

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA
FACULTE DES SCIENCES



MEMOIRE

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

Spécialité : PHYSIQUE

Option : Physique Computationnelle

Présentée Par :

Fattah Nour ikram

Sur le thème

Résolution numérique de l'équation de Schrödinger via une perturbation en x^4

Soutenu le 22 /06/2022 devant le jury composé de :

B.lasri	Président	M.C	U.Saida
Smail.kouidri	Rapporteur	M.C	U.Saida
Abada Ahmed	Examineur	M.C	U. Saida

Année Universitaire 2021 - 2022

Dédicace

A ma chère mère

Pour son grand amour, ses sacrifices et toute l'affection

qu'elle m'a

Toujours offerte.

A mon cher père

Que Dieu bénisse son âme

Pour sa patience et son soutien pour arriver à ce niveau.

A ma sœurs, mon frère.

A mes chers amis.

Un merci spécial au professeur dr. Laasri pour son aide.

Je dédie ce modeste travail

Remerciements

Je remercie dieu le tout puissant de nous avoir donné la santé et la volonté d'entamer et de terminer ce mémoire.

Tout d'abord, ce travail ne serait pas aussi riche et n'aurait pas pu avoir le jour sans l'aide et l'encadrement de Dr.

Smail Kouidri. Je le remercie pour la qualité de son encadrement exceptionnel, pour sa patience, sa rigueur et sa disponibilité durant notre préparation de ce mémoire.

Je remercie infiniment le président de jury ainsi que ces membres d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Mes remerciements s'adressent également à tous mes professeurs pour leurs générosités et la grande patience dont ils ont su faire preuve malgré leurs charges académiques et professionnelles.

Je remercie profondément toutes les personnes qui m'ont aidé et soutenue de près ou de loin.

Introduction générale **6**

Chapitre I Les idées fondamentales de la mécanique quantique **9**

I.1.Introduction.....10

I.2.Les idées fondamentales de la mécanique quantique.....10

I.3. Expérience de Young10

I.4 Effet photoelectrique.....14

I.5 Spectres atomiques.....16

I.5.1 Modele de Bohr (1913).....17

I.5.2 Onde de De Broglie.....19

I.6 L'équation de Schrödinger.....21

I.7 Conclusion.....23

Références.....24

Chapitre II Théorie Des perturbations..... 25

II.1 Introduction.....26

II.2 La méthode de perturbation..... 26

II.3 théorie des perturbations indépendantes du temps.....26

II.3.1 systèmes non dégénérés.....26

II.3.a Terme d'ordre zéro.....27

II.3.b Termes du première ordre28

II.3.c Termes du deuxièmes ordre.....28

II.3.2 Corrections du première ordre.....28

II.3.2.a Calcul de l'énergie.....	28
II.3.2.b calcul du vecteur propre	29
II.3.3 Corrections du deuxièmes ordre.....	30
II.3.3.a calcul de l'énergie.....	30
II.4 Cas des niveaux d'énergie dégénérés.....	31
II.4.1 A l'ordre zéro.....	32
II.4.2 Corrections du première ordre.....	32
II.5 Conclusion.....	35
Références	44
Chapitre III Résolution numérique de l'équation de Schrödinger via une perturbation en x^4	
III.1 Introduction.....	38
III.2 Méthode des différences finies.....	38
III.3 Organigramme de calcul.....	40
III.4 Résultats et discussions.....	41
Conclusion général	46
Résumé	

Introduction générale

Ce travail de mémoire rentre dans le cadre de la préparation d'un diplôme de Master en physique computationnelle et porte sur le thème suivant : étude de l'équation de Schrödinger via une perturbation en X^4 .

Cette équation qui a bouleversé toute la physique a été établie en 1925, ne prend pas en compte la théorie de la relativité, qui est pourtant alors bien connue. Dans cette équation, l'espace et le temps n'interviennent pas de la même manière : le terme du temps est linéaire alors que celui de l'espace est quadratique.

En effet, pour trouver la forme mathématique de l'équation, Schrödinger a d'abord utilisé des formules relativistes (où les termes du temps et de l'espace sont tous deux quadratiques)

Mais cette voie le mena dans une impasse : les valeurs des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène calculées avec l'équation relativiste ne correspondaient pas aux résultats expérimentaux. Il recommença alors ses recherches à partir des formules classiques newtoniennes, les calculs correspondirent cette fois-ci aux résultats expérimentaux mais c'était une coïncidence fortuite ! En effet, son équation relativiste initiale ne prenait pas en compte le spin de l'électron, qui venait tout juste d'être mis en évidence. Or le moment magnétique de l'électron interagit avec celui de son orbite et par conséquent modifie les niveaux d'énergie. Par une heureuse coïncidence, cette modification des niveaux d'énergie est presque annulée par les effets relativistes, si bien qu'en traitant le problème classiquement (de manière non relativiste) et en négligeant le spin de l'électron, on obtient des résultats en accord avec l'expérience.

Quand dans un séminaire, Erwin Schrödinger expose les idées de Louis de Broglie, son collègue Peter debye s'exclame : «qu'est-ce que c'est que cette onde qui n'a pas d'équation ? ».

En effet, en générale, les physiciens posent d'abord des équations, puis ils cherchent à les résoudre.

Dans ce cas, au contraire, de Broglie avait d'abord postulé l'existence d'une onde sans en avoir posé d'équation. À la suite de ce séminaire, Schrödinger trouve en 1925 une équation pour les ondes de Louis de Broglie, posant ainsi les bases de la mécanique ondulatoire.

Erwin Schrödinger (1887-1961), physicien autrichien, professeur aux universités de Berlin, oxford et à l'Institute of Advanced Studies de Dublin. Il pose les bases de la mécanique quantique en postulant l'équation qui porte son nom. Il est versé aussi dans la philosophie et la littérature. En 1944, il publie *qu'est -ce que la vie ?* , ou il tente d'expliquer l'hérédité biologique ; ce livre aura une grande influence dans la découverte du code génétique. Prix Nobel de physique en 1933.

À La même époque, Werner Heisenberg arrive à la conclusion qu'il est impossible de déterminer avec précision la position et la vitesse d'une particule car cette dernière est toujours perturbée par son interaction avec l'instrument de mesure. Localiser un électron à l'aide de la lumière implique une interaction entre cet électron et un photon. Pour localiser plus précisément la position, il faut utiliser un photon de longueur d'onde plus petite, donc plus énergétique, qui produit sur l'électron qu'il heurte un changement de vitesse plus important. Pour mesurer plus précisément la vitesse de l'électron, il faut au contraire utiliser des photons moins énergétiques, donc de longueur d'onde plus grande, mais on perd alors en précision sur la position.

Heisenberg élabore ainsi la mécanique matricielle : au lieu d'utiliser comme Schrödinger une équation différentielle pour décrire l'évolution d'un système quantique, il utilise des objets mathématiques peu familiers aux physiciens de l'époque : des tableaux de nombres appelés matrices, qui ont la propriété de ne pas forcément commuter. La position et la vitesse des particules sont décrites par des matrices. L'impossibilité de déterminer simultanément avec précision la position et la vitesse d'une particule se traduit par le fait que la matrice correspondant à la position et celle correspondant à la vitesse ne commutent pas. Deux entités mathématiques commutent quand l'ordre dans lequel on les multiplie n'a pas d'importance et conduit au même résultat. Par exemple, le résultat de 3×5 est égale au résultat de 5×3 . Il existe au contraire des objets mathématique qui ne commutent pas : l'ordre dans lequel on les multiplie est déterminant. C'est le cas des rotations dans l'espace à trois dimensions : si l'on effectue d'abord une rotations autour de l'axe O_x puis une autre autour de l'axe O_z , le résultat est différent de celui obtenu en effectuant d'abord la rotation autour de l'axe O_z , puis celle autour de l'axe O_x .

Référence :

[1] M.Q Cohen tannaudji tome édition 2002 .

Chapitre I

Les idées

fondamentales

de la

mécanique

quantique

I-1 Introduction :

La physique classique ou physique de Newton, Galilée, Maxwell... atteint sa limite à la fin de XIXe siècle. Elle était principalement basée sur deux disciplines fondamentales nommées mécanique rationnelle et la théorie électromagnétique de Maxwell dont la première est associée à la mécanique statistique classique donnant naissance à la thermodynamique et la seconde construites qu'on appelle l'électricité et l'optique ondulatoire. Sa limite est atteinte suivant les insuffisances interprétation des expériences de l'époque telle que l'effet photoélectrique.

D'ailleurs le comportement macroscopique des particules à laissé incompréhensible devant les nouvelles expériences. Elle repose sur le vecteur position qui suivant sa variation on peut déduire la vitesse et l'accélération de n'importe qu'elle Corps de masse M .

En *grosso modo* on dit que la physique classique est liée à tous les phénomènes qu'on peut les voir à l'œil nu.

Nous allons dans ce chapitre montre les insuffisances de la mécanique classique via les nouvelles idées dite aussi idée fondamentale de la mécanique quantique [1].

I-2 Les idées fondamentales de la mécanique quantique :

Parmi les idées qui ont poussé les physiciens à réfléchir à une nouvelle mécanique capable interpréter les expériences de l'époque avec succès, on cite l'expérience de Young, l'effet photoélectrique, l'effet de Compton et expérience Franck et Hertz.

