

UTILISATION DE TECHNIQUES NUMÉRIQUES DANS L'ENSEIGNEMENT DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE

H. GAGNAIRE et J. PIGEON
Faculté des Sciences et Techniques,
Université Jean Monnet
23, rue du Docteur Paul Michelon
42023 Saint Etienne Cedex

INTRODUCTION

Pour illustrer, dans un cours d'introduction, les principes de la mécanique quantique, on étudie en général les états stationnaires liés d'un système à une dimension. En fait le champ d'investigation est très restreint car peu de problèmes ont des solutions analytiques aisées à établir. Les études sont limitées à l'oscillateur harmonique et au puits de potentiel carré de profondeur finie ou infinie. Pour chacun de ces problèmes, la résolution mathématique utilisée est différente. Pour le puits de potentiel carré de profondeur infinie, la résolution est très simple [1]. Pour le puits de potentiel de profondeur finie, une résolution graphique s'impose [1], tandis que pour l'oscillateur harmonique une résolution polynômiale [2] ou une résolution à l'aide d'opérateurs création et annihilation peuvent être envisagées [3]. Les idées de la physique sont "noyées" dans tout cet arsenal mathématique et l'étudiant débutant en mécanique quantique voit mal le lien qui peut exister entre ces différents problèmes. De plus, si les valeurs propres sont déterminées assez aisément, l'allure des fonctions propres correspondantes est toujours plus pénible à préciser.

Dans cet article, pour intégrer l'équation aux valeurs propres de l'opérateur hamiltonien, nous avons adapté la méthode numérique proposée récemment pour des problèmes à trois dimensions à symétrie sphérique [4]. Cette méthode permet de lever toutes les difficultés que nous venons de mentionner. Le potentiel caractéristique du système peut être quelconque. Les fonctions propres et les valeurs propres sont calculées simultanément.

En outre, cette méthode présente l'avantage de bien illustrer le fait qu'à une valeur propre donnée est toujours associée une fonction propre dont le comportement asymptotique est physiquement acceptable.

Les calculs ont été effectués à l'aide du langage C de Borland installé sur un micro-ordinateur compatible PC (processeur 80386 avec coprocesseur).

PRESENTATION DE LA METHODE

Rechercher les états stationnaires d'un système physique revient à résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps (ou équation aux valeurs propres de l'opérateur hamiltonien H) qui lui est associée :

$$H \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + V(x) \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (1)$$

où $V(x)$ est la fonction énergie potentielle du système à une dimension ; E est la valeur propre de H associée à la fonction propre non dégénérée $\Psi(x)$. L'origine de l'axe xx' est choisie dans le voisinage du minimum, noté $V_{\min}$, de la fonction $V(x)$. Les états liés du système sont caractérisés par des valeurs propres comprises entre $V_{\min}$ et la plus petite des deux valeurs prises par la fonction $V(x)$ lorsque x tend vers plus ou moins l'infini. L'équation (1) peut s'écrire sous une forme différente. En faisant le changement de variable $x = CX$ où C est une constante, on obtient :

$$\frac{d^2 \Psi}{dX^2} + \frac{2mC^2}{\hbar^2} (E - V(X)) \Psi = 0$$

soit :

$$\frac{d^2 \Psi}{dX^2} + (\epsilon - v(X)) \Psi = 0 \quad (2)$$

avec :

$$\epsilon = \frac{2mC^2}{\hbar^2} E ; v(X) = \frac{2mC^2}{\hbar^2} V(X) \quad (2bis)$$

Pour intégrer l'équation (2), on peut introduire la fonction Ψ_1 définie par :

$$\Psi_1 = \frac{d\Psi}{dX}$$

L'équation (2) peut s'écrire sous la forme d'un système de deux équations différentielles couplées du premier ordre :

$$\begin{aligned}\frac{d\Psi_1}{dX} &= f_1(X, \Psi; \epsilon) = (v(X) - \epsilon) \Psi \\ \frac{d\Psi}{dX} &= f_2(\Psi_1) = \Psi_1\end{aligned}\quad (3)$$

On peut intégrer ce système en utilisant la méthode récurrente de Runge-Kutta d'ordre 4 [5]. Les valeurs prises par les fonctions Ψ_1 et Ψ dépendent du paramètre ϵ et des conditions aux limites imposées à chacune d'elles.

Pour les états stationnaires liés les fonctions propres sont des fonctions de carré sommable. De ce fait, on doit imposer à $\Psi(X)$ d'être nulle quand X tend vers moins l'infini. Le principe de la méthode proposée est de choisir les valeurs du paramètre ϵ pour que la fonction d'onde tende également vers 0 quand X tend vers plus l'infini. Nous obtenons ainsi simultanément les valeurs propres et les fonctions propres correspondantes.

