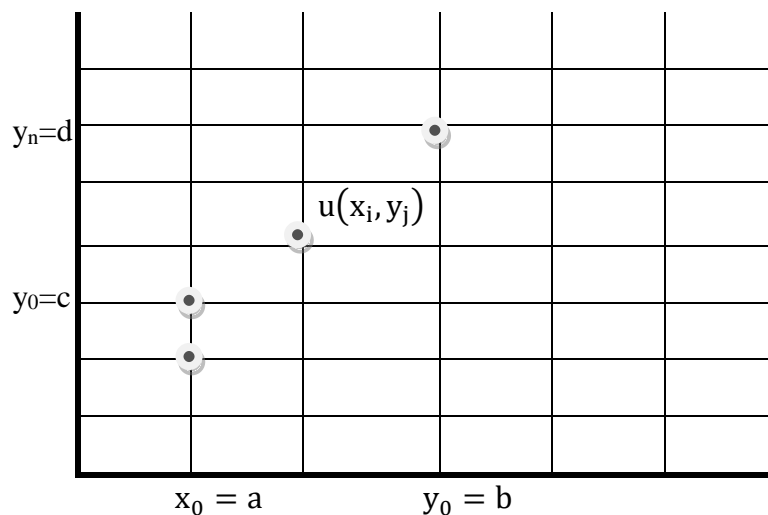
Et de $y \in [c, d]$

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

Donc on a :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j) \approx \frac{u(x_i + 2h, y_j) - 2(u(x_i + h, y_j)) + u(x_i, y_j)}{h^2}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j) \approx \frac{u(x_{i+2}, y_j) - 2(u(x_{i+1}, y_j)) + u(x_i, y_j)}{h^2}$$



On a :

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

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

$$\boxed{\frac{\partial^2 u_{ij}}{\partial x^2} = \frac{u_{i+2j} - 2u_{i+1j} + u_{ij}}{h^2}}$$

De même pour y :

$$\boxed{\frac{\partial^2 u_{ij}}{\partial y^2} = \frac{u_{ij+2} - 2u_{ij+1} + u_{ij}}{k^2}}$$

2.4 Exemple équation de la propagation de chaleur

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

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

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

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{u(x, t+k) - u(x, t)}{k} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k}$$

$$\frac{\partial^2 u(x_i, t_j)}{\partial x^2} = \frac{u_{i+2,j} - 2u_{i+1,j} + u_{i,j}}{h^2}$$

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = a^2 \frac{u_{i+2,j} - 2u_{i+1,j} + u_{i,j}}{h^2}$$

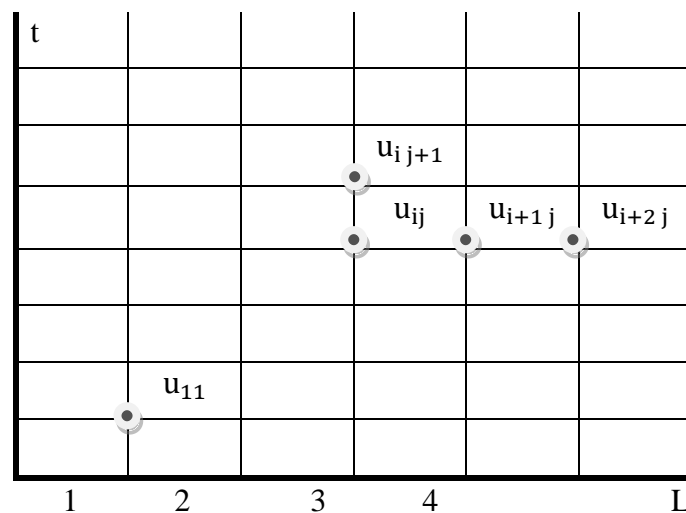
$$u_{i,j+1} = \frac{a^2 k}{h^2} [u_{i+2,j} - 2u_{i+1,j} + u_{i,j}] + u_{i,j}$$

On obtient :

$$u_{i,j+1} = \frac{a^2 k}{h^2} [u_{i+2,j} - 2u_{i+1,j}] + \left[\frac{a^2 k}{h^2} + 1 \right] u_{i,j}$$

Condition initiale :

$$u(x, 0) = \frac{h}{2} \quad u(L, t) = 2t \quad u(0, t) = 0$$



Donc les valeurs de $u(x, t)$ aux points $(u_{i+2j}), (u_{i+1j}), (u_{ij})$ permet de calculer la valeur de $u(x, t)$ au point $(i + 1j)$

2.5 Application à l'équation de Schrödinger

2.5.1 Introduction

L'équation de Schrödinger est une équation différentielle du second ordre, linéaire et homogène. Elle n'a de solution exacte que pour quelques cas simples.

Pour pouvoir la résoudre pour des problèmes compliqués plusieurs méthodes et approximations ont vu le jour :

- 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.

2.5.2 Application de méthode différentielle finie à équation à 3 points

L'équation de Schrödinger a une dimension s'écrit

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

On peut réécrire comme :

$$\psi''(x) + k^2 \cdot \psi(x) = 0$$

Avec $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]}$ qui le vecteur d'onde

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

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

Pour identification ; on a :

$$b(x) = (E - V(x)) \frac{2m}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad \psi''(x) + b(x)\psi(x) = 0 \quad (*)$$

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 :

$$\psi_i''(x) = \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2} \quad ; \quad \psi_i'(x) = \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{2h}$$

On remplace ces équations dans l'équation(*) :

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

On obtient le schéma récursif suivant :

$$\Rightarrow \quad \psi_{i+1} = -\psi_{i-1} - (h^2 b(x) - 2) \psi_i$$

Algorithme de Numerov :

$$\psi''(x) = -k^2 \psi(x)$$

$$\psi''''(x) = \frac{d^2}{dx^2} (\psi''(x)) = \frac{d^2}{dx^2} (-k^2 \psi(x))$$

Développement de Taylor

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

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + (x - x_0) f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!} f''(x_0) + \dots + \frac{(x - x_0)^n}{n!} f^n(x_0) \\ &= \sum_i a_i f^{(i)}(x_i) \quad \text{avec} \quad a_i = \frac{(x-x_0)^i}{i!} \end{aligned}$$

Pour $x_0 = x_n$:

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

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

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

$$\psi(x_{n-1}) = \psi_{n-1}$$

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

$$\psi(x_{n+1}) = \psi_{n+1}$$

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

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

$$\psi_{n-1} + \psi_{n+1} = 2\psi_n + [(x - x_{n-1})(x - x_{n+1})]\psi'_n + h_0^2\psi_n'' + \frac{h_0^4}{12}\psi_n''''$$

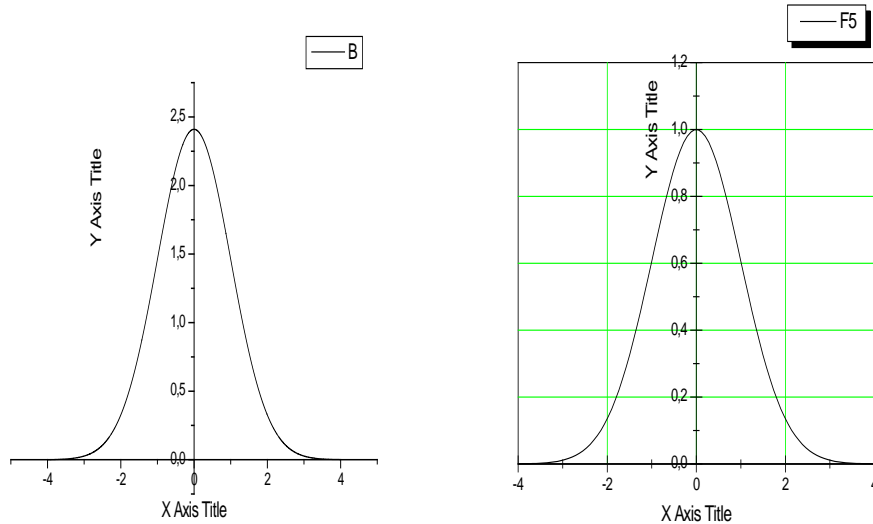
$$\Rightarrow \psi_{n-1} + \psi_{n+1} - 2\psi_n = h_0^2\psi_n'' + \frac{h_0^4}{12}\psi_n''''$$

$$\Rightarrow \frac{\psi_{n-1} + \psi_{n+1} - 2\psi_n}{h_0^2} = \psi_n'' + \frac{h_0^2}{12}\psi_n''''$$

$$\Rightarrow \psi_{n+1} = \frac{2\left(1 - \frac{5}{12}h_0^2k_n^2\right)\psi_n - \left(1 - \frac{1}{12}h_0^2k_{n-1}^2\right)\psi_{n-1}}{1 + \frac{1}{12}h_0^2k_{n+1}^2}$$

Exemple comparatif entre les résultats obtenus avec la Méthode des Différence Finies réf. [14] : Les fonctions d'ondes

➤ **L'état fondamental (n=0) pour l'oscillateur harmonique**

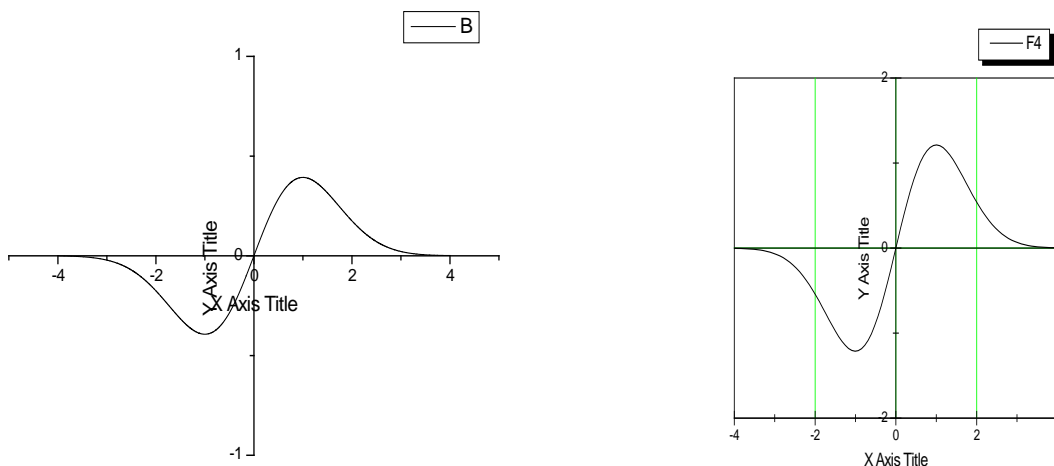


Résultat par MDF

Résultat exact

Figure 2.1 – Les résultats du potentiel de l'état fondamental pour l'oscillateur harmonique.

