

**République Algérienne Démocratique et Populaire**  
**Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la**  
**Recherche Scientifique**  
**Université Ibn Khaldoun – Tiaret**



**Faculté des Sciences de la Matière**  
**Département de Physique**

**Mémoire**

Présenté par :

Melle MEKHAZNI YAMINA  
Melle MADI WASSILA

Pour obtenir le diplôme de

**Master**

Filière : Physique

Spécialité: Technologie et physique des couches minces nano structurées

Sujet :

**Résolution numérique de l'équation de Schrödinger  
unidimensionnelle**

Soutenue publiquement le 10 Juin 2015 devant le Jury composé de :

<b>Mr. MOHAMED BOUADI</b>	<b>M.C.A</b>	<b>President</b>
<b>Mr. MADANI HASSAN</b>	<b>M.C.A</b>	<b>Examineur</b>
<b>Mr. ABDELKADER BENMEDJADI</b>	<b>M.C.A</b>	<b>Encadreur</b>

**ANNEE UNIVERSITAIRE 2014/2015**

# *Remerciements*

*" C'est grâce à la volonté et l'aide ALLAH Dieu tout puissant et miséricordieux que ce travail a pu être achevé "*

*Nous tenons à remercier Monsieur BOUADI MOHAMMED Maître de conférences à l'université Ibn Khaldoun de Tiaret qui a accepté de présider le jury.*

*Nous remercions les membres du jury, Monsieur HASSAN MADANI, Maître de conférences à l'université Ibn Khaldoun de Tiaret, pour le grand honneur qu'il nous a fait en acceptant d'examiner ce projet*

*Nous tenons à remercier Monsieur BENMEDJADI Abed El Kader Maître de conférences à l'université Ibn Khaldoun de Tiaret qui a accepté de nous encadrer, et nous lui exprimons particulièrement toute notre reconnaissance pour nous avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques*

*Nous remercions vivement Monsieur AMMARI Abed Kader Maître d'assistant à l'université Ibn Khaldoun de Tiaret pour son aide précieuse.*

*Nous remercions vivement Monsieur DJELOULI Abed El Kader Maître d'assistant à l'université Ibn Khaldoun pour son aide précieuse  
Pour son aide précieuse*



# Dédicace

*Je dédie ce modeste travail à :*

✚ *L'âme de mon père qui m'a bien éduquée.*

✚ *Ma vénérable mère qui m'a donnée  
beaucoup d'aide et de courage à  
réussir dans mon cursus scolaire.*

✚ *Mon cher frère et Mes chères sœurs.*

✚ *Mes chers neveux et Mes chères nièces*

✚ *A mes collègues et tous ceux  
qui me connaissent.*

✚ *Tous les étudiants du 2<sup>ème</sup>  
Master physique.*

*MER HAZNI Y*





# Dédicace

## Dédicace

*Je dédie ce travail à :*

- ◆ *Mes chers parents que Dieu les garde,*
- ◆ *A mes frères et sœurs.*
- ◆ *Ainsi à mes professeurs et mes amis.*



# *Sommaire*

# Sommaire

---

## Introduction générale

## Chapitre 1 : Rappel sur l'équation de Schrödinger

Introduction .....	06
1-1 -Physique classique et physique quantique : comparaison et enjeux.....	06
1- 1-1-Panorama de la physique classique.....	06
1-1-2-Première approche de la physique quantique.....	07
-Dualité onde –corpuscule.....	07
1-2- Probabilité ; Fonction d'onde ; équation de Schrödinger.....	08
1- 2-1- Description probabiliste et densité de probabilité.....	08
1- 2-2- Fonction d'onde.....	09
1- 2-3- Équation de Schrödinger.....	09
1-2-3-1- Principe de superposition.....	10

## Chapitre 2: Particule libre –paquet d'onde

2-1-Équation de Schrödinger pour une particule libre ( $E_p = 0$ ).....	12
2-1-1 Onde plane.....	12
2-2-2- Le paquet d'ondes.....	12
2-2-2-1-Définition.....	12
2-2-Particule dans un potentiel stationnaire.....	15
2-2-1- Résolution de l'équation de Schrödinger.....	15
2-3-Exempl.....	17
2-3-1-Marche de potentiel.....	17
2-3-2-Barriere de potentiel.....	21

## Sommaire

---

2-3-2-1- Cas ou $E < V_0$ : Effet Tunnel.....	22
2-3-2-1-1- Traversée de la barrière.....	22
2-3-2-2- Cas ou $E > V_0$ : Transfert résonnant.....	23
2-3-3- Puits de potentiel.....	24
2-3-3-1-Puits de potentiel fini.....	24
2-3-3-2-Puits de potentiel infini.....	26