Dans la pratique, l'intégration numérique de ces deux équations nous amène à définir une valeur positive X_L suffisamment grande devant une dimension caractéristique du système considéré et à donner à Ψ une valeur nulle quand la variable X est égale à $-X_L$. Pour cette valeur $-X_L$ nous attribuons à Ψ_1 une valeur faible mais arbitraire. Les paramètres ϵ qui donnent une estimation correcte des valeurs propres sont ceux qui imposent, par récurrence croissante, à la fonction Ψ d'être nulle quand la variable X est égale à $+X_L$. Les valeurs propres sont donc déterminées par essais successifs. Leur estimation est d'autant meilleure que la fonction Ψ est calculée précisément. Pour cela le pas d'incrémentement sur la variable X doit être très faible. Dans nos calculs nous avons pris 10000 points entre $-X_L$ et $+X_L$.

Les valeurs de ϵ déterminées par cette méthode dépendent donc légèrement de X_L et sont entachées d'une erreur systématique d'autant plus faible que X_L est grand. En outre la sommation des valeurs prises par le carré de la fonction Ψ au cours de la récurrence permet d'obtenir une normalisation de la fonction propre qui rend cette dernière indépendante du choix arbitraire pour la fonction Ψ_1 en $-X_L$.

UTILISATION DE LA METHODE

Pour illustrer la validité de cette méthode, nous allons tout d'abord nous intéresser à deux problèmes qui ont des solutions analytiques.

Le premier est le puits de potentiel de profondeur infinie centré sur l'origine de l'axe des x . L'origine de l'énergie potentielle est choisie au fond du puits. Pour ce problème particulier où la fonction d'onde est évidemment nulle en dehors du puits (et pas uniquement lorsque $|x|$ tend vers l'infini), on doit nécessairement faire correspondre les deux valeurs $\pm x_L$ aux deux bords du puits. L'équation à résoudre est alors :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \varepsilon \Psi = 0 \quad \text{avec } -x_L < x < +x_L \text{ et } \Psi(\pm x_L) = 0$$

Un calcul analytique simple montre que les valeurs propres sont données par :

$$\varepsilon = n^2 (\pi/2x_L)^2 \quad \text{avec } n \in \mathbb{N}^*$$

Les états pairs correspondent aux valeurs impaires de n et vice-versa. En choisissant pour simplifier $x_L = \pi/2$, les valeurs propres sont données par $\varepsilon = n^2$.

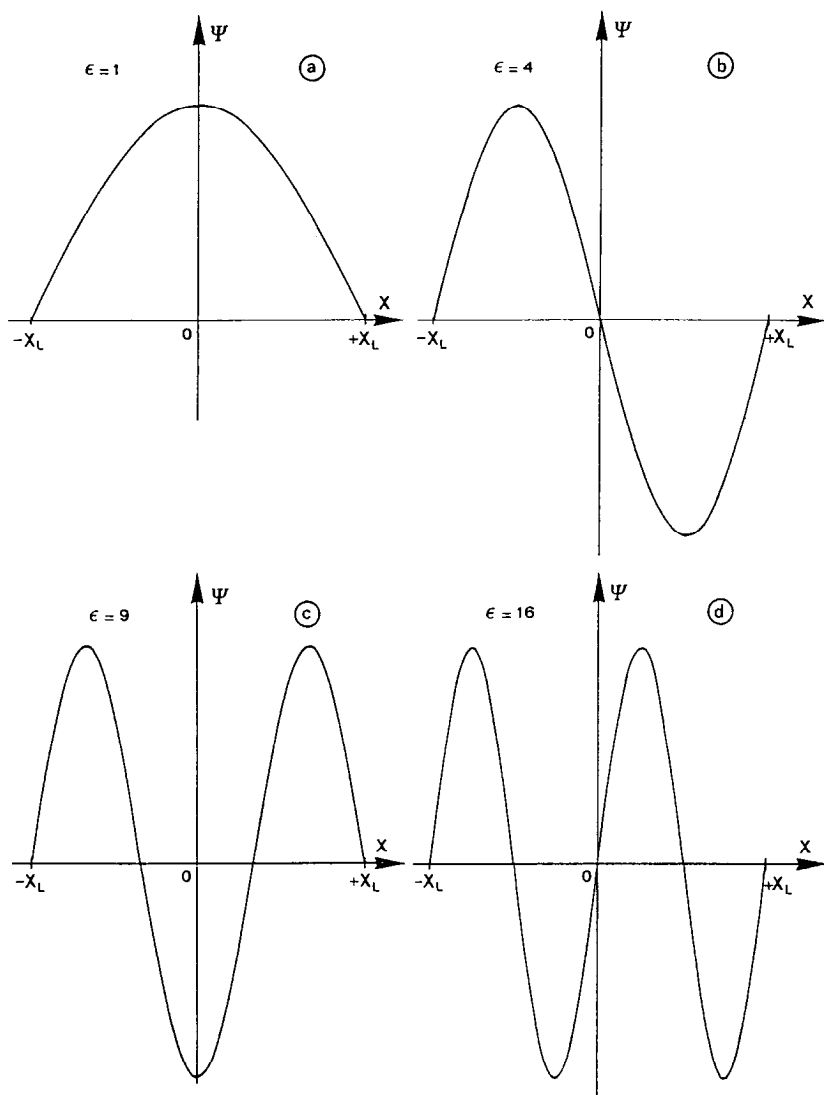
L'intégration numérique permet de retrouver avec une bonne précision l'ensemble de ces résultats. Le tableau I donne les valeurs de la fonction Ψ en $+x_L$ pour divers paramètres ε choisis dans le voisinage de la valeur propre correspondant à l'état fondamental ($\varepsilon = 1$).