➤ **1^{er} état excité (n=1)**

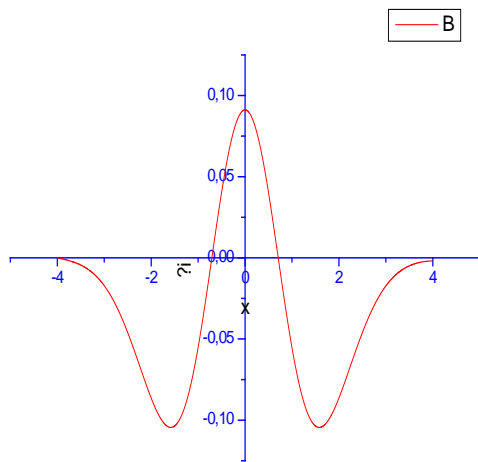


Résultat par MDF

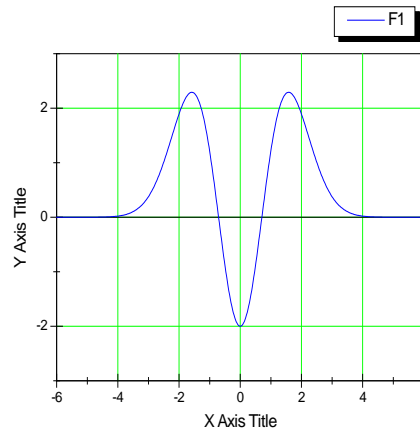
Résultat exact

Figure 2.2 – Les résultats du potentiel pour l'oscillateur harmonique au 1^{er} état excité.

➤ **2^{ème} état excité (n=2)**



Résultat par MDF



Résultat exact

Figure 2.3 – Les résultats du potentiel pour l’oscillateur harmonique au 2^{ème} état excité.

2.6 Le problème aux valeurs propres

Le problème aux valeurs propres est un système d’équation linéaire de la forme

$$A \cdot X = \lambda X \tag{**}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & \dots \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \vdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ \vdots \\ X_n \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ \vdots \\ X_n \end{pmatrix}$$

Evidemment (**) ne peut avoir de solution non triviale que

$$\text{Si } \det|A - \lambda I| = 0 \tag{***}$$

Le résultat est un polynôme du Nième degré en λ dont leurs racines sont les valeurs propres. Les valeurs propres égales provenant des racines multiples sont appelées dégénérées. La recherche de racines dans l’équation caractéristique (***) est généralement très compliquée. Nous allons apprendre la meilleure façon de trouver les vecteurs propres

correspondants. Les deux équations ci-dessus prouvent également que chacune des N valeurs propres a un vecteur propre correspondant (pas nécessairement distincts).

Quand on choisit une base discrète dans l'espace des états l'équation de Schrödinger devient un problème aux valeurs propres

$$\hat{H} |\psi\rangle = E|\psi\rangle \Leftrightarrow \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \dots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \dots & \dots \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \\ h_{n1} & h_{n2} & h_{n3} & \vdots & h_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

Plusieurs méthodes ont été élaborées pour calculer les valeurs et vecteurs propres d'une matrice parmi lesquelles on la transformation de Jacobi

2.6.1 Transformations de Jacobi d'une matrice symétrique

La méthode de Jacobi est une méthode itérative applicable à une matrice A symétrique. Elle consiste à faire opérer le groupe des rotations planes sur A c'est-à-dire à multiplier A par des transformations orthogonales afin de la mettre sous forme diagonale, les éléments diagonaux étant les valeurs propres de la matrice A. Étudions le principe de la méthode. Considérons la matrice H dont les éléments sont égaux à ceux de la matrice identité sauf pour les quatre valeurs suivantes $h_{pp} = \cos(\alpha)$, $h_{pq} = \sin(\alpha)$, $h_{qp} = \sin(\alpha)$ et $h_{qq} = \cos(\alpha)$, avec $p < q$. La matrice H est une matrice orthogonale $H^t \cdot H = I$. À la première étape, on calcule la matrice $A_1 = H_1^{-1}A \cdot H = H^t A \cdot H$, en remarquant que seules les lignes et les colonnes p et q sont modifiées, pour $j = p$ ou q , on a :

$$\begin{aligned} a_{pj}^{(1)} &= a_{jp}^{(1)} = a_{jp} \cos(\alpha) - a_{jq} \sin(\alpha) \\ a_{qj}^{(1)} &= a_{jq}^{(1)} = a_{jq} \cos(\alpha) + a_{jp} \sin(\alpha) \\ a_{pp}^{(1)} &= a_{pp} \cos^2(\alpha) + a_{qq} \sin^2(\alpha) - 2a_{pq} \sin(\alpha) \cos(\alpha) \\ a_{qq}^{(1)} &= a_{qq} \cos^2(\alpha) + a_{pp} \sin^2(\alpha) + 2a_{pq} \sin(\alpha) \cos(\alpha) \\ a_{pq}^{(1)} &= a_{qp}^{(1)} = a_{pq} (\cos^2(\alpha) - \sin^2(\alpha)) + (a_{pp} - a_{qq}) \sin(\alpha) \cos(\alpha) \end{aligned}$$

On peut donc choisir α de sorte que $a_{pq}^{(1)} = a_{qp}^{(1)} = 0$, c'est-à-dire tel que

$$\tan(2\alpha) = \frac{2a_{pq}}{a_{qq} - a_{pp}} \equiv \theta \text{ avec } |\alpha| = \frac{\pi}{4}$$

Ou encore

$$\cos(\alpha) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1+\theta^2}} \right)}$$

$$\sin(\alpha) = \operatorname{sgn}(\theta) \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1+\theta^2}} \right)}$$

Si $a_{pp} = a_{qq}$, on choisira

$$\cos(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\sin(\alpha) = \frac{\operatorname{sgn}(a_{pq})}{\sqrt{2}}$$

On a alors

$$\left(a_{pp}^{(1)} \right)^2 + \left(a_{qq}^{(1)} \right)^2 = a_{pp}^2 + a_{qq}^2 + 2a_{pq}^2$$

Et comme $a_{ii}^{(1)} = a_{ii}$ pour $i \neq p$ ou q

$$\sum_{i=1}^n \left(a_{ii}^{(1)} \right)^2 = \sum_{i=1}^n a_{ii}^2 + 2a_{pq}^2$$

en passant de A à A_1 la somme des carrés des éléments diagonaux augmente de la quantité $2a_{pq}^2$. En itérant ce processus, on obtient

$$A_{k+1} = (H_1 H_2 H_3 \cdots H_k)^t A \cdot (H_1 H_2 H_3 \cdots H_k)$$

La suite des matrices A_k converge vers une matrice diagonale dont les éléments diagonaux sont les valeurs propres de la matrice initiale A . La suite des matrices $P_k = H_1 H_2 H_3 \cdots H_k$ converge vers la matrice dont les colonnes sont constituées de vecteurs propres

2.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté une technique (la méthode des différences finies) qui permet de résoudre l'équation de Schrödinger numériquement particulièrement.

Ensuite, nous avons décrit brièvement l'algorithme dans notre méthode de Jacobi sur lequel sont basées les deux sous-routines Jacobi et eigenstat utilisées dans notre programme qui nous permettent de calculer les valeurs et les vecteurs propres c.à.d. la résolution numérique du problème aux valeurs propres.

Application de la mécanique matricielle au problème du potentiel central

Table des matières

3.1	Introduction	43
3.2	Formulation du problème de la mécanique matricielle	43
3.2.1	Le potentiel de Coulomb	45
3.2.1	Le potentiel de Yukawa.....	53
3.3	Conclusion	57

Application de la mécanique matricielle au problème du potentiel central

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons quelques exemples de l'utilisation de la mécanique matricielle pour résoudre un certain nombre de problèmes tridimensionnels impliquant des forces centrales. Ceux-ci incluent des exemples avec lesquels nous sommes familiers, tels que l'interaction de Coulomb. Dans ce cas, nous obtenons un excellent accord avec des méthodes analytiques exactes. Plus important encore, d'autres exemples «non résolus», tels que le potentiel de Yukawa, peut être résolu aussi bien.

3.2 Formulation du problème avec la mécanique matricielle

Pour un potentiel central, la solution de l'équation de Schrödinger est séparable,

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

La partie angulaire se compose des harmoniques sphériques, qui sont des fonctions des angles sphériques standards. La partie radiale obéit à l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r)u(r) = E_n u(r)$$

qui est identique à l'équation de Schrödinger à une dimension pour une particule de masse m , sauf que le potentiel contient un terme de centrifuge supplémentaire,

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

Nous plongeons le système dans un puits de profondeur infinie Réf [6] Fig.3.1 qui permet d'utiliser un simple ensemble d'états de base, qui sont simplement les états propres du puits de potentiel infini. $\varphi_n(r) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right)$ avec des valeurs propres $E_n^0 = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_e a^2}$

La Fig.3.1 montre les exemples de potentiels que nous allons utiliser dans ce chapitre, tracé avec le puits infini de Coulomb et de Yukawa.

La Fig.3.1 montre les exemples de potentiels que nous allons utiliser dans ce chapitre, tracé avec le puits infini de Coulomb et de Yukawa.