Ces expériences on confirmé aussi que la mécanique classique présente des lacunes au niveau de certains phénomènes. Nous en donnerons ici un bref aperçu.

I-3 Expérience de Young :

Dans cette expérience, on utilise une source lumineuse S monochromatique et on interpose une plaque percée de 2 fentes.

Celles-ci se comportent comme des sources secondaires S_1 et S_2 . On observe alors, sur un écran placé derrière des franges alternativement sombres et claires.

Les ondes issues de S1 et S2 interfèrent entre elles

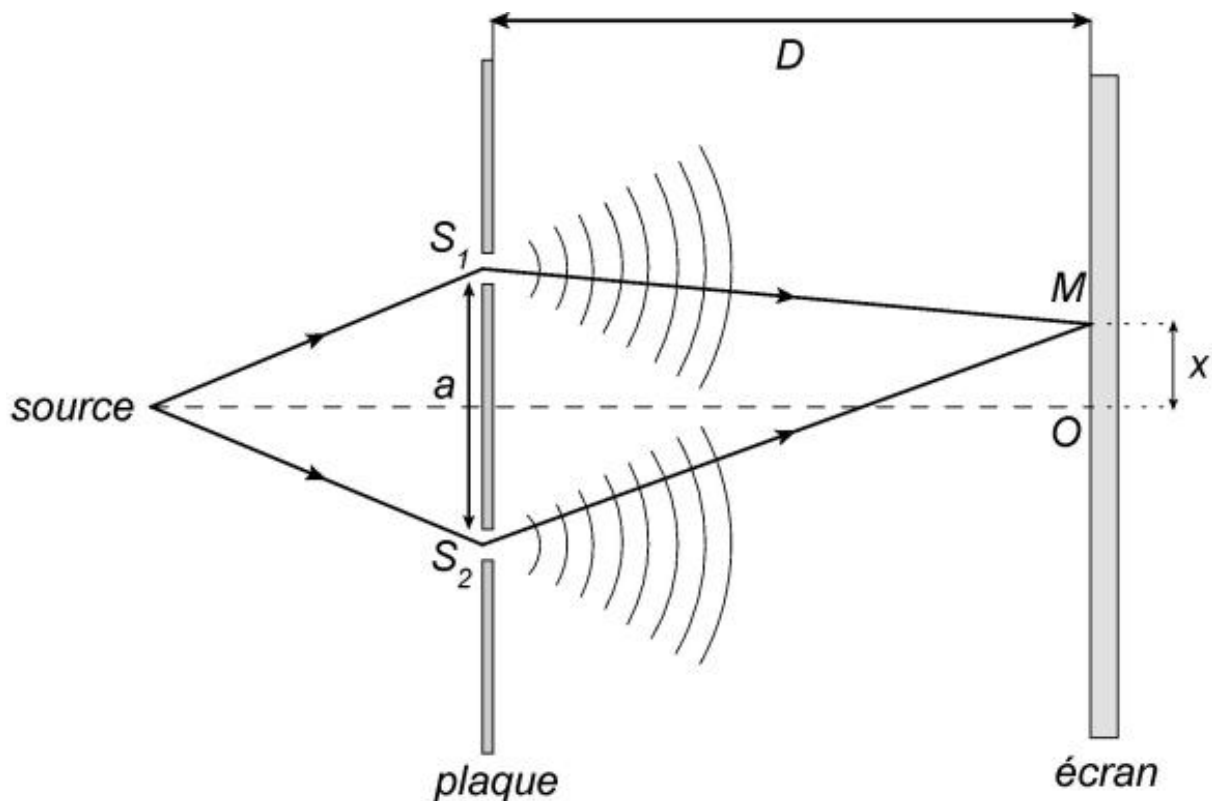


Figure I-1 : expérience d'interférences des fentes d'Young

Considérons maintenant un point M situé sur l'écran. Il est éclairé par les ondes lumineuses émises par S1 et S2 qui peuvent s'écrire respectivement, au point M [2].

La source S émet une lumière de la forme $Ae^{i\omega t}$

En fermant S_2 et en laissant S_1 ouverte la lumière passe par S_1 alors M oscille après un retard.

De $\frac{S_1M}{c}$ par rapport à la source S_1 son élongation Y_1 s'écrit :

$$y_1 = Ae^{i\omega\left(t - \frac{S_1M}{c}\right)} \quad (I - 1)$$

Maintenant on ferme S_1 et en laissant S_2 ouverte la lumière passe par S_2 alors M oscille après un retard de $\frac{S_2M}{c}$ par rapport à la source S_2 son élongation y_2 s'écrit :

$$y_2 = Ae^{i\omega\left(t - \frac{S_2M}{c}\right)} \quad (I - 2)$$

En ouvrant les deux fentes simultanément M oscille avec l'élongation Y résultante de y_1 et y_2 (conséquence du théorème de superposition) :

$$y = y_1 + y_2 \quad (I - 3)$$

L'intensité lumineuse est proportionnelle au carré du module de y :

$$I \propto yy^* \quad (I - 4)$$

Après substitution des expressions de y_1 et y_2 dans I on obtient :

$$I \propto (y_1 + y_2)(y_1 + y_2)^* \quad (I - 5)$$

Avec $\omega = \frac{2\pi}{T}$ et $\lambda = cT$

$$I \propto \left(|A|^2 + |A|^2 + |A|^2 e^{i\frac{2\pi}{\lambda}(S_2M - S_1M)} + |A|^2 e^{-i\frac{2\pi}{\lambda}(S_2M - S_1M)} \right) \quad (I - 6)$$

$$I \propto 2|A|^2 \left(1 + \cos \frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) \right) \quad (I - 7)$$

Distinguons deux cas extrêmes relatifs aux franges brillantes et aux franges obscures.

Pour le cas des franges brillantes :

$$\cos \frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) = 1 \quad (I - 8)$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) = 2k\pi \quad (I - 9)$$

$$(S_2M - S_1M) = k\lambda \quad (I - 10)$$

On dit que la différence de marche ($S_2M - S_1M$) est nombre entier de λ .

Pour le cas des franges obscures :

$$\cos \frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) = -1 \quad (I - 11)$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) = (2k + 1) \pi \quad (I - 12)$$

$$(S_2M - S_1M) = (2k + 1) \frac{\lambda}{2} \quad (I - 13)$$

On dit que la différence de marche ($S_2M - S_1M$) est un nombre impair de $\frac{\lambda}{2}$.

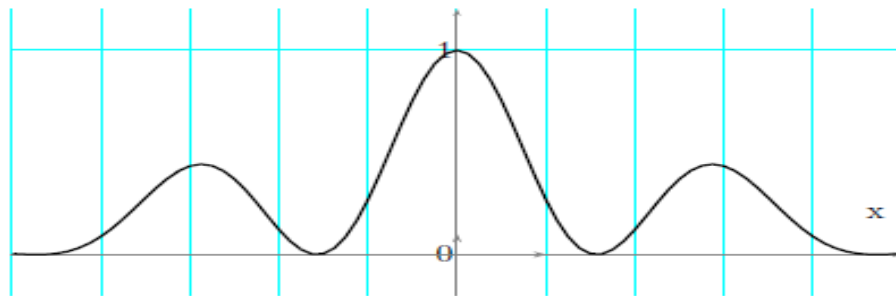


Figure I-2 : Représentation de l'intensité lumineuse en fonction de la distance.

Les interférences constructives ($A_T = 2A$) sont définies par :

$$\delta = m\lambda \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (I - 14)$$

Les interférences destructives ($A_t = 0$) sont données par :

$$\delta = (m + 1/2)\lambda \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (I - 15)$$

Pour mieux éclaircir cette interprétation les figures I(a) et I(b) montrent certaines causes induites par la différence de phase entre 2 ondes harmonique.