$x_L = \pi/2 ; \quad \Psi(-x_L) = 0$	
ε	$\Psi(+x_L)$
0.9998	+0,000251
0.9999	+0.000125
1.0000	0.000000
1.0001	-0.000125
1.0002	-0,000251

Tableau I

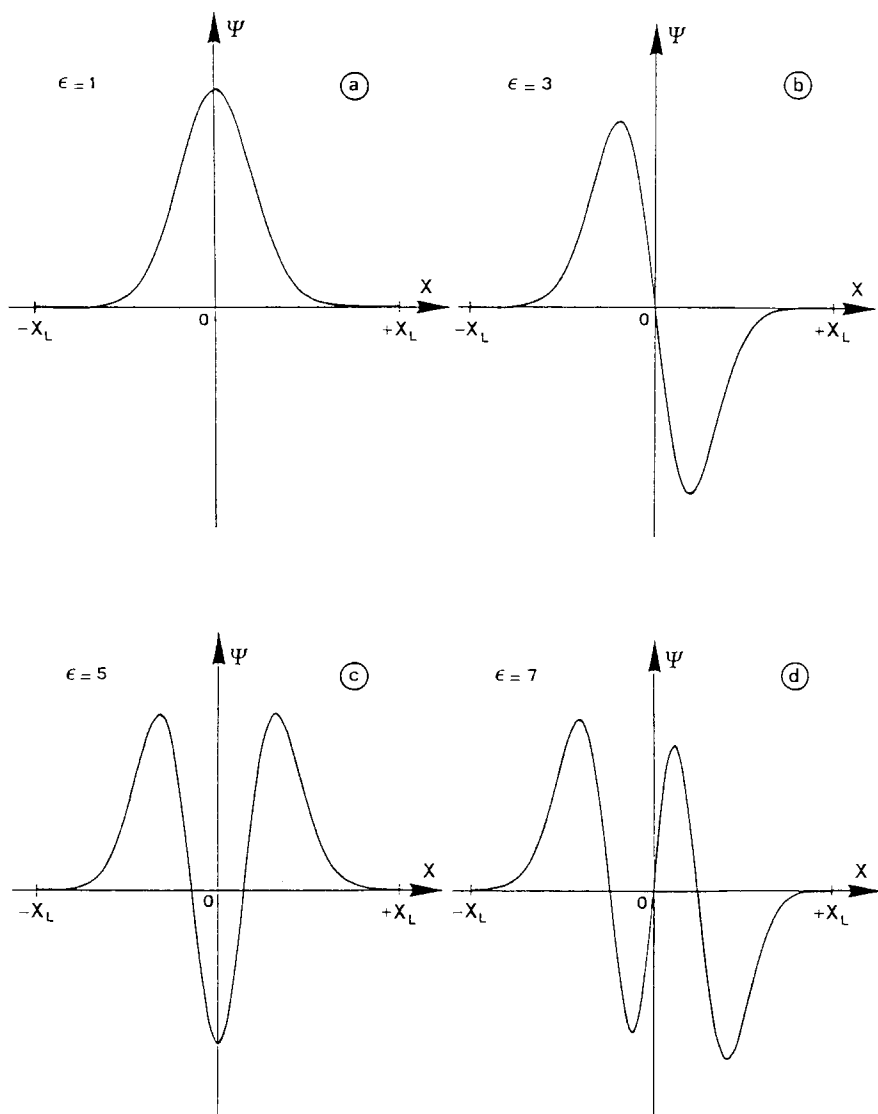
Ces résultats montrent que la valeur propre peut être déterminée sans ambiguïté.

Sur les figures 1a à 1d sont représentées les quatre premières fonctions propres. On constate qu'elles possèdent bien la bonne parité.



Figures 1a à 1d

Fonctions propres correspondant aux quatre premiers niveaux du puits de potentiel de profondeur infinie ($x_L = \pi/2$).



Figures 2a à 2d

Fonctions propres correspondant aux quatre premiers niveaux de l'oscillateur harmonique ($X_L = 5$).

Le second problème qui possède des solutions analytiques est celui de l'oscillateur harmonique dont la fonction énergie potentielle est $V(x) = 1/2 m \omega^2 x^2$. Les valeurs propres sont données par $E = (n + 1/2) \hbar \omega$ et les fonctions propres contiennent les polynômes de Hermite [2]. Dans ce cas nous devons écrire :

$$v(x) = \frac{m \omega^2 C^2}{\hbar^2} x^2$$

En choisissant C de telle manière que $v(x) = x^2$ nous obtenons à l'aide de la relation (2bis) :

$$\epsilon = \frac{2E}{\hbar \omega}$$

Les paramètres ϵ qui conduisent à des solutions physiquement acceptables sont donc les nombres entiers impairs.