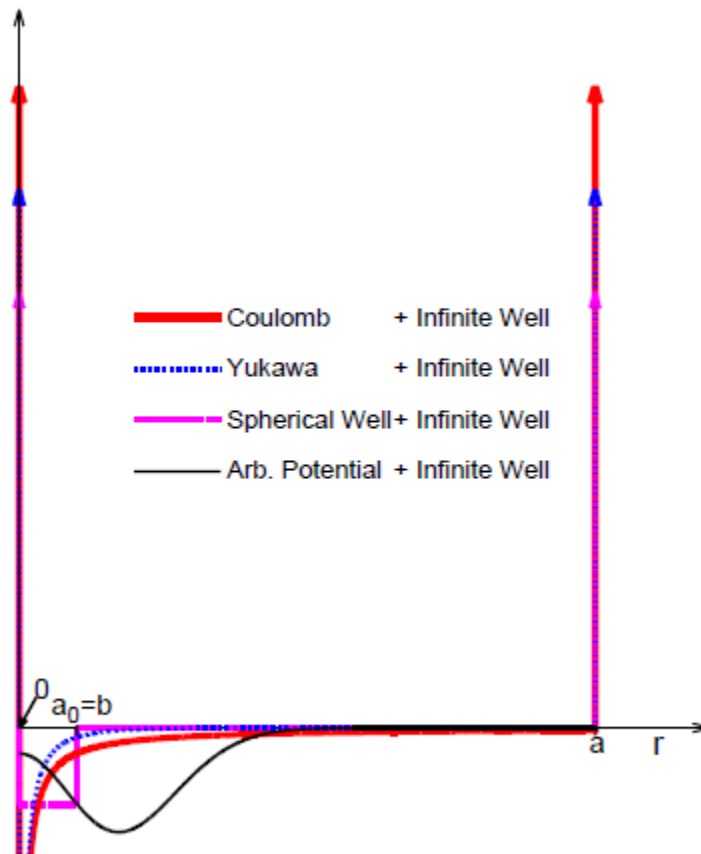


Figure 3.1 – Les différents potentiels plongés dans le puits infini Réf [6]

Nous écrivons l'équation radiale dans la notation de Dirac

$$[H_0 + V_{eff}]|u\rangle = E|u\rangle, \tag{i}$$

Où H_0 inclut à la fois l'énergie cinétique et le potentiel de puits, de tel sorte que

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n^0|\varphi_n\rangle,$$

Si nous développons maintenant $|u\rangle$ en termes de cet ensemble de base :

$$\varphi_m(r) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right)$$

$|u\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} C_m |\varphi_m\rangle$ et remplacez cela dans l'équation (i)

On peut écrire: $[H_0 + V_{\text{eff}}] \sum_{m=1}^{\infty} C_m |\varphi_m\rangle = E \sum_{m=1}^{\infty} C_m |\varphi_m\rangle$

Avec $H = H_0 + V_{\text{eff}}$

Ce qui implique

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{\infty} C_m H |\varphi_m\rangle &= \sum_{m=1}^{\infty} C_m E |\varphi_m\rangle \\ \Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} C_n \langle \varphi_n | H &= \sum_{n=1}^{\infty} C_n \langle \varphi_n | E \end{aligned}$$

On trouve :

$$\sum_{m=1}^{\infty} C_m \langle \varphi_n | H | \varphi_m \rangle = \sum_{m=1}^{\infty} C_m \langle \varphi_n | E | \varphi_m \rangle$$

$\langle \varphi_n | H | \varphi_m \rangle = H_{nm}$ Et $\langle \varphi_n | E | \varphi_m \rangle = E \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = E \delta_{nm}$

Il devient :

$$\sum_{m=1}^{\infty} C_m H_{nm} = \sum_{m=1}^{\infty} C_m E \delta_{nm}$$

En posant que :

$$\sum_{m=1}^{\infty} C_m \delta_{nm} = C_n$$

$$\Rightarrow \sum_{m=1}^{\infty} H_{nm} C_m = E C_n \tag{ii}$$

Où les éléments de la matrice sont donnés par

$$H_{nm} = \langle \varphi_n | (H_0 + V_{\text{eff}}) | \varphi_m \rangle = \langle \varphi_n | H_0 | \varphi_m \rangle + \langle \varphi_n | V_{\text{eff}} | \varphi_m \rangle$$

$$\Rightarrow H_{nm} = \langle \varphi_n | E_n^0 | \varphi_m \rangle + \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \{V_{\text{eff}}\} \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) dr$$

$$\Rightarrow H_{nm} = E_n^0 \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle + \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \left\{ V(r) + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1(1+1)}{r^2} \right\} \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) dr$$

$$\Rightarrow H_{nm} = \delta_{nm} E_n^0 + \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \left\{ V(r) + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1(1+1)}{r^2} \right\} \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) dr$$

et δ_{nm} est la fonction delta de Kronecker.

3.2.1 Le potentiel de Coulomb

Nous allons commencer avec le Potentiel de Coulomb et essayer de retrouver les résultats analytiques des niveaux d'énergies et les fonctions propres pour l'atome d'hydrogène.

Deux questions devraient être soulevées avant que nous procédions; l'un est que la taille de la matrice dans le problème de valeur propre posé dans l'équation (ii) est infinie. Cela sera traité en utilisant une coupure supérieure n_{\max} , et en augmentant la valeur de cette coupure jusqu'à ce que les résultats convergent. Le deuxième problème concerne la valeur de la largeur, a , ou de manière équivalente, la coupure en distance radiale. L'unité naturelle de la distance dans le problème de Coulomb est le rayon de Bohr, $a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e}$. Pour les états excités cette coupure devra être plus élevée.

Pour le potentiel de Coulomb, nous allons nous concentrer sur $l = 0$, pour illustrer la méthode..

Cependant, nous faisons simplement l'intégrale numériquement. Il est préférable d'utiliser une identité trigonométrique pour évaluer l'intégrale. On obtient

$$\begin{aligned}\langle V_{\text{Coul}} \rangle &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \left\{ -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right\} \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) dr \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) \frac{1}{r} dr\end{aligned}$$

Changement de variable en posant que : $x = \frac{r}{a} \Rightarrow ax = r \Rightarrow \frac{1}{r} = \frac{1}{ax}$

$$\Rightarrow dr = a dx$$

$$\Rightarrow \begin{cases} r \rightarrow 0 & \Rightarrow x \rightarrow 0 \\ r \rightarrow a & \Rightarrow x \rightarrow 1 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \langle V_{\text{Coul}} \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{a} \int_0^1 \sin(n\pi x) \sin(m\pi x) \frac{1}{ax} a dx$$

$$\Rightarrow \langle V_{\text{Coul}} \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{a} \int_0^1 \frac{1}{x} \sin(n\pi x) \sin(m\pi x) dx$$

Or $\sin a \sin b = \frac{1}{2} [\cos(a - b) - \cos(a + b)]$

$$\Rightarrow \sin(n\pi x) \sin(m\pi x) = \frac{1}{2} [\cos(n\pi x - m\pi x) - \cos(n\pi x + m\pi x)]$$

$$\Rightarrow \sin(n\pi x) \sin(m\pi x) = \frac{1}{2} \{ \cos[\pi x(n - m)] - \cos[\pi x(n + m)] \}$$

$$\Rightarrow \langle V_{\text{Coul}} \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{a} \int_0^1 \frac{1}{x} \{ \cos[\pi x(n - m)] - \cos[\pi x(n + m)] \} dx$$

On additionne et soustrait de l'unité aux cosinus

$$\Rightarrow \langle V_{\text{Coul}} \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a} \int_0^1 \frac{1}{x} \{ \cos[\pi x(n - m)] + 1 - 1 - \cos[\pi x(n + m)] \} dx$$

$$\Rightarrow \langle V_{\text{Coul}} \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a} \left\{ \int_0^1 \frac{1 - \cos[\pi x(n + m)]}{x} dx - \int_0^1 \frac{1 - \cos[\pi x(n - m)]}{x} dx \right\}$$

On pose que : $L_1(n+m) = \int_0^1 \frac{1-\cos[\pi x(n+m)]}{x} dx$

et $L_1(n-m) = \int_0^1 \frac{1-\cos[\pi x(n-m)]}{x} dx$

On obtient :

$$\langle V_{\text{Coul}} \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a} \{L_1(n+m) - L_1(n-m)\}$$

Nous avons adopté l'unité d'énergie naturelle dans le problème, $E_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}$, qui est un Rydberg (≈ 13.606 eV).

Le terme centrifuge :

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) dr \\ \Rightarrow \langle V \rangle &= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e} \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) \frac{1}{r^2} dr \end{aligned}$$

Changement de variable en posant que : $x = \frac{r}{a} \Rightarrow ax = r \Rightarrow a^2 x^2 = r^2 \Rightarrow \frac{1}{r^2} = \frac{1}{a^2 x^2}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle V \rangle &= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e} \frac{2}{a} \int_0^1 \sin(n\pi x) \sin(m\pi x) \frac{1}{a^2 x^2} dx \\ \Rightarrow \langle V \rangle &= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e} \frac{2}{a^2} \int_0^1 \frac{1}{x^2} \frac{1}{2} \{ \cos[\pi x(n-m)] - \cos[\pi x(n+m)] \} dx \\ \Rightarrow \langle V \rangle &= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e} \frac{1}{a^2} \int_0^1 \frac{1}{x^2} \{ \cos[\pi x(n-m)] - 1 + 1 - \cos[\pi x(n+m)] \} dx \\ \Rightarrow \langle V \rangle &= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e} \frac{1}{a^2} \left\{ \int_0^1 \frac{1 - \cos[\pi x(n+m)]}{x^2} dx - \int_0^1 \frac{1 - \cos[\pi x(n-m)]}{x^2} dx \right\} \end{aligned}$$

En posant que : $L_2(n+m) = \int_0^1 \frac{1-\cos[\pi x(n+m)]}{x^2} dx$

Et $L_2(n-m) = \int_0^1 \frac{1-\cos[\pi x(n-m)]}{x^2} dx$

$$\Leftrightarrow \langle V \rangle = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e} \frac{1}{a^2} \{L_2(n+m) - L_2(n-m)\}$$

Après avoir décidé d'une valeur de a/a_0 , et d'une taille maximale pour la matrice, n_{max} , il est maintenant simple question d'évaluer les éléments de la matrice. Nous réécrivons l'équation (ii) avec des quantités sans dimension :

$$\sum_{m=1}^{n_{\text{max}}} h_{nm} C_m = e C_n$$

Où

$$e \equiv \frac{E}{E_0} \quad \text{et} \quad h_{nm} \equiv \frac{H_{nm}}{E_0}$$