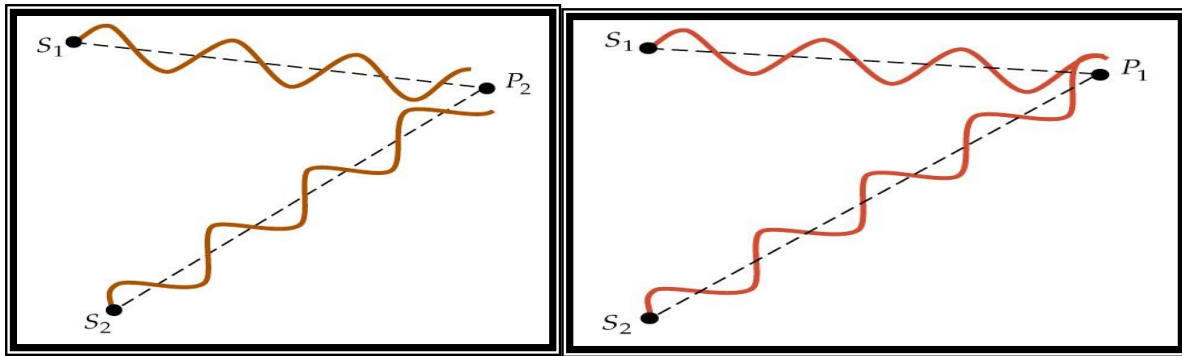


Figure I-3 : différence de marche de parcours δ

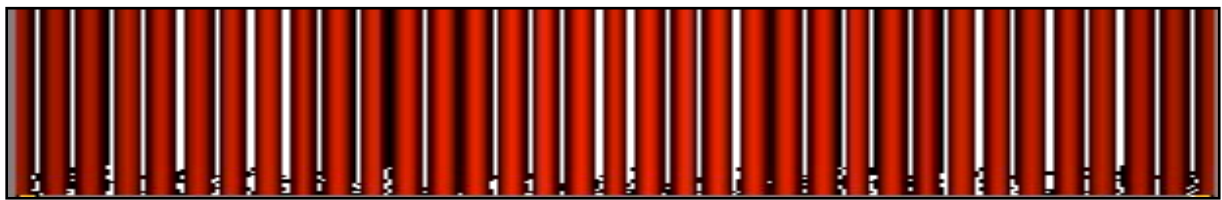


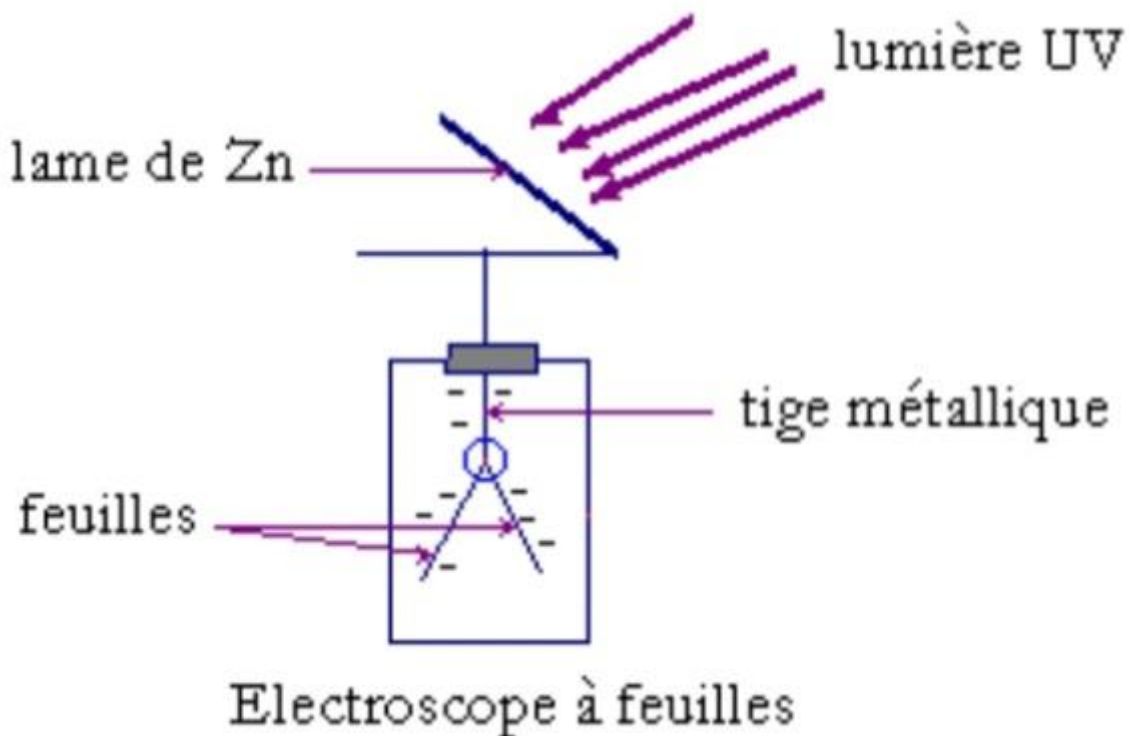
Figure I-4 : écran d'observation

Position des maxima : $d \sin \theta = m\lambda$ (ou $m = 0,1,2,3..$) (I - 16)

Position des minima : $d \sin \theta = (m + 1/2)\lambda$ (ou $m = 1,2,3..$) (I - 17)

I-4 L'effet photoélectrique :

L'effet photoélectrique est l'émission d'électrons par un métal lorsqu'il est éclairé par une lumière convenable. Pour extraire un électron dans un métal il faut fournir de l'énergie appelée énergie d'extraction.



I 4-1 Expériences de HERTZ :

On envoie un faisceau de lumière riche en rayons ultraviolet sur une lame de zinc reliée à un électroscope initialement chargé, on constate que :

- Si l'électroscope est chargé positivement : il ne passe rien
- Si l'électroscope est chargé négativement : il se décharge, l'électroscope se décharge
- Si on interpose sur le trajet de la lumière une lame de verre le phénomène ne se produit plus

La lumière est constituée par un ensemble de corpuscules, appelée photons transportant chacun un quantum d'énergie.

Un photon a une charge nulle et une masse nulle, il se déplace à la vitesse de la lumière, soit $C \approx 3.10^8$ m/s dans le vide.

Chaque photon d'un rayonnement monochromatique de fréquence ν transporte un quantum d'énergie :

$$E = h \cdot \nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (I - 18)$$

Avec :

h : la constante de Planck, ($h = 6,623 \cdot 10^{-34}$ JS)

C : la vitesse de la lumière dans le vide en (m/s)

λ : la longueur d'onde dans le vide en (m)

E : s'exprime en joule (J)

L'effet photoélectrique correspond à l'interaction (choc) entre un photon incident et un électron du métal avec transfert de l'énergie du photon à l'électron extrait.

L'effet photoélectrique ne se produit que si l'énergie du photon incident :

$$E = h \cdot \nu \quad (I - 19)$$

Est supérieure au travail d'extraction W_0 d'un électron du métal

$$w_0 = h\nu_0 \quad (I - 20)$$

ν_0 : est la fréquence seuil ($\nu_0 = \frac{c}{\lambda_0}$)

Evaluons la vitesse d'éjection des électrons de l'atome. Soit E_c l'énergie cinétique des électrons [3].

$$E_c = E - w_0 = h(\nu - \nu_0) = hc \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_0} \right) \quad (I - 21)$$

I-5 Spectre atomique :

Les spectres atomiques sont de deux types : absorption et émission.

Spectre d'absorption : est un spectre discontinu formé par des raies noires sur un fond coloré qui correspond au spectre visible de la lumière blanche. La lumière traverse un échantillon (dans son état fondamental) et on observe à l'issue de cette traversée un spectre d'absorption.

Spectre d'émission : est un spectre discontinu formé par des raies colorées sur un fond noir. On excite la matière qui émet pour retourner à son état stable, une lumière.

I- 5-1 Modèle de Bohr (1913) :

Bohr propose son modèle atomique basé sur des principes classiques mais aussi sur des principes de la physique moderne (les photons). Pour expliquer les spectres discontinus et en même temps contournait le problème de la perte continue d'énergie de l'électron accéléré, Bohr, dans son modèle eut recours à des postulats :

5-1-a Postulat des orbites :

Sans émission de rayonnement, les électrons ne peuvent graviter autour du noyau que sur certaines orbites permises. Celles-ci sont déterminées par la condition de quantification suivante :

$$mv_n r_n = n \frac{h}{2\pi} \quad (I - 22)$$

5-1-b Postulat des émissions et absorptions d'énergie :

A chaque orbite permise correspond un niveau énergétique déterminé. Les transitions électroniques d'une orbite vers une autre se font par sont accompagnées de l'émission ou de l'absorption d'un photon d'énergie :

$$E = |E_f - E_i| = hf \quad (I - 23)$$

Avec

E_i : Énergie correspondant à l'orbite de départ

E_f : Énergie correspondant à l'orbite d'arrivée

f : fréquence du rayonnement émis ou absorbé

Considérons un atome d'hydrogène et admettons que conformément au modèle planétaire, l'électron de charge $q_e = e$ et de masse m tourne avec une vitesse linéaire v autour du proton de charge $q_p = e$ et de masse $m_p \gg m$.

D'après le 2^{em} principe de Newton selon le normale :

$$F_c = ma_n$$

En remplaçant :

$$m \frac{v_n^2}{r_n} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} \quad (I - 24)$$

$$r = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 m v^2} \quad (I - 25)$$

D'après le 1^{er} postulat de Bohr, les vitesses possibles sont ainsi donnée par :

$$v_n = \frac{nh}{2\pi m r_n} \quad (I - 26)$$

En remplaçant l'expression (5) dans l'expression (4) on trouve :

$$r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m q^2} n^2 \quad (I - 27a)$$

L'énergie cinétique en fonction du rayon r de l'orbite est :

$$E_c(r) = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (I-27 b)$$

$$E_c(r) = -\frac{1}{2} E_p(r) \quad (I - 27 c)$$

Donc l'énergie de l'atome H :

$$E(r_n) = E_p + E_c = -\frac{q^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} \quad (I - 28)$$

En remplaçant la valeur de r_n on obtient :

$$E_n = -\frac{mq^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{R_\infty}{n^2} \quad (I - 29)$$

Avec

$$R_\infty = \frac{mq^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \quad (I - 30)$$

Energie E du photon émis ou absorbé :

$$E = |E_{n_f} - E_{n_i}| = |E_i| \left| \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right| = hf \quad (I - 31)$$

Avec $E_i = 13.6 \text{ ev}$ et n_f et n_i : entier > 0

On a $f = \frac{c}{\lambda}$, la relation (9) s'écrit :

$$h \frac{c}{\lambda} = |E_i| \left| \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right|$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\lambda} = R_H \left| \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right| \quad (I - 32)$$

Avec R_H : constante de Rydberg ($R_H = 109677 \text{ cm}^{-1}$)

I-5-2 Onde de Broglie :

L'hypothèse fondamentale De Broglie est la suivante : à toute particule qui possède de l'énergie de masse, on peut associer un phénomène ondulatoire, et donc une onde dont il faut préciser le comportement.