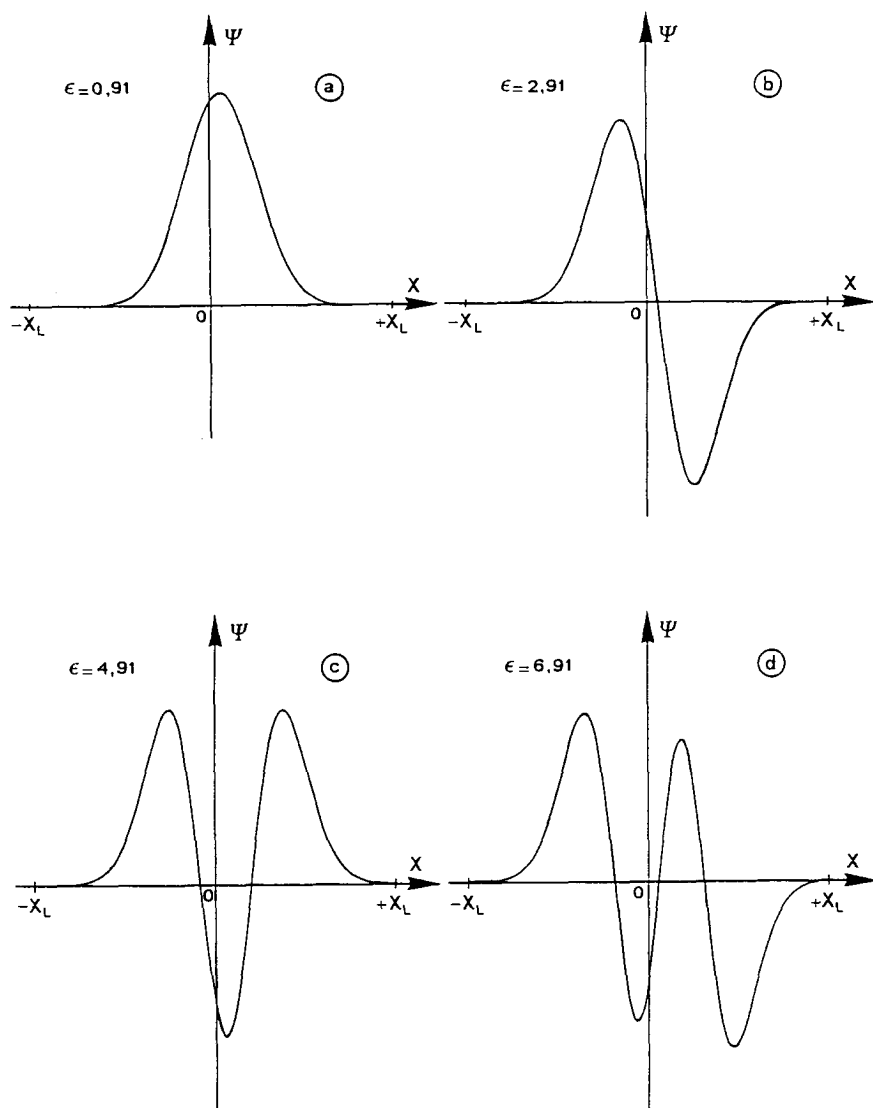
Les figures 2a à 2d montrent l'allure des fonctions propres calculées avec $X_L = 5$. Ce choix conduit à une erreur systématique relative très inférieure à 10^{-4} sur les valeurs de ϵ . Ceci peut se justifier car la fonction propre de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique est proportionnelle à $\exp(-x^2/2)$ dont la valeur $3,72 \cdot 10^{-6}$ pour $x = -X_L$ est très proche de 0.

Pour compléter cette étude, on peut supposer que la particule quantique possède une charge q et qu'elle est placée dans un champ électrique $\vec{E}$ uniforme et parallèle à l'axe des x. Dans ces conditions, il faut ajouter à l'énergie potentielle le terme $-q|\vec{E}|x$. Il est donc nécessaire de résoudre l'équation différentielle :

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + (\epsilon - x^2 + \lambda x) \psi = 0$$

où λ est une constante qui dépend des caractéristiques de la particule et du champ électrique. On se ramène au problème précédent en effectuant le changement de variable $x' = x - \lambda/2$. Les valeurs propres sont celles de l'oscillateur harmonique diminuées d'une quantité constante égale à $\lambda^2/4$ indépendante du signe de la charge q et du sens du champ électrique. Les fonctions propres sont celles de l'oscillateur harmonique à condition de décaler l'origine des x de $\lambda/2$.

Les résultats obtenus par l'intégration numérique confirment l'ensemble de ces prévisions. Ils sont représentés sur les figures 3a à 3d pour $X_L = 5$ et $\lambda = 0,6$. On doit les comparer avec les résultats des figures 2a à 2d.



Figures 3a à 3d

Fonctions propres correspondant aux quatre premiers niveaux de l'oscillateur harmonique plongé dans un champ électrique constant ($X_L = 5$).