Equivalent

$$\begin{aligned} H_{nm} &= \delta_{nm} E_n^0 + \langle V_{\text{Coul}} \rangle + \langle V \rangle \\ \Rightarrow H_{nm} &= \delta_{nm} \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_e a^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a} \{L_1(n+m) - L_1(n-m)\} \\ &\quad + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e} \frac{1}{a^2} \{L_2(n+m) - L_2(n-m)\} \end{aligned}$$

Nous avons :

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{\hbar^2}{m_e} &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} a_0 \Rightarrow \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{\hbar^2}{m_e a_0} \\ E_0 &\equiv \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m_e} = E_0 a_0^2 \\ \Rightarrow \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} &= 2 \frac{E_0 a_0^2}{a_0} = 2E_0 a_0 \end{aligned}$$

On trouve :

$$\begin{aligned} H_{nm} &= \delta_{nm} \frac{\pi^2 n^2 E_0 a_0^2}{a^2} - 2E_0 \frac{a_0}{a} \{L_1(n+m) - L_1(n-m)\} \\ &\quad + E_0 l(l+1) \frac{a_0^2}{a^2} \{L_2(n+m) - L_2(n-m)\} \\ \Rightarrow \frac{H_{nm}}{E_0} &= \delta_{nm} \frac{\pi^2 n^2 a_0^2}{a^2} - 2 \frac{a_0}{a} \{L_1(n+m) - L_1(n-m)\} \\ &\quad + l(l+1) \frac{a_0^2}{a^2} \{L_2(n+m) - L_2(n-m)\} \end{aligned}$$

On a :

$$\sum_{m=1}^{\infty} h_{nm} C_m = e C_n \quad (\text{iii})$$

$$e \equiv \frac{E}{E_0}$$

$$h_{nm} \equiv \frac{H_{nm}}{E_0}$$

On obtient :

$$\begin{aligned} h_{nm} &= \delta_{nm} \frac{\pi^2 n^2 a_0^2}{a^2} - 2 \frac{a_0}{a} \{L_1(n+m) - L_1(n-m)\} \\ &\quad + l(l+1) \frac{a_0^2}{a^2} \{L_2(n+m) - L_2(n-m)\} \end{aligned}$$

Résultats :

La Fig.3.2 montre un exemple de calcul avec $a/a_0 = 50$ et $n_{max} = 200$. Les résultats exacts, $e_{exact} \equiv \frac{E_{exact}}{E_0} = -1/n^2$, sont donnés par la ligne verte. Ils sont de bien sûr tous négatifs, bien qu'ils deviennent plus difficiles distinguer de zéro lorsque n augmente.

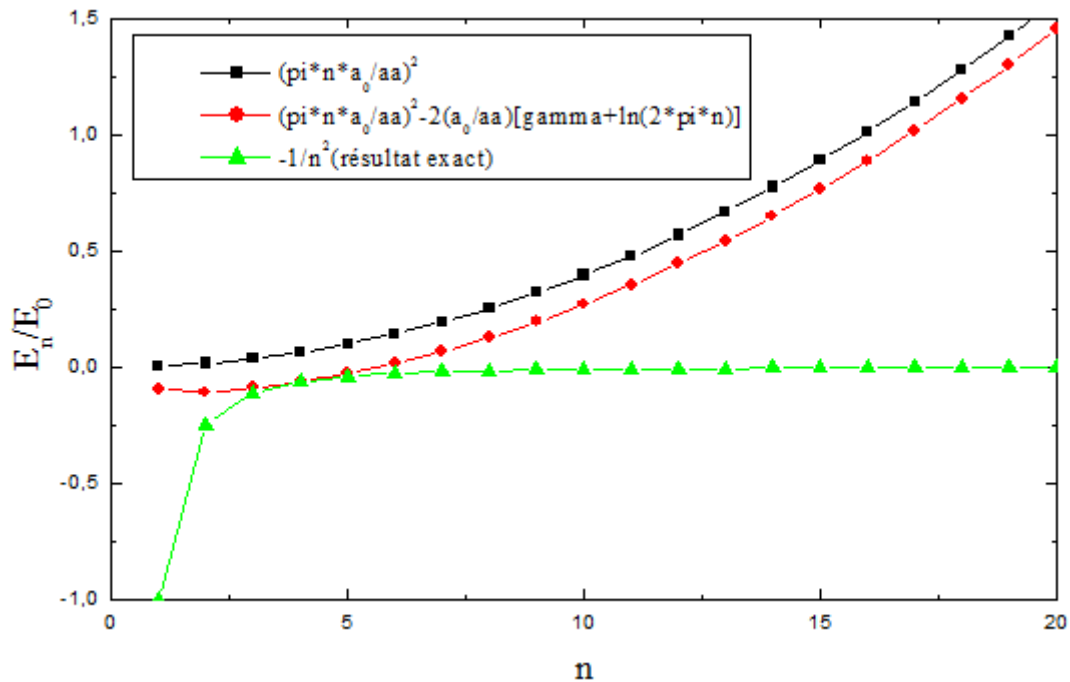


Figure 3.2 – La variation du rapport $\frac{E_n}{E_0}$ pour le potentiel de Coulomb en fonction de n.

Résultats exactes en trait pleine verte. Résultats numériques carrés rouges avec une la largeur $a = 50a_0$ $l=0$ Résultats avec la théorie des perturbations ligne pleine rouge

Les résultats numériques reproduisent très bien les quatres premières énergies d'état liées. les énergies deviennent positif (non lié) en raison du potentiel infini, et pour très grand nombre quantique n, ils vont varier comme n^2 (montré avec une courbe noire), adapté pour un puits carré infini de largeur a. Un résultat plus précis (de l'équation (iii)) est montré avec une courbe solide rouge, et peut être dérivé de la théorie des perturbations. Seulement les six premières valeurs de l'énergie sont négatives, et de ceux-ci, les quatre premiers sont très précis; le reste devient positif. Pour de telles grandes valeurs de n le potentiel de Coulomb devient une perturbation mineure par rapport au potentiel infinie. En examinant les éléments de la matrice diagonale seulement pour de grandes valeurs de n, on peut dériver

$$\frac{E_n}{E_0} \approx \left(\frac{\pi n a_0}{a}\right)^2 - 2 \frac{a_0}{a} [\gamma + \ln(2\pi n)] \quad (\text{iii})$$

Où $\gamma \approx 0.5772 \dots$ est la constante d'Euler.

Tableau 3.1 – Les résultats de l'énergie pour $a/a_0 = 10$

n_{\max}	E_1/E_0	E_2/E_0	E_1/E_0 Réf [6].	E_2/E_0 Réf [6].
50	-0.99920	-0.22547	-0.99915	-0.22546
100	-0.99989	-0.22559	-0.99983	-0.22558
200	-0.99998	-0.22560	-0.99992	-0.22560
400	-0.99999	-0.22561	-0.99993	-0.22560

Tableau 3.2 – Les résultats de l'énergie pour $a/a_0 = 20$

n_{\max}	E_1/E_0	E_2/E_0	E_3/E_0	E_1/E_0 Réf [6].	E_2/E_0 Réf [6].	E_3/E_0 Réf [6].
50	-0.99426	-0.24924	-0.09951	-0.99428	-0.24925	-0.09951
100	-0.99918	-0.24987	-0.09979	-0.99920	-0.24987	-0.09979
200	-0.99988	-0.24995	-0.09982	-0.99989	-0.24996	-0.09983
400	-0.99997	-0.24997	-0.09983	-0.99999	-0.24997	-0.09984

Le tableau 3.1 montre le en fonction valeurs du rapport $\frac{E_n}{E_0}$ en fonction de la taille de la matrice n_{\max} , pour un donné $a/a_0 = 10$. Nos résultats sont en bon accord avec les résultats de la référence [6]. Notons que les deuxièmes états liés dans le tableau 3.1 convergent vers une valeur définie lorsque n_{\max} augmente, mais que cette valeur n'est pas nécessairement la valeur du potentiel de Coulomb. Dans ce cas E_2/E_0 , qui devrait avoir une valeur de -0.25 , mais en fait la convergence à une valeur de -0.22561 . Si on augmenter la largeur du puits a nous atteignons une meilleur convergence les tableaux 3.2 et 3.3 illustrent ce processus.

Tableau 3.3 –Les résultats de l'énergie pour $a/a_0 = 50$

n_{\max}	E_1/E_0	E_2/E_0	E_3/E_0	E_1/E_0 Réf. (6).	E_2/E_0 Réf. (6).	E_3/E_0 Réf. (6).
50	-0.94111	-0.24206	-0.10871	-0.94114	-0.24207	-0.10872
100	-0.98927	-0.24863	-0.11070	-0.98932	-0.24864	-0.11071
200	-0.99840	-0.24979	-0.11105	-0.99846	-0.24981	-0.11105
400	-0.99973	-0.24996	-0.11110	-0.99980	-0.24997	-0.11110
800	-0.99990	-0.24998	-0.11110	-0.99998	-0.25000	-0.11111

Pour une valeur propre donnée E_n , cela correspond à un vecteur de coefficients c_m pour $m = 1, 2, 3 \dots n_{\max}$, comme dans l'équation (iii). Avec ceux-ci on peut calculer facilement la fonction d'onde radiale correspondante,

$$R_n(r) = \sum_{m=1}^{n_{\max}} C_m^{(n)} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right)$$

Et nous avons supprimé l'indice l depuis que nous nous sommes concentrés sur $l = 0$.