Ainsi, à une masse au repos m_0 , on peut associer une onde de pulsation ω_0 qui vérifie la relation de Planck :

$$E = h\omega = m_0 c^2 \quad (I - 33)$$

Pour une particule se déplaçant à une vitesse V , on utilise les résultats acquis de la relativité, qui indique que l'énergie cinétique a été engrangée sous la forme d'énergie de masse.

Cela conduit à une deuxième relation, dans laquelle le mouvement ondulatoire associé à la particule a changé de fréquence, car on suppose toujours qu'il obéit à la relation de Planck :

$$h\omega = mc^2 = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (I - 34)$$

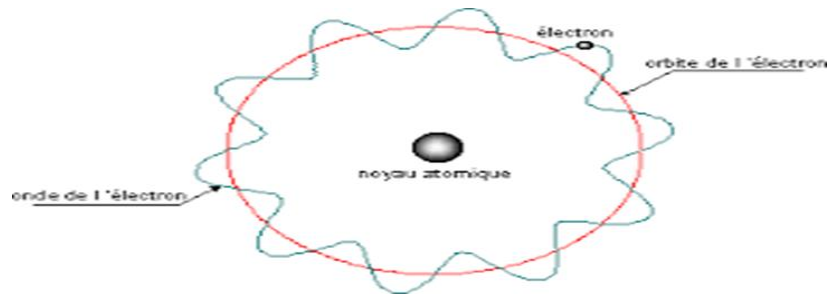


Figure I-5-2 : Onde associée de Le Broglie

En égalant la quantité m_0c^2 dans les deux relations ci-dessus, on déduit que les pulsations ω et ω_0 doivent être liées par la relation :

$$\omega_0 = \omega \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (I - 35)$$

Examinons ces relations d'un point de vue relativiste. Nous désignons par (R_0) le référentiel dans lequel la particule est au repos, et par (R) le référentiel dans lequel elle se déplace à la vitesse V . Il s'ensuit que le référentiel (R) se déplace à la vitesse ($-V$) par rapport au référentiel (R_0).

La théorie de la relativité restreinte nous apprend que dans ces conditions, l'horloge portée par la masse qui est en mouvement dans le référentiel (R) retarde par rapport aux horloges disposées dans le référentiel (R_0). Ces dernières indiquent toutes la même heure, car le temps est une donnée unique dans un référentiel donné. On fait classiquement référence à cette propriété en disant que toutes les horloges disposées dans même référentiel, et se déplaçant avec lui, sont synchronisées.

Si on désigne par T_0 une durée mesurée par l'horloge portée par la masse m , et T la même durée mesurée par les horloges du référentiel (R), alors nous savons que les horloges en mouvement retardent suivant la relation :

$$T_0 = T \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (I - 36)$$

On en déduit que des phénomènes ondulatoires de pulsation ω

(Observée dans le référentiel (R)) et ω_0 (observée dans le référentiel (R_0)) Devraient être liés par relation :

$$\omega = \omega_0 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (I - 37)$$

Dans le modèle de Broglie, l'électron est décrit par une onde stationnaire telle que :

$$2\pi r = n\lambda = \frac{nh}{mv} \quad (I - 38)$$

I-6 L'équation de Schrödinger :

L'équation de Schrödinger résulte du principe de correspondance entre la mécanique ondulatoire de la mécanique quantique c'est-à-dire en partant des équations de Maxwell qui induisent une expression fondamentale de l'onde :

$$\Delta \vec{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \vec{0} \quad (I - 39)$$

$$\Delta \vec{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = \vec{0} \quad (I - 40)$$

Et en partant de l'écriture de l'onde :

$$E = E_0 e^{i(\omega t - kx)} \quad (I - 41)$$

La fonction d'onde aura la même expression que (I-40)

$$\psi(x, t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)} \quad (I - 42)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = i \frac{p\psi}{h} \text{ avec } k = \frac{p}{h} \quad (I - 43)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega\psi = -i \frac{E}{h} \psi \quad (I - 44)$$

D'où :

$$\frac{h}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = p\psi \quad (I - 45)$$

$$ih \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi \quad (I - 46)$$

Or pour une particule de masse m soumise à un potentiel V l'énergie totale est :

$$E = \frac{p^2}{2m} + v(x) \leftrightarrow E\psi = \frac{p^2}{2m} \psi + v(x)\psi \quad (I - 47)$$

$$ih \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + v(x)\psi \quad (I - 48)$$

Qui exprime le mouvement d'une particule dans un espace à une dimension via sa fonction $\psi(x, t)$:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{h^2} (E - v)\psi = 0 \quad (I - 49)$$

I-7 Conclusion :

Après avoir interprète des points obscurs de la mécanique classique et ses insuffisances via les expériences de l'époque et entamer la nouvelle mécanique quantique et surtout sa fameuse équation de Schrödinger. Nous allons maintenant essayer de la résoudre d'une manière approchée d'où théorie des perturbations ce qui l'objectif du deuxième chapitre.

Référence :

[1] S.kouidri polycopie OPU exercice résolue de mécanique quantique 2013.

[2] introduction à la mécanique quantique cours d'ouverture, EPF 3^{eme} année Fabien Besnard 6 février 2013.

[3] HABIB BOUCHRIHA introduction à la physique quantique cours et application 2002.

Chapitre II

Théorie

Des

Perturbations

II-1 Introduction

Dans ces cours, nous étudierons la théorie des perturbations, avec la théorie des variations présentées dans les cours précédents, sont les principales techniques d'approximation en mécanique quantique.

La théorie des perturbations est souvent plus compliquée que la théorie des variations, mais sa portée est également plus large car elle s'applique à tout état excité d'un système tandis que la variation la théorie est généralement limitée à l'état fondamentale.

Nous commencerons par développer la théorie des perturbations pour les états stationnaires résultant de des Hamiltoniens avec des potentiels indépendants du temps et ensuite nous nous développerons la théorie aux Hamiltoniens avec des potentiels dépendant du temps pour décrire des processus tels comme l'interaction de la matière avec la lumière.

Enfin, nous appliquerons la théorie des perturbations à l'étude des propriétés électriques des molécules et de développer Moller-Plesset à plusieurs Corp. la théorie des perturbations qui est souvent une procédure de calcul fiable pour obtenir la plupart de l'énergie de corrélation qui manque dans les calculs Hartree-Fock [1].

II- 2 La Méthode de perturbation :

La théorie de perturbations stationnaire est un outil important Pour la description des systèmes quantiques réels car trouver des solutions exactes de l'équation De Schrödinger pour des Hamiltoniens complexes Peut être difficile.

Dans le cas réel on peut citer des Hamiltoniens de L'atome D'hydrogène de l'oscillateur harmonique et d'une particule dans une boîte de potentiel. Ceci est Très idéalisées pour décrire ces systèmes physiques notamment celle qui considère le mouvement d'une seule particule dans un potentiel quelconque.

Alors l'utilisation la théorie de perturbation donne des solutions connues de certains Hamiltonien à condition que le potentiel devrait être faible devant l'énergie cinétique.

Cette méthode approximations à été aussi utilisé pour mieux décrire certains effets comme (Effet Stark, effet Zeeman ect...).

Détails mathématique :

Alors comme on avait dit il fait que les quantités qui figurent devant le côté cinétique soit suffisamment petites pour pouvoir les négligées lors d'un premier calcul, permettant.

Ainsi d'obtenir une certaine solution, notée $|\psi_n^{(0)}\rangle$

Un second calcul, qui constitue la méthode des Perturbations proprement dite, consiste alors à déterminer approximativement par étapes successives.

Les corrections à différents ordres, à partir de la solution $|\psi_n^{(0)}\rangle$

Soit un système physique décrit par l'Hamiltonien suivant :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p \quad (II - 1)$$

$$\text{Avec : } \hat{H}_p = \lambda \hat{W} \quad (II - 2)$$

On suppose connue les vecteurs propres $|\psi_n^{(0)}\rangle = |\phi_n\rangle$ et que les énergies propres de l'Hamiltonien non perturbé forment un spectre discret noté.

Les problèmes à résoudre par la méthode des perturbations consiste à trouver de manière approchée les solutions de l'équation :

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = (\hat{H}_0 + \lambda \hat{W}) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (II - 3)$$

Donc on va déterminer les valeurs propres E_n et les vecteurs propres $|\psi_n\rangle$ de l'Hamiltonien perturbé \hat{H} .

II-3 théorie des perturbations indépendantes du temps :

II-3-1 systèmes non dégénérés :

L'approche que nous décrivons dans cette section est également connue sous le nom de « Rayleigh-Schrödinger théorie des perturbations ».

Nous souhaitons trouver des solutions approchées de l'indépendant du temps équation de Schrödinger (TISE) pour un système avec \hat{H} Hamiltonien pour lequel il est difficile de trouver des solutions exactes.