Les problèmes que nous venons de traiter montrent la validité de la méthode proposée pour déterminer les états stationnaires d'un système physique. Nous allons maintenant l'appliquer à trois problèmes qui ne possèdent pas de solutions analytiques.

Le premier concerne l'oscillateur "anharmonique" [6]. Par définition, l'énergie potentielle de cet oscillateur est celle de l'oscillateur harmonique augmentée d'un terme ηx^3 . C'est un excellent exemple d'application de la théorie des perturbations stationnaires pour les systèmes non dégénérés. En utilisant le même changement de variable que pour l'oscillateur harmonique, l'équation à résoudre est alors :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + (\epsilon - x^2 - \mu x^3) \Psi = 0$$

où μ est une constante qui dépend de η et des caractéristiques de la particule. L'approximation au second ordre des valeurs propres déduite de la théorie des perturbations est :

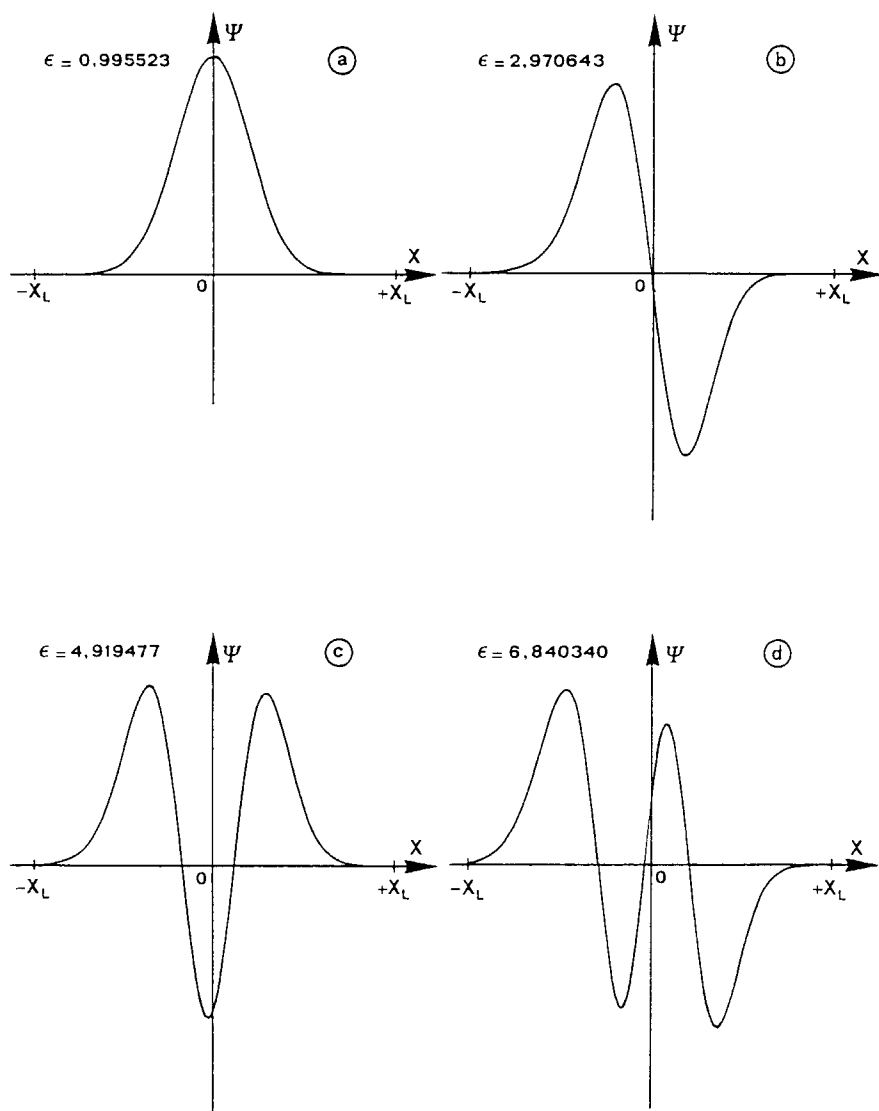
$$\epsilon = 2n + 1 - \frac{15(2n+1)^2 + 7}{16} \frac{\mu^2}{2}$$

Les niveaux d'énergie ne sont plus régulièrement espacés comme ceux de l'oscillateur harmonique mais se resserrent quand n augmente quelque soit le signe de μ . La théorie des perturbations permet également d'écrire assez aisément le développement au premier ordre des fonctions propres du système perturbé sur la base des fonctions propres de l'oscillateur harmonique. La plupart des ouvrages de mécanique quantique ne donne aucune représentation graphique de ces fonctions.

La méthode d'intégration numérique permet de retrouver les valeurs propres et présente l'avantage de visualiser l'allure des fonctions propres. Dans nos calculs, nous avons choisi $x_L = 5$ et un terme perturbateur tel que $\mu = -0,08$. Le tableau II compare les valeurs propres des quatre premiers niveaux calculées à l'aide de la théorie des perturbations à celles que nous avons déterminées.