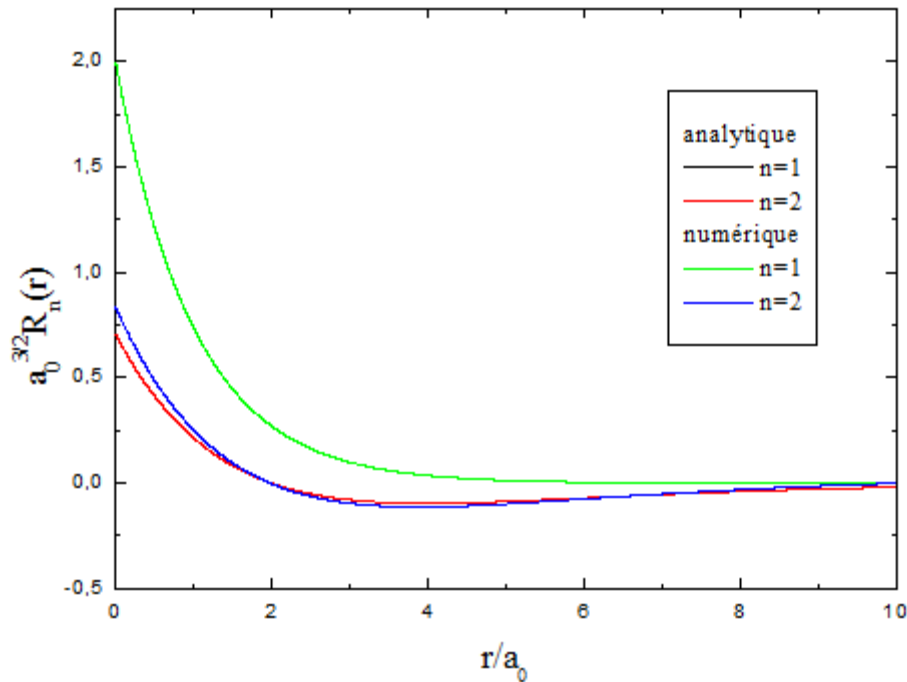


Figure 3.3 – Les fonctions d’ondes radiales en fonction de r.

Les résultats numériques pour les fonctions d'ondes radiales ($n = 1$ et $n = 2$, les deux avec $l = 0$) courbes verte et bleu. Les résultats analytiques sont également montrés avec des courbes noires).

Sur la Fig. 3.3 pour les $n = 1$ et $n = 2$ états, les résultats analytiques connus,

$$a_0^{3/2} R_{10}(r) = 2e^{-r/a_0}$$

$$a_0^{3/2} R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0}$$

sont comparés avec nos résultats numériques qui sont très satisfaisant. Pour $n=1$ les résultats analytiques et numériques sont en excellent accord de sorte que la courbe en noire (résultats analytiques) se situe totalement en dessous de la courbe verte (résultats numériques). On remarque que aussi l'évanescence est complète sur une distance radiale d'environ $10 \times$ le rayon de Bohr.

3.2.1 Le potentiel de Yukawa

Nous examinons maintenant le potentiel qui peut être écrit comme

$$V_{\text{Yuk}}(r) = -A \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\frac{\mu r}{a_0}}}{r}$$

Ce potentiel connu sous le nom de potentiel de Yukawa en physique atomique et du potentiel de Debye-Huckel en physique des plasmas, présente un intérêt dans de nombreux domaines de la physique. Il a été à l'origine utilisé pour modéliser les interactions fortes nucléon-nucléon dues à l'échange de mésons en physique nucléaire par Yukawa. Il est également utilisé pour représenter un potentiel de Coulomb avec l'effet d'écran du nuage de charges électroniques autour du noyau. Cependant, l'équation de Schrödinger pour ce potentiel ne peut pas être résolue exactement; par conséquent, diverses méthodes numériques et perturbatives ont été conçues pour obtenir les niveaux d'énergie et les états associés.

Où A nous permet d'ajuster la force de l'interaction. Clairement, pour $A \rightarrow 1$ et $\mu \rightarrow 0$ nous retrouverons l'interaction Coulombienne discuté dans la section précédente. Le potentiel de Yukawa a une portée plus courte que le Coulomb, et a donc un nombre fini d'états. Dans ce qui suit, nous nous concentrerons exclusivement sur $l = 0$, et n'ont donc pas besoin du terme de centrifuge, comme dans le cas de Coulomb. Contrairement au potentiel précédent discuté jusqu'ici, il n'y a pas de solution analytique connue pour le potentiel de Yukawa. Nos résultats seront comparés avec ceux des références [6] et [9]

De la même manière que le cas de coulomb on construit la matrice hamiltonien H

$$\begin{aligned} H_{nm} &= \delta_{nm} E_n^0 + \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \{V(r)\} \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) dr \\ &\quad + \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) dr \end{aligned}$$

Pour $V(r) = V_{\text{Yuk}}(r)$

$$\begin{aligned} \Rightarrow H_{nm} &= \delta_{nm} E_n^0 + \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \left\{ -A \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\frac{\mu r}{a_0}}}{r} \right\} \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) dr \\ &\quad + \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) dr \\ \Rightarrow H_{nm} &= \delta_{nm} E_n^0 - A \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) \frac{e^{-\frac{\mu r}{a_0}}}{r} dr \\ &\quad + \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) dr \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle V_{\text{Yuk}}(r) \rangle &= -A \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi r}{a}\right) \frac{e^{-\frac{\mu r}{a_0}}}{r} dr \\ \Rightarrow \langle V_{\text{Yuk}}(r) \rangle &= -A \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{a} \int_0^1 \sin(n\pi x) \sin(m\pi x) \frac{e^{-\frac{\mu ax}{a_0}}}{ax} dx \\ \Rightarrow \langle V_{\text{Yuk}}(r) \rangle &= -A \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{a} \int_0^1 \frac{1}{2} \{ \cos[\pi x(n-m)] - \cos[\pi x(n+m)] \} \frac{e^{-\frac{\mu ax}{a_0}}}{x} dx \\ \Rightarrow \langle V_{\text{Yuk}}(r) \rangle &= -A \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a} \int_0^1 \{ \cos[\pi x(n-m)] - 1 + 1 - \cos[\pi x(n+m)] \} \frac{e^{-\frac{\mu ax}{a_0}}}{x} dx \\ \Rightarrow \langle V_{\text{Yuk}}(r) \rangle &= -A \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a} \left\{ \int_0^1 \frac{1 - \cos[\pi x(n+m)]}{x} e^{-\frac{\mu ax}{a_0}} dx - \int_0^1 \frac{1 - \cos[\pi x(n-m)]}{x} e^{-\frac{\mu ax}{a_0}} dx \right\} \end{aligned}$$

On pose que :

$$K_1(n+m) = \int_0^1 \frac{1 - \cos[\pi x(n+m)]}{x} e^{-\frac{\mu ax}{a_0}} dx$$

Et $K_1(n-m) = \int_0^1 \frac{1 - \cos[\pi x(n-m)]}{x} e^{-\frac{\mu ax}{a_0}} dx$

Cela implique

$$\begin{aligned} \langle V_{\text{Yuk}}(r) \rangle &= -A \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a} \{K_1(n+m) - K_1(n-m)\} \\ \Rightarrow \langle V_{\text{Yuk}}(r) \rangle &= -2AE_0 \frac{a_0}{a} \{K_1(n+m) - K_1(n-m)\} \end{aligned}$$

On trouve :

$$\begin{aligned} \Rightarrow H_{nm} &= \delta_{nm} \frac{\pi^2 n^2 E_0 a_0^2}{a^2} - 2AE_0 \frac{a_0}{a} \{K_1(n+m) - K_1(n-m)\} \\ &\quad + E_0 l(1+1) \frac{a_0^2}{a^2} \{L_2(n+m) - L_2(n-m)\} \\ \Rightarrow h_{nm} \equiv \frac{H_{nm}}{E_0} &= \delta_{nm} \frac{\pi^2 n^2 a_0^2}{a^2} - 2A \frac{a_0}{a} \{K_1(n+m) - K_1(n-m)\} \\ &\quad + l(1+1) \frac{a_0^2}{a^2} \{L_2(n+m) - L_2(n-m)\} \end{aligned}$$

Où, comme dans le cas du potentiel de Coulomb, nous avons utilisé une unité d'énergie, $E_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2me a_0^2}$. Le réglage $\mu = 0$ permet de récupérer les résultats pour l'interaction de Coulomb.

Résultats :

La présence d'un facteur de décroissance exponentielle dans l'intégrale $K_1(n - m)$ rend l'intégration numérique plus difficile que dans le cas de Coulomb; de plus, pour la plupart des paramètres, les résultats convergents seront obtenus sans nécessiter a/a_0 d'être excessivement grands. Le tableau 3.4 montre plus de chiffres pour les énergies de l'état fondamental en fonction de μ . Nous avons gardé a/a_0 et n_{\max} fixé à 30 et 1800, respectivement. C'est la raison de la très légère détérioration de nos valeurs pour plus grand μ ; nous pouvons facilement atteindre une plus grande précision en augmentant la largeur du puits carré infini. Comme μ augmente (pour A fixe = 1), l'énergie de l'état lié approche zéro, et la fonction d'onde est plus étendue, et donc une grande valeur de a est nécessaire pour maintenir la même précision.

Tableau 3.4 – Les énergies de l'état fondamental ($A = 1$) en unités de E_0 , comparées à celles de Réf [6] et Réf [9].

μ	1s énergie	2s énergie	3s énergie	1s énergie Réf [6].	1s énergie Réf [9].
0.10	-0.814084	-0.099852	-0.002365	-0.814 116	-0.814 116...
0.20	-0.653584	-0.024146	0.022643	-0.653 617	-0.653 617...
0.40	-0.396713	0.010037	0.044595	-0.396 752	-0.396 752...
0.60	-0.212246	0.013179	0.052431	-0.212 271	-0.212 272...
0.80	-0.089392	0.014687	0.057015	-0.089 408	-0.089 409...
1.00	-0.020544	0.017924	0.063524	-0.020 552	-0.020 572...