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad (\text{II-4})$$

On suppose cependant connaître les solutions exactes $\psi_n^{(0)}$ d'un système « plus simple » avec le Hamiltonien $\hat{H}_{(0)}$ c'est-à-dire

$$\hat{H}_{(0)}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)} \quad (\text{II-5})$$

Qui n'est pas trop différent de \hat{H} .

Nous supposons en outre que les états $\psi_n^{(0)}$ ne sont pas dégénérés ou autrement dit $E_n^{(0)} \neq E_k^{(0)}$, $n \neq k$ la petite différence entre \hat{H} et $\hat{H}_{(0)}$ est considérée comme une « simple perturbation » sur $\hat{H}_{(0)}$ et toutes les quantités du système décrit par \hat{H} (le système perturbé) peuvent être développées (celles de $\hat{H}_{(0)}$).

Le développement se fait en fonction d'un paramètre λ .

$$\begin{aligned} \text{Nous avons :} \quad E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \\ &\dots \end{aligned} \quad (\text{II-6})$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots \quad (\text{II-7})$$

\hat{H} : Hamiltonien du système non perturbé

\hat{H}_0 : Hamiltonien de perturbation

\hat{w} : Perturbation dont les éléments de matrice sont petite ou faible par rapport à ceux de \hat{H}_0

λ : paramètre de perturbation ($\lambda \ll 1$)

$\psi_n^{(1)}$ et $E_n^{(1)}$: sont appelés les corrections du première ordre à la fonction d'onde et l'énergie respectivement.

$\psi_n^{(2)}$ et $E_n^{(2)}$: sont les corrections du second ordre et ainsi de suite.

En théorie de perturbation nous supposons que toutes les grandeurs perturbées sont fonctions du paramètre λ .

Lorsque $\lambda \Rightarrow 0$ on a $\hat{H}(0) = \hat{H}_{(0)}$ et $E_n(0) = E_n^{(0)}$ et $\psi_n(r; 0) = \psi_n^{(0)}$

Note 2-1 en comparant cette expression du développement en série de Taylor :

$$E_n = E_n^{(0)} + \frac{dE_n}{d\lambda} \lambda + \frac{1}{2!} \frac{d^2 E_n}{d\lambda^2} \lambda^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3 E_n}{d\lambda^3} \lambda^3 + \dots \quad (II - 8)$$

Avec expression (5) on voit que la théorie des perturbations « correction » à le niveau d'énergie est lié aux termes du développement en série de Taylor par :

$$E_n^{(0)} = E_n(0) \quad (II - 9)$$

$$E_n^{(1)} = \frac{dE_n}{d\lambda} \quad (II - 10)$$

$$E_n^{(2)} = \frac{1}{2!} \frac{d^2 E_n}{d\lambda^2} \quad (II - 11)$$

$$E_n^{(3)} = \frac{1}{3!} \frac{d^3 E_n}{d\lambda^3} \quad (II - 12)$$

Note 2-2 le développement de l'Hamiltonien se termine après la terme du première ordre $\Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_{(0)} + \lambda \hat{H}_{(1)}$ [2].

Regroupons les termes selon les puissances successives de λ :

$$\begin{aligned} & \hat{H}_0 |\phi_n\rangle + \lambda (\hat{H}_0 |\psi_n^{(1)}\rangle) + (\hat{w} |\phi_n\rangle) + \lambda^2 (\hat{H}_0 |\psi_n^{(2)}\rangle) + (\hat{w} |\psi_n^{(1)}\rangle) + \dots = E_n^{(0)} |\phi_n\rangle + \\ & \lambda (E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\phi_n\rangle) + \lambda^2 (E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\phi_n\rangle) + \dots \end{aligned} \quad (II-13)$$

Pour que l'égalité soit vérifiée quelque soit, on identifiée les termes de même puissance en λ :

II-3-a terme d'ordre zéro :

$$\hat{H}_0 |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n\rangle \quad (II - 14)$$

II-3 -b Terme du premier ordre :

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{W} |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\phi_n\rangle \quad (II - 15)$$

II-3 -c terme du deuxième ordre :

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{W} |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\phi_n\rangle \quad (II - 16)$$

On se limite de déterminer $E_n^{(1)}, E_n^{(2)}$ et $|\psi_n^{(1)}\rangle$

$$\text{Puisque } \lambda \ll 1 \Rightarrow |\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle \text{ et } \langle \psi_n | \phi_n \rangle = 1 \quad (II-17)$$

II- 3-2 Corrections du premier ordre :

3-2-a Calcul de l'énergie :

On remplace $|\psi_n\rangle$ dans (II-17) donc (II-7) dans (II-17) :

$$\langle \phi_n | \psi_n \rangle = |\phi_n\rangle$$

$$\left(|\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \right) = \langle \phi_n | \psi_n \rangle + \lambda \langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle + \lambda^2 \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle = 1$$

$$\Rightarrow \lambda \langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle + \lambda^2 \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle + \dots = 0 \quad (II - 18)$$

Donc les coefficients des puissances en λ s'annulent :

$$\Rightarrow \langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle = 0 \quad (II - 19)$$

A fin de déterminer $E_n^{(1)}$, on multiplie (II-14) par $\langle \phi_n |$:

$$\langle \phi_n | \hat{H}_0 | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \phi_n | \hat{W} | \phi_n \rangle = E_n^{(0)} \langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \phi_n | \phi_n \rangle$$

$$\Rightarrow E_n^{(1)} \langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \phi_n | \hat{W} | \phi_n \rangle = E_n^{(1)} \quad (II - 20)$$

Avec $\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = 0$ et $\langle \phi_n | \phi_n \rangle = 1$

D'où

$$E_n^{(1)} = \langle \phi_n | \hat{W} | \phi_n \rangle \quad (II - 21)$$

On injecte l'équation (II-21) dans l'équation (II-13)

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} = E_n^{(0)} + \lambda \langle \Phi_n | \widehat{W} | \Phi_n \rangle$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle \Phi_n | \widehat{H}_p | \Phi_n \rangle \quad (II - 22)$$

3-2-b Calcul du vecteur propre :

$\{ | \Phi_n \rangle \}$ Base orthonormée $| \psi_n^{(1)} \rangle$, s'écrit en fonction des $| \Phi_n \rangle$ on introduit la relation de fermeture

$$\sum_m | \Phi_m \rangle \langle \Phi_m | = 1$$

$$| \psi_n^{(1)} \rangle = \left(\sum_m | \Phi_m \rangle \langle \Phi_m | \right) | \psi_n^{(1)} \rangle \quad | \psi_n^{(1)} \rangle = \sum_{m \neq n} \langle \Phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle | \Phi_m \rangle \quad (II - 23)$$

$$\text{Si } m = n, \langle \Phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = 0$$

Les coefficients $\langle \Phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle$ s'obtiennent en multiplions (II-19) par $\langle \Phi_m |$:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_m | \widehat{H}_0 | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \Phi_m | \widehat{W} | \Phi_n \rangle &= E_n^{(0)} \langle \Phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \Phi_m | \Phi_n \rangle \\ \Rightarrow E_m^{(0)} \langle \Phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \Phi_m | \widehat{W} | \Phi_n \rangle &= E_n^{(0)} \langle \Phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle \end{aligned} \quad (II - 24)$$

Avec $\langle \Phi_m | \Phi_n \rangle = 0$

$$\Rightarrow \langle \Phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \Phi_m | \widehat{W} | \Phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} | \Phi_m \rangle \quad (II - 25)$$

On injecte (II-25) dans (II-23) :

$$| \psi_n^{(1)} \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \Phi_m | \widehat{W} | \Phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} | \Phi_m \rangle \quad (II - 26)$$

La fonction propre $|\psi_n\rangle$ de \hat{H} en 1^{er} ordre s'écrit en remplaçant $|\psi_n^{(1)}\rangle$ équation (II-27) dans (II-6) :

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} \lambda \frac{\langle \Phi_m | \hat{W} | \Phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\Phi_m\rangle |\psi_n\rangle$$

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = \sum_{m \neq n} \lambda \frac{\langle \Phi_m | \hat{W} | \Phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\Phi_m\rangle \quad (II - 27)$$

3-3 Corrections du deuxième ordre :

3-3-a Calcul de l'énergie :

Pour déterminer $E_n^{(2)}$, on multiplie (II-17) par $|\Phi_n\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_m | \hat{H}_0 | \psi_n^{(2)} \rangle + \langle \Phi_m | \hat{W} | \psi_n^{(1)} \rangle \\ = E_n^{(0)} \langle \Phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \Phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(2)} \langle \Phi_n | \Phi_n \rangle \\ + E_n^{(0)} \langle \Phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle + \langle \Phi_n | \hat{W} | \psi_n^{(1)} \rangle = E_n^{(2)} \end{aligned} \quad (II - 28)$$

$$\text{Avec } \langle \Phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle = 0$$

$$\langle \Phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = 0 \text{ et } \langle \Phi_n | \Phi_n \rangle = 1 \quad (II - 29)$$

$$E_n^{(2)} = \langle \Phi_n | \hat{W} | \psi_n^{(1)} \rangle \quad (II - 30)$$

On remplace $|\psi_n^{(1)}\rangle$ c'est-à-dire équation (II-26) dans (II-30) :

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \langle \Phi_n | \left(\hat{W} \frac{\langle \Phi_m | \hat{W} | \Phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\Phi_m\rangle \right)$$

$$\sum_{m \neq n} \frac{\langle \Phi_n | \hat{W} | \Phi_m \rangle \langle \Phi_m | \hat{W} | \Phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (I$$

I-31)

$$E_n^{(2)} = \frac{|\langle \Phi_m | \widehat{W} | \Phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (II - 32)$$

L'énergie propre avec correction au 2^{ème} ordre est obtenue en substituant l'équation (II-30) et (II-20) dans équation (II-6)

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle \Phi_n | \widehat{H}_p | \Phi_n \rangle + \frac{|\langle \Phi_m | \widehat{H}_p | \Phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (II - 33)$$

Remarque :

On peut calculer les termes à tout ordre, mais cela devient lent et compliqué.