$x_L = 5 \quad ; \quad \Psi(-x_L) = 0$	
$\epsilon_{\text{integr.}}$	$\epsilon_{\text{pert.}}$
0,995523	0,9956
2,970643	2,9716
4,919477	4,9236
6,840340	6,8516

Tableau II



Figures 4a à 4d

Fonctions propres correspondant aux quatre premiers niveaux de l'oscillateur anharmonique ($X_L = 5$).

Nous constatons que les résultats sont en excellent accord. Pour l'intégration numérique, nous avons dû préciser la valeur de ϵ jusqu'à la sixième décimale pour que la fonction d'onde tende vers 0 quand $X = X_L$. Ces six chiffres ne correspondent pas toutefois à une précision de l'ordre de 10^{-6} car les résultats dépendent de la valeur de X_L et du nombre de pas d'incrémentation.

Les fonctions propres correspondant aux quatre premiers niveaux sont représentées sur les figures 4a à 4d. On constate que l'allure des fonctions associées aux niveaux 3 et 4 diffèrent sensiblement des fonctions propres correspondantes de l'oscillateur harmonique. En particulier, elles ne conservent pas les propriétés de parité.

La méthode que nous proposons permet d'intégrer l'équation de Schrödinger quand l'énergie potentielle du système est proportionnelle à x^4 . Ce problème présente de l'intérêt en théorie des champs [7]. Cette énergie potentielle est intermédiaire entre celle de l'oscillateur harmonique et celle du puits de potentiel carré de hauteur infinie (qui correspond en fait à x^α avec α qui tend vers l'infini).

Nous avons déterminé les niveaux d'énergie en prenant $v(X) = X^4$ et $X_L = 3$. Désignons par ϵ_1 et ϵ_n respectivement l'énergie du niveau fondamental et l'énergie d'un des niveaux excités. La figure 5 représente la variation avec n du rapport ϵ_n / ϵ_1 pour l'oscillateur harmonique, le puits de potentiel carré infini et le potentiel en x^4 . Pour l'oscillateur harmonique cette variation est linéaire, tandis qu'elle est parabolique pour le puits de potentiel carré. Pour le potentiel en x^4 , on constate que cette variation est comprise entre les deux précédentes.

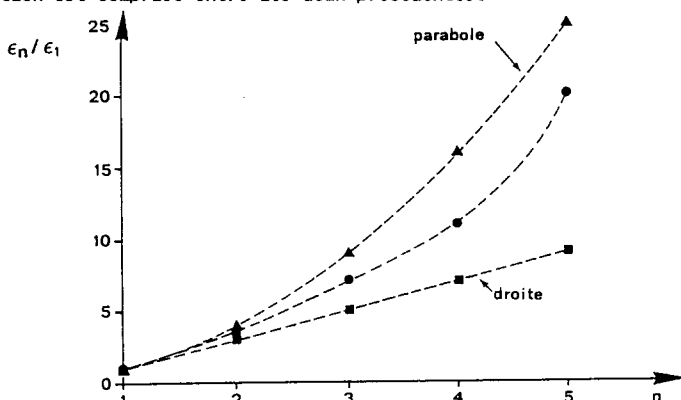
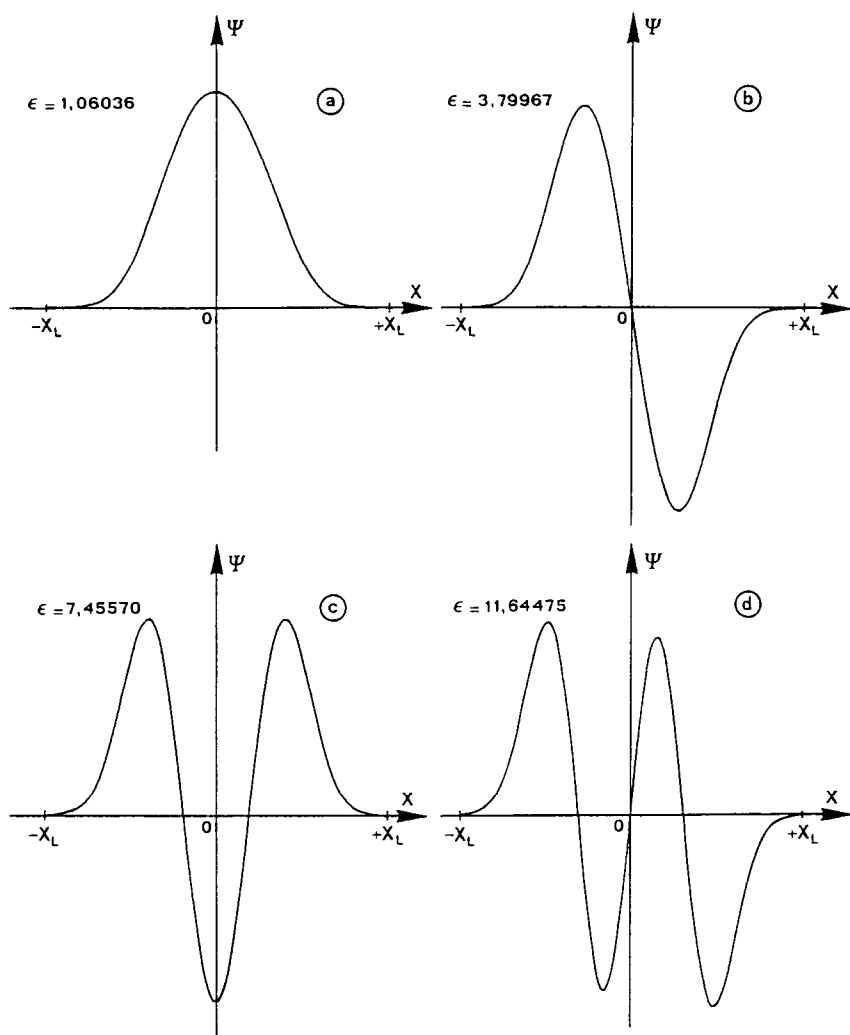