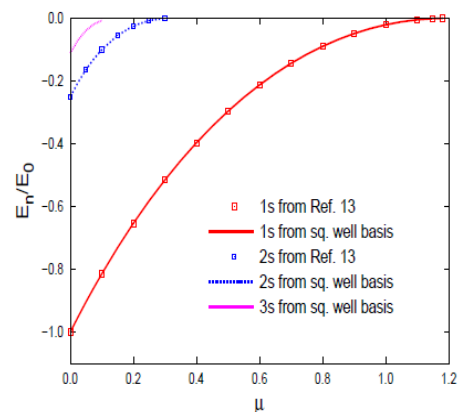
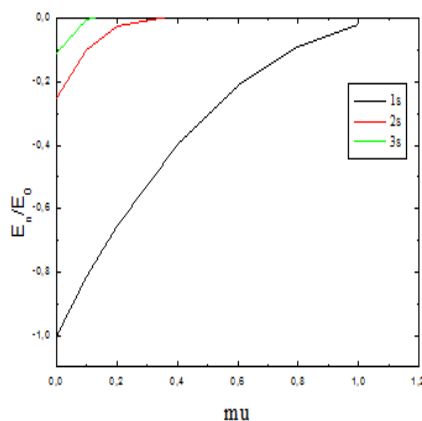


Figure 3.4 – La variation du rapport $\frac{E_n}{E_0}$ pour le potentiel de Yukawa en fonction de μ .

La figure 3.4 montre les niveaux d'énergies pour le potentiel de Yukawa (avec $A = 1$), en fonction du paramètre μ . Les courbes en noire, en rouge et en verte les niveaux 1, 2 et 3, respectivement sont en excellent accord avec les résultats de Réf [9].

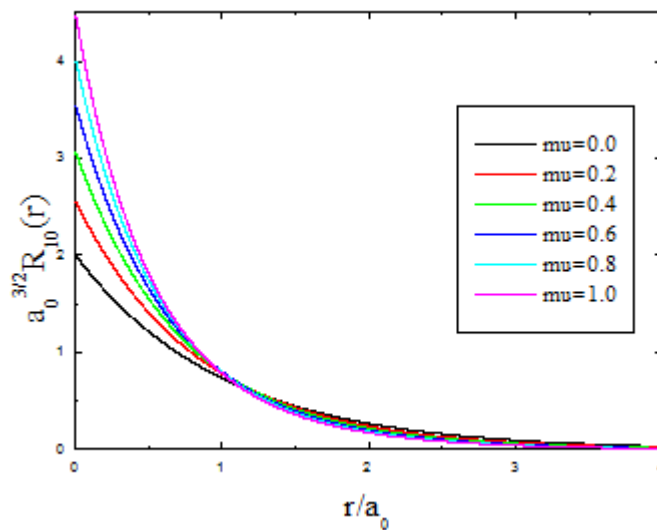


Figure 3.5 – La fonction d'onde de l'état fondamental en fonction de la coordonnée radiale, r , pour différentes valeurs du paramètre, μ , tandis que A a été varié pour garder l'énergie d'état fixée, $E_1 = -E_0$.

La figure 3.5 montre une comparaison de fonctions d'onde; pour différentes valeurs du paramètre, μ dans chaque cas, nous avons ajusté a valeur de A e pour maintenir $\frac{E_1(\mu)}{E_0} = -1$. La fonction d'onde devient de plus en plus localisée autour de l'origine, lorsque μ augmente comme prévu. Normalement la fonction d'onde est de plus en plus «moins lié» lorsque μ augmente à cause de l'effet d'écran.

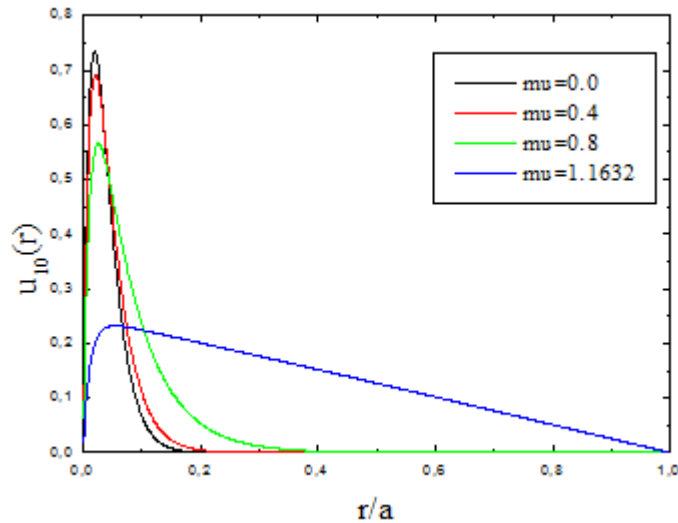


Figure 3.6– La fonction $u(r) \equiv rR_{10}(r)$ en fonction de la coordonnée radiale, r , pour différentes valeurs du paramètre du μ , alors que A est maintenu constant à l'unité.

Si μ augmente l'énergie de liaison diminue, donc la fonction d'onde devient plus étendue dans l'espace. . La Fig.3.6 confirme cela comme prévu avec une valeur critique $\mu \approx \mu_c = 1.1632$

3.3 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons utilisé la mécanique matricielle pour résoudre l'équation de Schrödinger avec le potentiel central. En résumé, nous avons illustré comment la mécanique matricielle, avec une base de puits carrés simple, peut reproduire les énergies d'état lié pour certains potentiel central (coulombien et de Yukawa). En étendant la largeur du puits carré, et de manière appropriée en augmentant la taille de la matrice, nous convergions vers les résultats analytiques connus, la concordance est meilleur pour les petits nombres quantiques. Nos avons reproduit les résultats de l'article réf.[6]. Donc cette technique peut être un bon substitut à la résolution de l'équation différentielle de Schrödinger pour le calcul des niveaux d'énergies et leurs fonctions propres des états liés

Conclusion Générale

Dans ce mémoire, nous avons présenté une résolution rigoureuse de l'équation de Schrödinger particulièrement dans le cas du potentiel central en mécanique quantique.

Nous avons montré que les variables r , θ et φ sont séparables. Ceci conduit au calcul explicite de la partie angulaire.

La fonction radiale est calculée dans les cas de l'oscillateur harmonique à trois dimensions et du potentiel de Coulomb.

Comme sous produits, nous avons retrouvé aisément les résultats concernant le potentiel de l'oscillateur harmonique et le potentiel de Coulomb.

Les niveaux d'énergies et les fonctions d'onde normalisées sont obtenus respectivement à partir de la fonction radiale.

Dans le contexte du problème deux corps, nous avons résolu le problème de deux particules sans spin, de masse $M = m_1 + m_2$ et de charge $(-e)$ et $(+e)$ en présence d'un potentiel $V(r) = V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$.

Dans le cadre de la méthode numérique, nous avons montré que l'approche des différences finies en mécanique quantique et la forme appliquée aux équations de Schrödinger et transfert de chaleur.

Le calcul est fait à l'aide de la méthode des différences finies pour tenir compte des conditions aux limites à la solution du problème.

Les valeurs propres du système ont été obtenues ainsi que les vecteurs propres.

Enfin, nous avons utilisé la mécanique matricielle, pour l'équation de Schrödinger dont la partie angulaire dépend de deux paramètres θ et φ .

Comme l'approximation du terme potentiel centrifuge adoptée dans le cas du potentiel de Coulomb et de Yukawa n'étant plus valable, nous nous sommes limités pour $(l = 0)$.

Dans chaque cas, nous avons obtenu les valeurs et les vecteurs propres.

Annexe A

En cherchant les dérivées :

L'oscillateur harmonique

$$u(r) = r^{l+1} f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$$

La dérivée première :

$$u'(r) = (l+1)r^l f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} + f'(r)r^{l+1} e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} - \frac{m\omega}{2\hbar} 2r e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} r^{l+1} f(r)$$

$$u'(r) = (l+1)r^l f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} + f'(r)r^{l+1} e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} - \frac{m\omega}{\hbar} e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} r^{l+2} f(r)$$

$$u'(r) = f'(r)r^{l+1} e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} + f(r) \left[(l+1)r^l - \frac{m\omega}{\hbar} r^{l+2} \right] e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$$

$$u'(r) = \left[f'(r)r^{l+1} + f(r) \left[(l+1)r^l - \frac{m\omega}{\hbar} r^{l+2} \right] \right] e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$$

La dérivée seconde :

$$u''(r) = l r^{l-1} (l+1) f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} + f'(r) (l+1) r^l e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} - \frac{m\omega}{\hbar} r e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} (l+1) r^l f(r)$$

$$+ f''(r) r^{l+1} e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} + (l+1) r^l f'(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} - \frac{m\omega}{\hbar} r e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} f'(r) r^{l+1}$$

$$+ \frac{m\omega}{\hbar} r e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \frac{m\omega}{\hbar} r^{l+2} f(r) - (l+2) r^{l+1} \frac{m\omega}{\hbar} e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} f(r)$$

$$- f'(r) \frac{m\omega}{\hbar} e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} r^{l+2}$$

$$u''(r) = f''(r) r^{l+1} e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} + f'(r) 2 \left[(l+1) r^l - \frac{m\omega}{\hbar} r^{l+2} \right] e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$$

$$+ f(r) \left[l(l+1) r^{l-1} - \frac{m\omega}{\hbar} (l+1) r^{l+1} - \frac{m\omega}{\hbar} (l+2) r^{l+1} \right] e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$$

$$u''(r) = \left\{ f''(r) r^{l+1} + f'(r) 2 \left[(l+1) r^l - \frac{m\omega}{\hbar} r^{l+2} \right] + f(r) \left[l(l+1) r^{l-1} - \frac{m\omega}{\hbar} (l+1) r^{l+1} - \frac{m\omega}{\hbar} (l+2) r^{l+1} \right] \right\} e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$$

L'équation devient:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ f''(r)r^{l+1} + f'(r)2 \left[(l+1)r^l - \frac{m\omega}{\hbar} r^{l+2} \right] + f(r) \left[l(l+1)r^{l-1} - \frac{m\omega}{\hbar} (l+1)r^{l+1} - \frac{m\omega}{\hbar} (l+2)r^{l+1} \right] \right\} e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} r^{l+1} f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} = E r^{l+1} f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$$