II - 4 cas des niveaux d'énergie dégénérés :

Considérons à présent le cas d'une valeur propre $E_n^{(0)}$, qui est f fois dégénérées, il lui correspond f valeurs propres orthonormés :

II-4-1 A l'ordre zéro :

(Système non perturbé)

$$\widehat{H}_0 | \Phi_{n\alpha} \rangle = E_n^{(0)} | \Phi_{n\alpha} \rangle \quad (II - 34)$$

$E_n^{(0)}$ Est indépendante de α

II-4-2 Correction du premier ordre :

$$| \Psi_n \rangle = | \Psi_n^{(0)} \rangle = \sum_{\alpha=1}^f \alpha_{\alpha} | \Phi_{n\alpha} \rangle \quad (II - 35)$$

On injecte l'équation (II-34) dans (II-3)

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^f (\widehat{H}_0 + \lambda \widehat{W}) \alpha_{\alpha} | \Phi_{n\alpha} \rangle &= E_n \sum_{\alpha=1}^f \alpha_{\alpha} | \Phi_{n\alpha} \rangle \\ \Rightarrow \sum_{\alpha=1}^f (E_n^{(0)} | \Phi_{n\alpha} \rangle + \widehat{H}_p | \Phi_{n\alpha} \rangle) \alpha_{\alpha} &= E_n \sum_{\alpha=1}^f \alpha_{\alpha} | \Phi_{n\alpha} \rangle \end{aligned} \quad (II - 36)$$

On multiplie (II-36) par $\langle \Phi_{n\beta} |$

$$\sum_{\alpha=1}^f E_n^{(0)} \langle \Phi_{n\beta} | \Phi_{n\alpha} \rangle + \langle \Phi_{n\beta} | \hat{H}_p | \Phi_{n\alpha} \rangle = E_n \sum_{\alpha=1}^f \alpha_\alpha \langle \Phi_{n\beta} | \Phi_{n\alpha} \rangle \quad (II - 37)$$

Avec $\langle \Phi_{n\beta} | \Phi_{n\alpha} \rangle = \delta_{\alpha\beta}$

$$\Rightarrow \sum_{\alpha=1}^f \left(E_n^{(0)} \delta_{\alpha\beta} + \langle \Phi_{n\beta} | \hat{H}_p | \Phi_{n\alpha} \rangle \right) \alpha_\alpha = E_n \sum_{\alpha=1}^f \alpha_\alpha \delta_{\alpha\beta} \quad (II - 38)$$

Pour $\alpha = \beta$

$$\Rightarrow \sum_{\alpha=1}^f \alpha_\alpha \delta_{\alpha\beta=\alpha\beta}$$

$$\alpha_\beta E_n = \alpha_\beta E_n^{(0)} + \sum_{\alpha=1}^f \alpha_\alpha \langle \Phi_{n\beta} | \hat{H}_p | \Phi_{n\alpha} \rangle \quad (II - 39)$$

Avec $\langle \Phi_{n\beta} | \hat{H}_p | \Phi_{n\alpha} \rangle = \hat{H}_{p\alpha\beta}$

$$\sum_{\alpha=1}^f \left(\hat{H}_{p\alpha\beta} - E_n^{(1)} \delta_{\alpha\beta} \right) \alpha_\alpha = 0 \quad (II - 40)$$

Avec $E_n^{(1)} = E_n - E_n^{(0)}$

On obtient un système des équations linéaire homogène de coefficients α_α .

Les coefficients ne sont pas tous nuls quant le déterminant

$$\left| \hat{H}_{p\alpha\beta} - E_n^{(1)} \delta_{\alpha\beta} \right| = 0 \quad (II - 41)$$

Ce déterminant fournit une équation de degré f en $E_n^{(1)}$, qui détermine les corrections au 1^{er} ordre.

L'équation (II-40) est appelé équation séculaire.

Les racines de cette équation peuvent être simples ou multiples.

Cas extrême, les racines distinctes, donc les f valeurs propres \hat{H} de sont non dégénérées. Donc la perturbation lève complètement la dégénérescence.

Cas intermédiaire, c'est la levée partielle de la dégénérescence du niveau non perturbé.

L'énergie et la fonction propre au 1^{er} ordre sont données par :

$$E_{n\alpha} = E_n^{(0)} + E_{n\alpha}^{(1)} \quad (II - 42)$$

$$|\Psi_{n\alpha}\rangle = \sum_{\beta=1}^f \alpha_{\alpha\beta} |\Psi_{n\beta}\rangle \quad (II - 43)$$

II-5 Conclusion :

Nous avons vu comment résoudre l'équation de Schrödinger via la méthode des perturbations stationnaire ou nous avons considéré notre potentiel comme étant une partie très faible devant l'opérateur énergie cinétique.

Maintenant nous passerons à une résolution numérique ou nous convertirons tout ce qui est important à des équations numériques via bien sûr d'une méthode plus sophistiquée qui est l'objectif du troisième chapitre [3].

Référence :

- [1] S. Kouidri polycopie OPU exercice résolus de mécanique quantique 2013.
- [2] quatrième édition de « molecular quantum mechanics » par Peter Atkins et Ronald Friedman (oup2005)
- [3] S. Kouidri polycopie OPU exercice résolus de mécanique quantique 2013.

Chapitre III
Résolution
numérique de
l'équation de
Schrödinger via une
perturbation en X^4

III-1 introduction

Maintenant nous arrivons à la partie la plus laborieuse de notre travail ou on convertit toutes nos équations théoriques vues précédemment aux chapitre I et II à de équations numériques base sur un organigramme de calcul

III-2 Méthode des différences finies

Pour résoudre numériquement l'équation de Schrödinger, il semble pertinent d'appliquer la méthode de discrétisation de l'espace et des opérateurs. Sous les hypothèses que $\psi(x)$ est au moins de classe C^2 , un développement de Taylor nous permet d'écrire les deux égalités suivantes [1] :

$$\psi(x+h) - \psi(x) = h \frac{d\psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\psi}{dx^2} + 0(h^3) \quad (III - 1)$$

$$\psi(x-h) - \psi(x) = -h \frac{d\psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + 0(h^3) \quad (III - 2)$$

Le somme de ces deux égalités :

$$\frac{\psi(x+h) + \psi(x-h) - 2\psi(x)}{h^2} = \frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + 0(h^2) \quad (III - 3)$$

Apparaît alors équivalent discret de l'opérateur Δ (à une dimension, mais le cas à trois dimension s'en déduit aisément). La précision de cette expression est en $O(h^2)$.

En discrétisant l'espace d'un pas « h » et en injectant le résultat précédent dans l'équation de Schrödinger, il vient :