Figure 5

Evolution du rapport ϵ_n / ϵ_1 avec le numéro du niveau excité pour l'oscillateur harmonique (■), le puits de potentiel de profondeur infinie (▲) et le potentiel en x^4 (●).

Les figures 6a à 6d représentent les fonctions d'onde correspondant aux quatre premiers niveaux. La comparaison de ces figures avec celles relatives au puits de potentiel carré infini et à l'oscillateur harmonique montre que les allures des fonctions propres correspondant à un niveau donné sont très semblables quelque soit la forme du puits de potentiel. L'un des principaux intérêts de cette méthode est de pouvoir faire cette comparaison aisément.



Figures 6a à 6d

Fonctions propres correspondant aux quatre premiers niveaux du système plongé dans un potentiel en X^4 ($X_L = 5$).

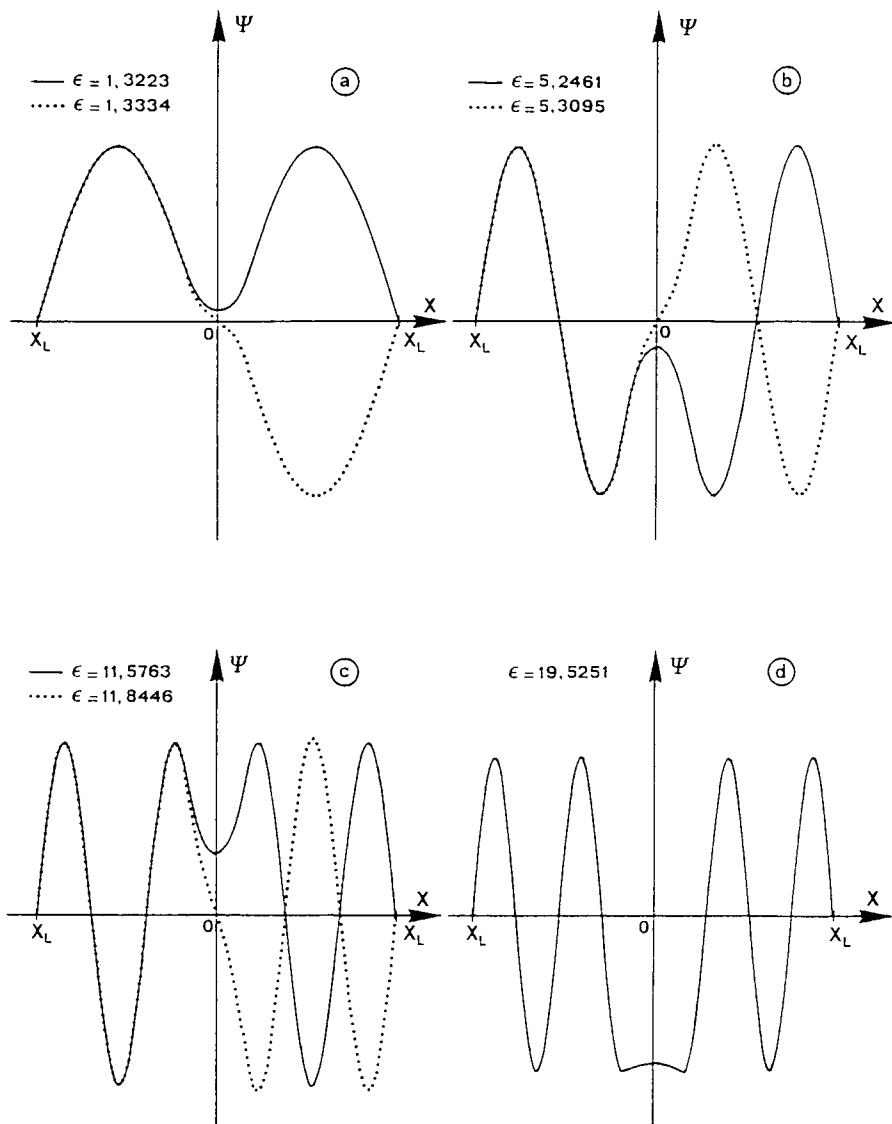
Un autre problème intéressant et différent des précédents est celui où l'énergie potentielle du système est l'association de deux puits de potentiel carré séparés par une barrière de hauteur V_0 finie (Fig 7). En référence [8], on montre que cette fonction constitue une bonne approximation de l'énergie potentielle dans l'étude de l'inversion de la molécule d'ammoniac (NH_3). Ce problème peut être résolu graphiquement et on peut montrer qualitativement qu'il existe des couples d'états pair et impair d'énergies voisines inférieures à V_0 notées respectivement ϵ_p^n et ϵ_i^n où n est un entier positif. Il est assez pénible de démontrer rigoureusement que ϵ_p^n est inférieure à ϵ_i^n . La méthode que nous avons décrite peut être également appliquée avec succès. Les résultats obtenus pour les valeurs de paramètres indiquées sur la figure 7 sont rassemblés dans le tableau III et sur les figures 8a à 8d.