On simplifie par le terme $-\frac{\hbar^2}{2m} e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$

$$\begin{aligned} f''(r)r^{l+1} + f'(r)2 \left[(l+1)r^l - \frac{m\omega}{\hbar} r^{l+2} \right] \\ + f(r) \left[l(l+1)r^{l-1} - \frac{m\omega}{\hbar} (l+1)r^{l+1} - \frac{m\omega}{\hbar} (l+2)r^{l+1} \right] - \frac{l(l+1)}{r^2} r^{l+1} f(r) \\ = -\frac{2m}{\hbar^2} E r^{l+1} f(r) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow f''(r)r^{l+1} + f'(r)2 \left[(l+1)r^l - \frac{m\omega}{\hbar} r^{l+2} \right] \\ + f(r) \left\{ l(l+1)r^{l-1} - \frac{m\omega}{\hbar} (l+1)r^{l+1} - \frac{m\omega}{\hbar} (l+2)r^{l+1} \right. \\ \left. + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] r^{l+1} \right\} = 0 \end{aligned}$$

En divisant le tout par r^{l+1}

$$\begin{aligned} \Rightarrow f''(r) + 2 \left[\frac{(l+1)}{r} - \frac{m\omega r}{\hbar} \right] f'(r) \\ + \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{m\omega}{\hbar} (l+1) - \frac{m\omega}{\hbar} (l+2) - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] f(r) = 0 \\ \Rightarrow f''(r) + 2 \left[\frac{(l+1)}{r} - \frac{m\omega r}{\hbar} \right] f'(r) + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar} (2l+3) \right] f(r) = 0 \end{aligned}$$

L'atome d'hydrogène

$$u(r) \sim r^{l+1} f(r) e^{-\lambda r}$$

la dérivée première :

$$u'(r) = (l+1)r^l f(r) e^{-\lambda r} + f'(r)r^{l+1} e^{-\lambda r} - \lambda e^{-\lambda r} r^{l+1} f(r)$$

$$u'(r) = r^{l+1} e^{-\lambda r} f'(r) + [(l+1)r^l - \lambda r^{l+1}] e^{-\lambda r} f(r)$$

La dérivée seconde :

$$\begin{aligned}
u''(r) &= l(l+1)r^{l-1}f(r)e^{-\lambda r} + f'(r)(l+1)r^l e^{-\lambda r} - \lambda e^{-\lambda r}(l+1)r^l f(r) \\
&\quad + f''(r)r^{l+1}e^{-\lambda r} + f'(r)(l+1)r^l e^{-\lambda r} - \lambda e^{-\lambda r} f'(r)r^{l+1} + \lambda^2 e^{-\lambda r} r^{l+1} f(r) \\
&\quad - (l+1)r^l \lambda e^{-\lambda r} f(r) - f'(r)\lambda e^{-\lambda r} r^{l+1} \\
u''(r) &= [l(l+1)r^{l-1} - 2\lambda(l+1)r^l + \lambda^2 e^{-\lambda r} r^{l+1}]f(r)e^{-\lambda r} \\
&\quad + 2[(l+1)r^l - \lambda r^{l+1}]f'(r)e^{-\lambda r} + r^{l+1}f''(r)e^{-\lambda r}
\end{aligned}$$

L'équation radiale devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \{ [l(l+1)r^{l-1} - 2\lambda(l+1)r^l + \lambda^2 r^{l+1}]f(r) + 2[(l+1)r^l - \lambda r^{l+1}]f'(r) + r^{l+1}f''(r) \} e^{-\lambda r} + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] r^{l+1} f(r) e^{-\lambda r} = E r^{l+1} f(r) e^{-\lambda r}$$

Simplifie par : $e^{-\lambda r}$

$$\begin{aligned}
& [l(l+1)r^{l-1} - 2\lambda(l+1)r^l + \lambda^2 r^{l+1}]f(r) + 2[(l+1)r^l - \lambda r^{l+1}]f'(r) + r^{l+1}f''(r) \\
& + \left[-\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] r^{l+1} f(r) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} E r^{l+1} f(r)
\end{aligned}$$

Simplifie par : r^{l+1}

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - 2\lambda \frac{(l+1)}{r} + \lambda^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right] f(r) + 2 \left[\frac{(l+1)}{r} - \lambda \right] f'(r) \\
& + f''(r) = 0
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \left[\lambda^2 - 2\lambda \frac{(l+1)}{r} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right] f(r) + 2 \left[\frac{(l+1)}{r} - \lambda \right] f'(r) + f''(r) = 0$$

Or

$$\lambda^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow f''(r) + 2 \left[\frac{(l+1)}{r} - \lambda \right] f'(r) + 2 \left[-\lambda \frac{(l+1)}{r} + \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] f(r) = 0$$

Annexe B

Un code Fortran simple pour déterminer les valeurs propres et les fonctions d'onde pour le Potentiel de Coulomb et de Yukawa. Ici nous utilisons une règle trapézoïdale simple pour évaluer les intégrales requises pour les éléments de la matrice de l'hamiltonien, et faire appel à deux sous-routines Recettes numériques 6 pour diagonaliser la matrice. Nous utilisons aa pour désigner la largeur du puits, tandis que amu est le coefficient μ du potentiel de Yukawa. Nous utilisons également un amplificateur de coefficient pour varier la force du potentiel de Yukawa. Si $\mu = 0$ alors nous avons le potentiel de Coulomb. Le code est le suivant:

D'abord nous allons sauvegarder les intégrales nécessaires

Le programme :

Le potentiel de Coulomb

```

program trapeze
implicit none
integer :: i, n, m, nmax
integer, parameter :: np=200      ! si tu change nmax change aussi np=nmax
real,parameter :: pi=3.141592653, E0=13.606,  gamma=0.577215665
real, dimension(np) :: d, eexact1, eexact2, eexact
real, dimension(2,0 :1 0000) :: u
real :: nbrpt, pas, a0, aa, f0, Rex, Rex1, Rap, Rap1
real :: f
real, dimension(0 : 10000) :: x
real,dimension(np,np) :: delta, s1, s2, sum1, Vcoul, a, v
integer :: nrot,j
read(*,*) aa, nmax
nbrpt=5000

```

```

a0=1.0d0
open(1,file='result. Les valeurs ',status='new')
x(0)=0.0d0
pas=1.0d0/nbrpt
x(1)=0.0d0+pas
do n=1,nmax
do m=1,nmax
f0=0.0d0
s1(n,m)=s1(n,m)+(f(x(1),n+m)+f0)*pas/2.
s2(n,m)=s2(n,m)+(f(x(1),n-m)+f0)*pas/2.
if(n/=m) then
delta(n,m)=0.0
else
delta(n,m)=(pi*n*a0/aa)**2
end if
do i=2,nbrpt
x(i)=x(0)+i*pas
s1(n,m)=s1(n,m)+(f(x(i),n+m)+f(x(i-1),n+m))*pas/2.
s2(n,m)=s2(n,m)+(f(x(i),n-m)+f(x(i-1),n-m))*pas/2.
end do
end do
end do
sum1=s1-s2
Vcoul=-2*(a0/aa)*sum1
a=delta+Vcoul
do n=1,nmax
do m=1,nmax
write(6,*) n,m,a(n,m)
end do
end do
write(*,*) 'nmax et np'
n=nmax
call jacobi(a,n,np,d,v,nrot)
call eigsrt(d,v,n,np)

```

```

write(7,*) d
do i=1,nmax
do j=1,nmax
write(8,*) i,j,v(i,j)
end do
end do
do i=1,500
pas=0.1
x(i)=x(0)+i*pas
do m=1, nmax
u(1,i)=u(1,i)+sqrt(2/aa)*sin(m*pi*x(i))*v(m,nmax)
u(2,i)=u(2,i)+sqrt(2/aa)*sin(m*pi*x(i))*v(m,nmax-1)
enddo
write(12,*) aa*x(i), u(1,i)/(aa*x(i))
write(13,*) aa*x(i), u(2,i)/(aa*x(i))
Rex=2*exp(-aa*x(i))
Rex1=(1.-(aa*x(i)/2.))*exp(-aa*x(i)/2.)/sqrt(2.)
write(16,*) aa*x(i), Rex
write(17,*) aa*x(i), Rex1
end do
write(*,*) 'val pr', d(nmax),d(nmax-1),d(nmax-2),d(nmax-3)
write(*,*) 'val pr', d(1),d(2),d(3),d(4)
do n=1,nmax
eexact(n)=(pi*n*a0/aa)**2-(2*a0/aa)*(gamma+log(2*pi*n))
eexact1(n)=(pi*n*a0/aa)**2
eexact2(n)=-1./n**2
end do
write(9,*) eexact
write(10,*) eexact1
write(11,*) eexact2
end program trapeze
function f(x,k)
integer k
real pi

```

```

pi=3.141592653
f=(1-cos(k*pi*x))/x
return
end function

```

Le potentiel de Yukawa

```

program trapeze
implicit none
integer :: i, n, m, nmax
integer, parameter :: np=1000      ! si tu change nmax change aussi np=nmax
real, parameter :: pi=3.141592653, E0=13.606, gamma=0.577215665, aa=50
real, dimension(np) :: d, eexact1, eexact2, eexact
real, dimension(2,0 : 10000) :: u
real :: nbrpt, pas, a0, f0, cst, Rex, Rex1
real :: f
real, dimension(0 : 10000) :: x
real, dimension(np, np) :: delta, s1, s2, sum1, Vyuk, a, v
integer :: nrot, j
read(*,*) nmax !,cst
nbrpt=1000
a0=1.0d0
!cst=1.0d0
open(1,file='result. les valeurs',status='new')

x(0)=0.0d0
pas=1.0d0/nbrpt
x(1)=0.0d0+pas
do n=1,nmax
do m=1,nmax
f0=0.0d0
s1(n,m)=s1(n,m)+(f(x(1),n+m)+f0)*pas/2.
s2(n,m)=s2(n,m)+(f(x(1),n-m)+f0)*pas/2.
if(n/=m) then