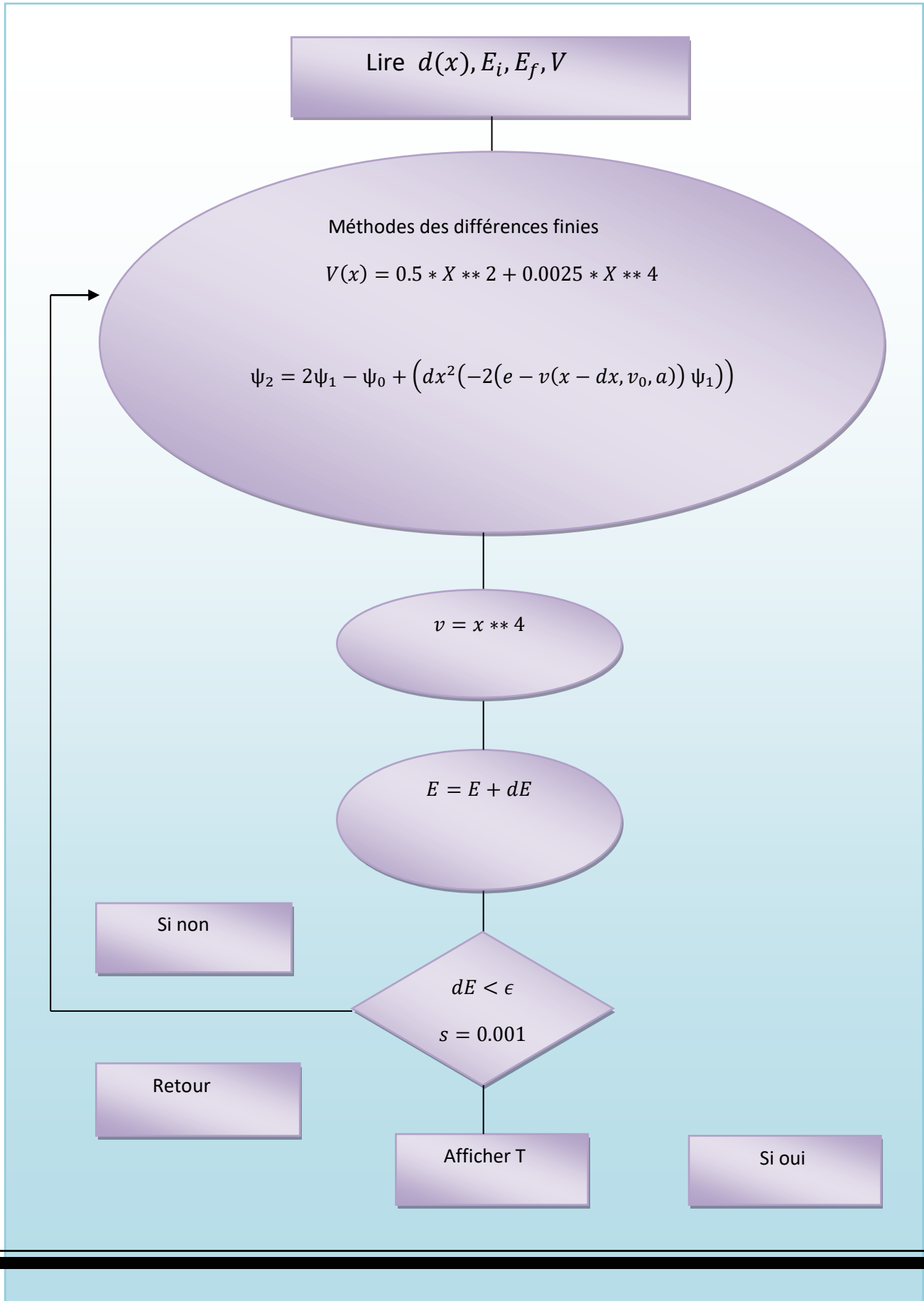
$$\frac{\psi(x+h) + \psi(x-h) - 2\psi(x)}{h^2} + f(x)\psi(x) + 0(h^2) = 0 \quad (III - 4)$$

$$\psi(x+h) + \psi(x-h) - 2\psi(x) + h^2 f(x)\psi(x) + 0(h^4) = 0 \quad (III - 5)$$

Cette équation peut être réécrite de façon à faire apparaître une relation de récurrence entre les valeurs de ψ aux nœuds du maillage. Le pas de la discrétisation est fixé à h et l'origine est définie par point O.

Lors de la résolution numérique, l'algorithme débute à $x = -2h$. La connaissance des deux premières valeurs de ψ_n (il s'agit de l'onde plane écrite précédemment) permet d'initier la récurrence qui donne accès à tous les ψ_n .

III-3 L'organigramme de calcul :



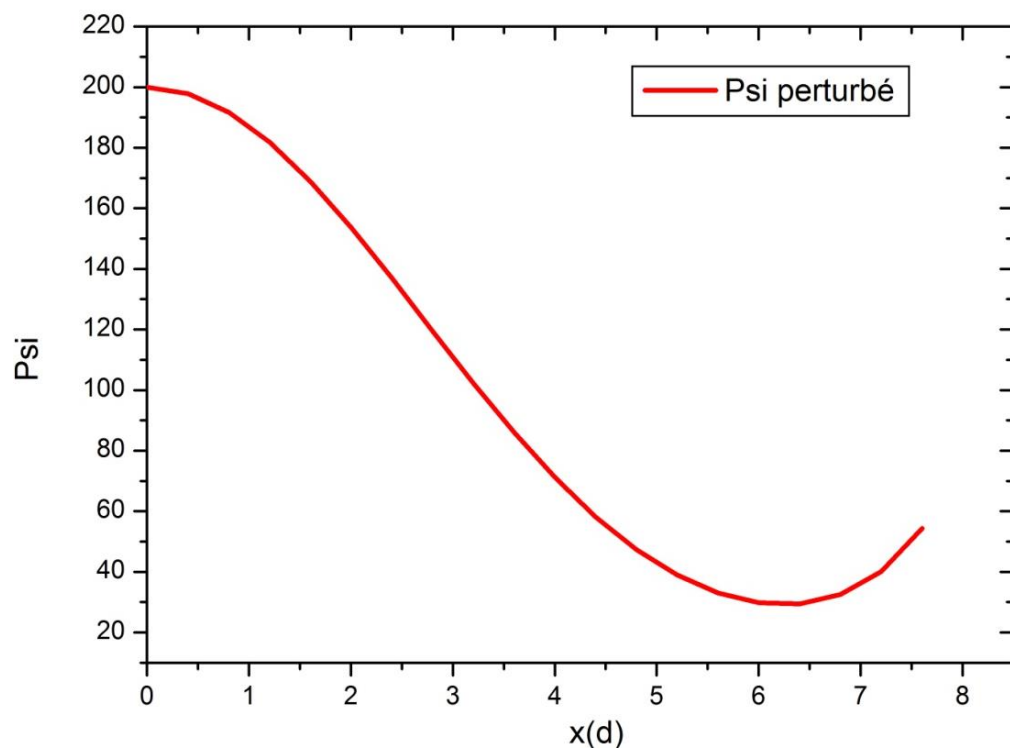


Figure 1 : la fonction d'onde perturbée en fonction de X

La figure montre l'évolution de la fonction d'onde perturbée en fonction de x. Un comportement Gaussien pour des $X < 4.5$ puis une déviation au delà X de $X = 4.5$ induit par l'influence du potentiel anharmonique.

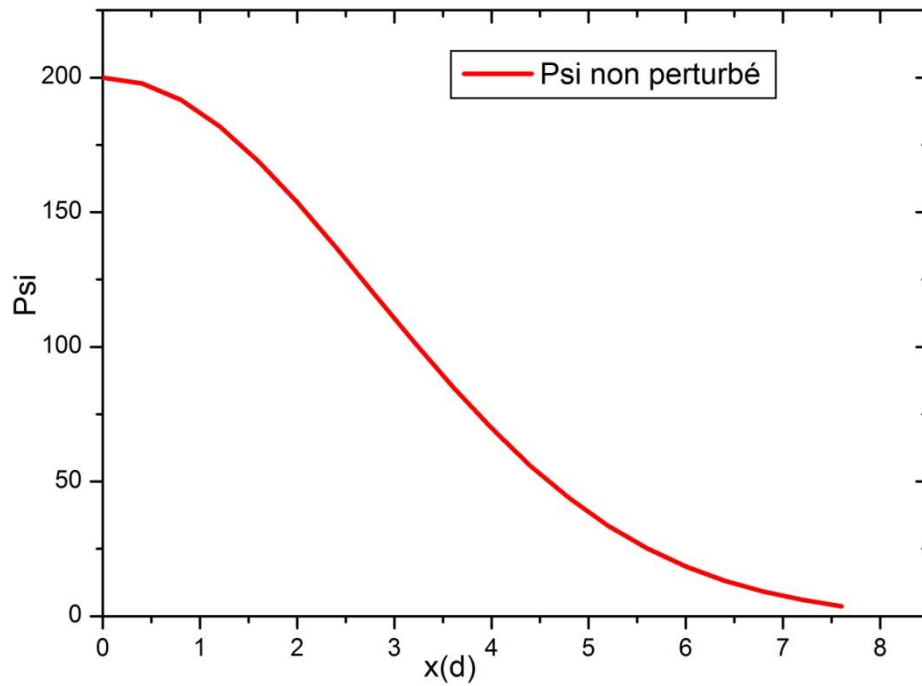


Figure 2 : la fonction d'onde non perturbé en fonction de X

La figure montre bien la variation de notre fonction d'onde non perturbé qui a une forme Gaussienne.

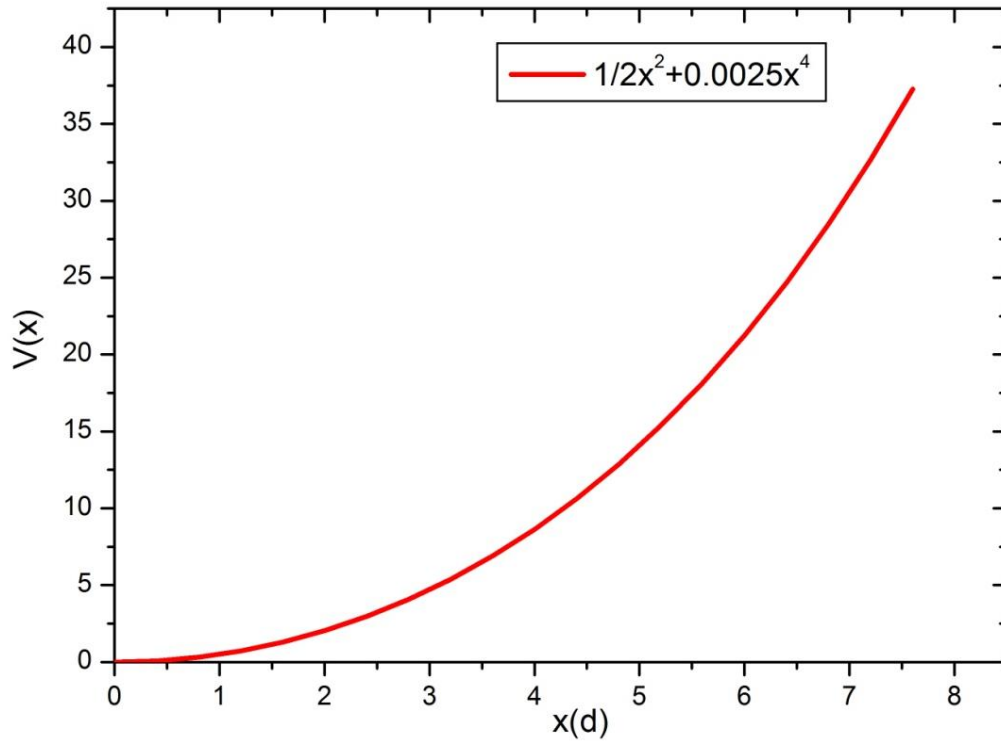


Figure 3 : Présentation du potentiel anharmonique

La Figure montre l'évolution du potentiel anharmonique en fonction de la longueur d'oscillateur harmonique $X = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ une augmentation monotone au fur à mesure que x augmente.