$X_L = 3 ; X_0 = 0,5 ; V_0 = 20$	
n	ϵ
1	1,3223 p
	1,3333 i
2	5,2461 p
	5,3095 i
3	11,5763 p
	11,8446 i
4	19,5251 p
5	20,7402 i

← V_0

Tableau III

Le tableau III montre effectivement que, lorsque les énergies sont inférieures à V_0 , deux états, l'un pair et l'autre impair, ont des énergies très proches. La différence des énergies des ces niveaux pair et impair $\epsilon_i^n - \epsilon_p^n$ est très inférieure à la différence $\epsilon_p^{n+1} - \epsilon_p^n$ correspondant à deux niveaux pairs d'ordre différent. On peut alors très facilement justifier l'étude d'un problème à deux niveaux dans ce cas-là. Le tracé de la fonction d'onde montre également que la probabilité de présence de la particule sous la barrière de potentiel n'est pas nulle (effet tunnel).



Figures 8a à 8d

Fonctions propres correspondant aux niveaux d'énergie inférieurs à ν_0 .

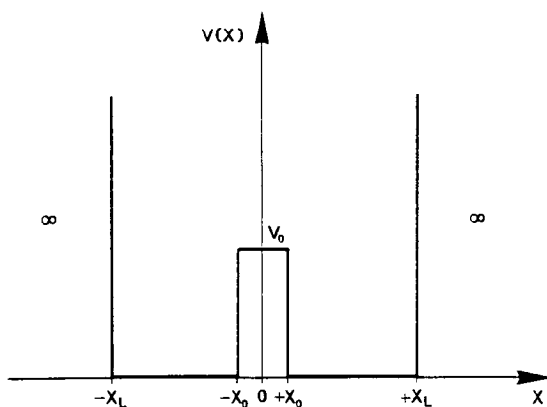


Figure 7

Allure de la fonction énergie potentielle pour l'étude de l'inversion de la molécule d'ammoniac ($X_L = 3$, $X_0 = 0,5$, $V_0 = 20$).

CONCLUSION

Dans l'esprit de certains enseignants, intégrer une équation différentielle de la physique par des techniques numériques ne présente qu'un faible intérêt pédagogique. On peut faire à ce sujet plusieurs remarques. Tout d'abord, les moyens de calcul se sont "démocratisés" au cours de ces dernières années tout en devenant très performants. Le microordinateur est un outil que le physicien ne peut plus ignorer. Par ailleurs les méthodes de résolution numérique sont de plus en plus enseignées en mathématique et ces techniques sont donc des acquis que possède souvent très bien le jeune physicien.

La méthode numérique que nous venons de présenter et d'appliquer à l'équation de Schrödinger indépendante du temps présente un intérêt pédagogique évident. Elle repose sur une idée forte : les conditions aux limites que l'on impose à la fonction propre dans l'étude des états liés entraîne la quantification de l'énergie. Cette idée n'apparaît clairement, dans le cas où le problème traité a une solution analytique, que si une "résolution polynomiale" est possible. On constate en outre que les fonctions propres correspondant à ces différents puits de potentiel dépendent en fait peu de la forme du puits. Ce résultat n'est jamais évoqué dans les ouvrages de mécanique quantique.

Ajoutons par ailleurs que cette méthode ne concerne pas uniquement l'étude des problèmes généralement traités dans la littérature. Son domaine d'application est pratiquement illimité. Elle peut également être utilisée dans d'autres domaines que celui de la mécanique quantique, en particulier pour résoudre tout problème d'équation aux valeurs propres comme c'est le cas lors de l'étude de la propagation dans un guide d'onde.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] Mécanique quantique I - C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloe - Hermann 1973 - p 76.
- [2] Ibid - p 535.
- [3] Ibid - p 481.
- [4] "Direct numerical integration of the radial equation" F. Rioux - *American Journal of Physics* (1991) 59, p 474.
- [5] Applied numerical method - B. Carnahan, H. A. Luther and J. O. Wilkes - John Wiley and Sons 1969 - p 361.
- [6] Mécanique quantique II - C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloe - Hermann 1973 - p 1102.
- [7] "Quantum mechanical study of particles in 'softened' potential boxes and wells" L. S. Salter - *American Journal of Physics* (1990) 58, p 971.
- [8] Mécanique quantique I - C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloe - Hermann 1973 - p 458.