```

```

delta(n,m)=0.0
else
delta(n,m)=(pi*n*a0/aa)**2
end if
do i=2,nbrpt
x(i)=x(0)+i*pas
s1(n,m)=s1(n,m)+(f(x(i),n+m)+f(x(i-1),n+m))*pas/2.
s2(n,m)=s2(n,m)+(f(x(i),n-m)+f(x(i-1),n-m))*pas/2.
end do
end do
end do
sum1=s1-s2
Vyuk=-2*cst*(a0/aa)*sum1
a=delta+Vyuk

do n=1,nmax
do m=1,nmax
write(6,*) n,m,a(n,m)
end do
end do
write(*,*) 'nmax et np'
n=nmax
call jacobi(a,n,np,d,v,nrot)
call eigsrt(d,v,n,np)
write(7,*) d
do i=1,nmax
do j=1,nmax
write(8,*) i,j,v(i,j)
end do
end do
do i=1,nbrpt
x(i)=x(0)+i*pas
do m=1, nmax
u(1,i)=u(1,i)+sqrt(2/aa)*sin(m*pi*x(i))*v(m,nmax)

```

```

u(2,i)=u(2,i)+sqrt(2/aa)*sin(m*pi*x(i))*v(m,nmax-1)
enddo
write(12,*) aa*x(i), u(1,i)/(aa*x(i))
write(13,*) aa*x(i), u(2,i)/(aa*x(i))
write(19,*) x(i), u(1,i)
write(20,*) x(i), u(2,i)
Rex=2*exp(-aa*x(i))
Rex1=(1.-(aa*x(i)/2.))*exp(-aa*x(i)/2.)/sqrt(2.)
write(16,*) aa*x(i), Rex
write(17,*) aa*x(i), Rex1
write(14,*) aa*x(i),Rap
write(15,*) aa*x(i), Rap1
end do
write(*,*) 'val pr', d(nmax),d(nmax-1),d(nmax-2),d(nmax-3)
write(*,*) 'val pr', d(1),d(2),d(3),d(4)
do n=1,nmax
eexact(n)=(pi*n*a0/aa)**2-(2*a0/aa)*(gamma+log(2*pi*n))
eexact1(n)=(pi*n*a0/aa)**2
eexact2(n)=-1./n**2
end do
write(9,*) eexact
write(10,*) eexact1
write(11,*) eexact2
end program trapeze
function f(x,k)
integer k
real pi,mu,a0,aa
pi=3.141592653
mu=0.8
a0=1.0d0
aa=50
f=(1-cos(k*pi*x))*exp(-(mu*aa*x)/a0)/x
return
end function

```

Le but du code est de construire les éléments de la matrice, h_{nm} . Construire les éléments de la matrice nécessaire.

Le tableau à deux dimensions, $a(n, m)$ contient maintenant la matrice hamiltonienne. On fait appel deux routines Numerical Recipes 5 qui diagonalisent et tirent les valeurs propres et les vecteurs propres.

Ces deux routines, qui diagonalisent la matrice $a(n, m)$ sont appelées Jacobi (a, n_{max}, d, v) et eigprt (d, v, n_{max}). Les valeurs propres sont stockées dans le tableau $d(n)$ et les vecteurs propres dans les deux dimensionnels, $v(m, n)$.

La subroutine

Subroutine Jacobi (a,n,np,d,v,nrot)

Integer n, np, nrot, NMAX

Real a(np,np), d(np), v(np,np)

Parameter (NMAX=2000)

Calcule toutes les valeurs propres et les vecteurs propres d'une matrice symétrique réelle a , qui est de taille n par n , stockée dans un n_p physique par un tableau n_p . En sortie, les éléments situés au-dessus de la diagonale sont détruits. d renvoie les valeurs propres de a dans ses n premiers éléments. v est une matrice avec les mêmes dimensions logiques et physiques que a , dont les colonnes contiennent, en sortie, les vecteurs propres normalisés de a . $nrot$ renvoie le nombre de rotations de Jacobi requises

Real c, g, h, s, sm, t, tau, theta, tresh, b(NMAX), z(NMAX)

do ip=1,n !Initialiser à la matrice d'identité.

do iq=1,n

v(ip,iq)=0.

end do

v(ip,ip)=1.

End do

do ip=1,n

b(ip)=a(ip,ip) ! Initialiser b et d à la diagonale de a.

d(ip)=b(ip)

z(ip)=0. ! Ce vecteur accumulera les termes de la forme $tapq$

end do

```

nrot=0
do i=1,50
sm=0.
do ip=1,n-1          ! Somme des éléments diagonaux.
do iq=ip+1,n
sm=sm+abs(a(ip,iq))
end do
end do
if(sm.eq.0.) then
return          ! Le retour normal, qui repose sur la convergence quadratique à l'underflow
de la machine.
tresh=0.2*sm/n**2          ! ... sur les trois premiers balayages.
else
tresh=0.          ! ...après.
end if
do ip=1,n-1
do iq=ip+1,n
g=100.*abs(a(ip,iq))
          ! Après quatre balayages, sautez la rotation si l'élément diagonal est petit.
if((i.gt.4).and.(abs(d(ip))+g.eq.abs(d(ip))).and.(abs(d(iq))+g.eq.abs(d(iq))))then
a(ip,iq)=0.
else if(abs(a(ip,iq)).gt.tresh)then
h=d(iq)-d(ip)
if(abs(h)+g.eq.abs(h))then

t=a(ip,iq)/h
else
theta=0.5*h/a(ip,iq)
t=1./(abs(theta)+sqrt(1.+theta**2))
if(theta.lt.0.)t=-t
end if
c=1./sqrt(1+t**2)
s=t*c
tau=s/(1.+c)

```

```

h=t*a(ip,iq)
z(ip)=z(ip)-h
z(iq)=z(iq)+h
d(ip)=d(ip)-h
d(iq)=d(iq)+h
a(ip,iq)=0.

```

```
do j=1,ip-1
```

! Cas des rotations $1 \leq j < p$.

```

g=a(j,ip)
h=a(j,iq)
a(j,ip)=g-s*(h+g*tau)
a(j,iq)=h+s*(g-h*tau)
end do

```

```
do j=ip+1,iq-1
```

! Cas des rotations $p < j < q$.

```

g=a(ip,j)
h=a(j,iq)
a(ip,j)=g-s*(h+g*tau)
a(j,iq)=h+s*(g-h*tau)
end do

```

```
do j=iq+1,n
```

! Cas des rotations $q < j \leq n$.

```

g=a(ip,j)
h=a(iq,j)
a(ip,j)=g-s*(h+g*tau)
a(iq,j)=h+s*(g-h*tau)
end do

```

```
do j=1,n
```

```

g=v(j,ip)
h=v(j,iq)
v(j,ip)=g-s*(h+g*tau)
v(j,iq)=h+s*(g-h*tau)
end do

```

```
nrot=nrot+1
```

```
end if
```

```
end do
```

```
end do
```

```

do ip=1,n
b(ip)=b(ip)+z(ip)
d(ip)=b(ip) ! Mise à jour d avec la somme de tapq,
z(ip)=0. ! et réinitialiser z.
end do
end do
pause 'too many iterations in Jacobi'
return
end

```

Notez que la routine ci-dessus suppose que les sous-flux sont mis à zéro. Sur les machines où ce n'est pas vrai, le programme doit être modifié. Les valeurs propres ne sont pas ordonnées en sortie. Si le tri est souhaité, la routine suivante peut être invoquée pour réorganiser la sortie de Jacobi ou de routines ultérieures dans ce chapitre. (La méthode, insertion directe, est N^2 plutôt que $N \log N$, mais puisque vous venez de faire une procédure N^3 pour obtenir les valeurs propres, vous pouvez vous permettre cette petite indulgence.)

Subroutine eigstr(d,v,n,np)

Integer n,np

Real d(np),v(np,np)

Étant donné que les valeurs propres d et les vecteurs propres v sont fournis par Jacobi (x11.1) ou tqli (x11.3), cette routine trie les valeurs propres dans l'ordre décroissant et réorganise les colonnes de v en conséquence. La méthode est l'insertion directe.

```

integer i, j, k
real p
do i = 1, n-1
k = i
p = d(i)
do j = i+1, n
if (d(j).ge.p) then
k = j
p = d(j)
end if
end do

```

```
if (k.ne.i) then
d(k) = d(i)
d(i) = p
do j= 1, n
p = v(j,i)
v(j, i) =v (j, k)
v(j, k) = p
end do
end if
end do
return
end
```

Bibliographie

Livre, monographie

- [1] Claude Aslangul, Mécanique quantique2 (Développements et applications à base énergie)
- [2] Mécanique quantique, Jean-Haldik (Masson))
- [3] The text by D. J. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics (Pearson/Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 2005), 2nd edition.
- [4] The rigorous argument is a little more involved. See R. Shankar, “Principles of Quantum Mechanics,” (Plenum New York, 1980).
- [5] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky et W. T. Vetterling, Recettes Numériques: L'Art de l'Informatique Scientifique (Cambridge University Press, Cambridge, 1986).

Article d'actes de conférence

- [6] B.A. Jugdutt and F. Marsiglio American Journal of Physics **81**, 343 (2013)
Department of Physics, University of Alberta, Edmonton, Alberta, Canada, T6G 2E1
Physics Division, School of Science and Technology University of Camerino, I-62032
Camerino (MC), Italy
(Dated: January 14, 2013)
- [7] F. Marsiglio, “The harmonic oscillator in quantum mechanics : a third way,” Am. J. Phys. 77, 253-258 (2009).

Articles de revue

- [8] J.V. Kinderman, “An computing laboratory for introductory quantum mechanics,” Am. J. Phys. 58, 568-573 (1990).
- [9] E.R. Vrscaj, “Hydrogen atom with a Yukawa potential: Perturbation theory and continued-fractions-Padé approximants at large order,” Phys. Rev. A33, 1433-1436 (1986).

Livre (autre exemple)

- [10] Introduction aux méthodes numériques deuxième édition(Franck Jedrzejewski CEA Saclay - INSTN / UERTI 91191 Gif-sur-Yvette Cedex)
- [11] Quantum Mechanics Lecture Notes J. W. Van Orden Department of Physics Old Dominion University August 21, 2007

Documents web

- [12] arXiv:1211.3240.
- [13] <http://arxiv.org/abs/hep-ph/0407258>
- [14] Mémoire de Master de Boudjela à l'Université Abdelhamid Ben Badis - Mostaganem
Faculté des Sciences Exactes et de l'Informatique, Département de Physique.