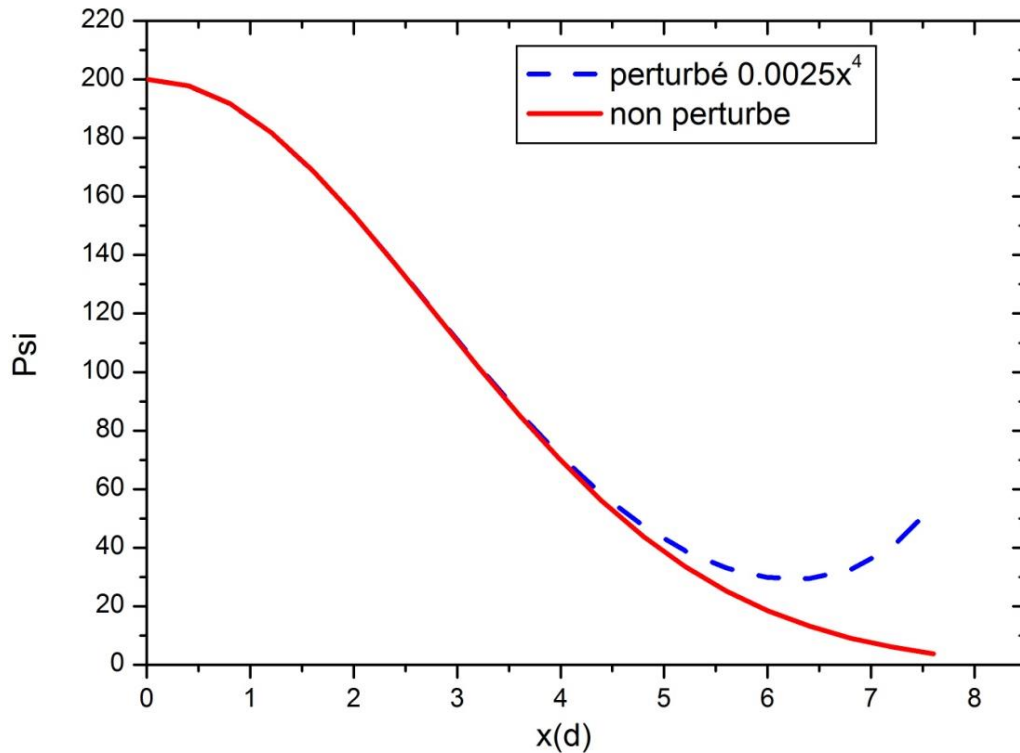


Figure 4 : présentation de deux potentiel perturbé et non perturbé

La Figure 4 : montre l'évolution de notre fonction d'onde en présence/absence d'une perturbation de la forme $0.0025 \times X^4$ la courbe en ligne continue présente l'évolution de la fonction d'one en absence de la perturbation la courbe en pointillé donne la variation de la fonction d'onde en présence de la perturbation.

D'après cette figure on remarque que les deux courbes gardent la même Gaussienne au fur à mesure que $X < 4.5$ au delà de cette valeur un décalage est observé dû a la perturbation ce qui nous permet de conclure que notre perturbation commence a ce dominer a partir de l'augmentation de x et plus précisément $X > 4.5$.

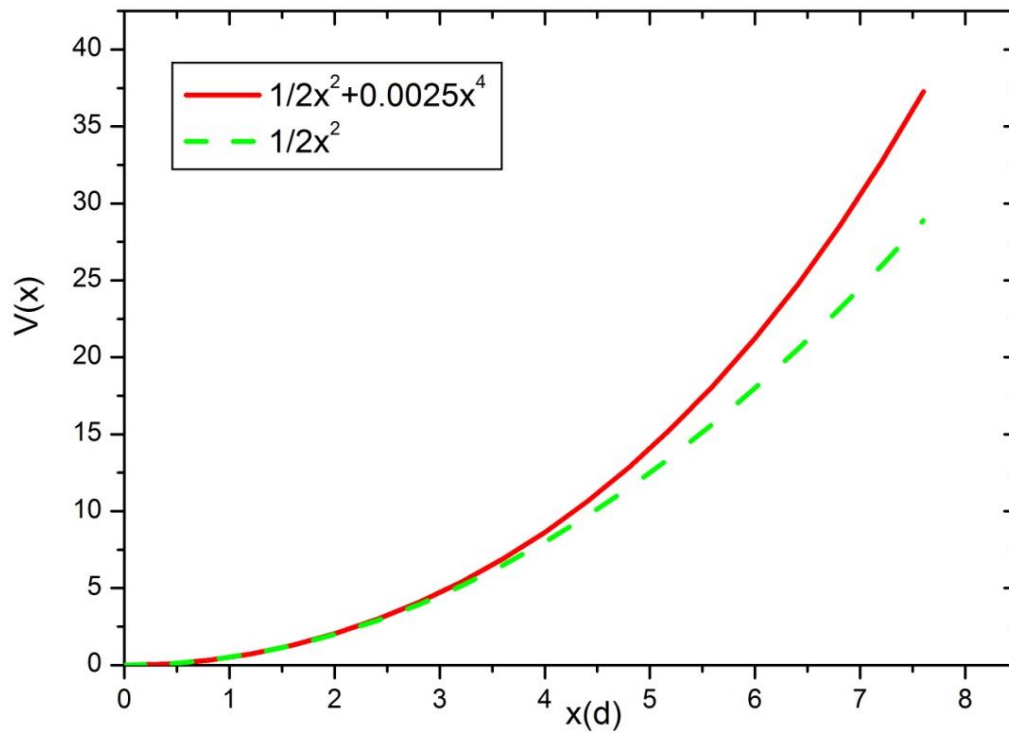


Figure 5 : présentation des deux potentiels harmoniques et non harmoniques

La figure justifie l'interprétation que nous avons fais pour la figure au dessus. Vous pouvez remarquer ça sur la figure un décalage est observée au delà de

$x = 4.5$

Conclusion générale :

Nous avons présenté dans ce travail un certain nombre de résultats relatif à la résolution approximative de l'équation de Schrödinger via la présence d'un potentiel harmonique. D'ailleurs ce type de problème est connu physiquement...

L'objectif de ce travail était dans un premier temps de combler les lacunes de la mécanique classique vis-à-vis les merveilleuses expériences de l'époque en résolvant les équations des ondes et les équations de l'électrodynamique classique de Maxwell.

Nous avons résolue notre d'une équation de Schrödinger manière approchée et parmi les approximations possible on choisir la méthode de perturbation puis passerons à une résolution numérique.

Dans un second temps nous avons écrit un langage numérique inspiré par un programme en Fortran 77 ou nous avons présenté nos résultats qui paraissent très clairs et très correcte.

Résumé:

Dans ce travail, nous avons étudié le traitement classique de l'équation ondulatoire dans lequel nous avons traité les idées fondamentales de la mécanique quantique qui sont : Expérience de Young, Effet photoélectrique et Spectres atomiques.

Nous résolvons l'équation de Schrödinger via la méthode appelée la théorie de la perturbation ou nous avons pris comme perturbation βx^4 dit aussi perturbation anharmonique .

Via un programme nommé Fortran 77, qui nous a aidé à ressortir les calculs.

Abstract

Anglais :

In This work, we have studied the classical treatment of the wave equation in which we have treated the fundamental ideas of quantum mechanics which are: Young's Experiment, Photoelectric Effect and Atomic Spectra.

We solved the Schrödinger equation via the method called the perturbation theory or we took as perturbation βx^4 also called anharmonic perturbation.

Via a program called Fortran 77, which helped us to bring out the calculations

Arab:

في هذا العمل ، درسنا المعالجة الكلاسيكية لمعادلة الموجة التي عالجت فيها الأفكار الأساسية لميكانيكا
لقد حللنا معادلة شرودنجر من خلال . الكم وهي: تجربة يونغ والتأثير الكهروضوئي والأطياف الذرية
يسمى أيضًا الاضطراب βx^4 الطريقة التي تسمى نظرية الاضطراب أو أخذناها على أنها اضطراب
، والذي ساعدنا على إخراج الحسابات Fortran 77 من خلال برنامج يسمى . غير التوافقي