### Chapitre3 : méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger

#### Présentation de MATLAB

3-1-Introduction Historique .....	29
3-1-1-Démarrage de MATLAB .....	31
3-1-2-Écriture d'un programme MATLAB .....	33
3-1-3-Génération de graphique avec MATLAB.....	33
3-2-Méthodes de résolution.....	35
3-2-1- Méthodes d'intégrations numériques.....	35
3-2-1-1- Méthode des trapèzes.....	35
3-2-1-2- Méthode des Simpson.....	36
3-2-2- Méthodes itératives.....	36
3-2-2-1-Méthode de Gauss-Seidel.....	36
3-3-Résolution numérique des équations différentielles.....	38
3-3-1- Équations différentielles du second ordre.....	38
3-3-1-1-Méthode d'Euler.....	38
3-3-1-2-Méthode de Runge-Kutta.....	38
3-3-1-2-1-Méthode de Runge-Kutta du second ordre.....	39



## Sommaire

---

### Chapitre 4 : Résultats et simulation

Exemples de résolution analytique de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.....	41
4-1- Etalement d'un paquet d'ondes gaussien.....	41
4-2-Résultats .....	43
4-2-1-Etalement d'un paquet d'ondes gaussien.....	43
4-2-2-Barrière de potentielle .....	44
- Cas $E < V_0$ : Effet Tunnel.....	44
- Cas ou $E > V_0$ : Transfert résonnant.....	47
4-2-3-Puits de potentiel infini .....	50
Conclusion.....	54
Références bibliographiques	

# ***Introduction générale***

### Introduction :

L'équation de Schrödinger sous sa forme assez simple mais ses implications sont indispensables à compréhension de la physique quantique.

Dans ce travail, on va essayer de présenter de façon simple et sans aucun doute incomplète l'équation de Schrödinger, son histoire, sa signification physique.

On abordera les formes stationnaires et dépendantes du temps de cette équation. Un premier point important: on se situe toujours dans des conditions non relativistes. Autre point qui a son importance: il nous semble indispensable de maîtriser la physique ondulatoire (ou de mécanique des ondes) pour aborder l'étude de l'équation de Schrödinger. En effet, son établissement fait appel à des notions de base des ondes (solution de propagation, paquet d'ondes).

### -Présentation

- Avant d'aller plus loin, il nous semble naturel et indispensable de présenter cette équation :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + E_p(r) \psi(\vec{r}, t)$$

$E_p(r)$ : Représente l'énergie potentielle

$\psi(\vec{r}, t)$  : Représente la fonction d'onde.

### -Son histoire

Disons d'abord quelques mots d'Erwin Schrödinger. C'est un viennois, né en août 1887. Après ses études à Vienne, il devient titulaire de la chaire de physique théorique de Zürich (chaire qui fut précédemment occupée par von Laue et Einstein...) en 1920. Il réalisa ses travaux de synthèse de la mécanique ondulatoire de de Broglie entre 1925 et 1926 et sortit son article fondateur "Quantification et valeurs propres" dans les célèbres "Annalen der Physik" - vol 79 - fin 1926.

A travers cet article, il réalise la synthèse entre l'approche de la dynamique des particules de Hamilton, introduite en physique quantique par Heisenberg et Dirac, et l'approche ondulatoire du même Hamilton, approche que défendait Schrödinger.

Schrödinger s'est aperçu qu'il était possible de passer du formalisme particulaire au formalisme ondulatoire en remplaçant les coordonnées  $p$  et  $q$  hamiltoniennes du premier formalisme par des opérateurs différentiels. Ce qui aboutit à sa célèbre équation.

Schrödinger quitta Zürich pour Berlin en **1927**, où il succéda à Max Planck à la chaire de physique théorique.

Schrödinger est lauréat du Prix Nobel de **1933**, avec P.A.M Dirac. Il est mort en 1961 à Vienne.

### **-Comment construire l'équation de Schrödinger**

#### **- La démarche générale :**

Examinons la démarche générale de Schrödinger pour aborder le problème du mouvement de l'électron autour du noyau d'hydrogène, en 1925. Il y avait à l'époque au moins 4 modèles en concurrence, qui devaient tous rendre compte des données expérimentales, en particulier la loi de Balmer-Rydberg. Ces modèles sont:

- la mécanique ondulatoire de de Broglie
- la mécanique des matrices de Heisenberg
- la mécanique non commutative de Dirac
- la mécanique ondulatoire de Schrödinger.
- Dans ces mécaniques, la position de l'électron dépendait de 2 paramètres (introduits par Sommerfeld) et donc comportait 2 nombres quantiques.

Schrödinger pense au problème comme à ceux de la dynamique classique sphérique, soit  $r$ ,  $\varphi$  et  $\theta$ . un problème général de dynamique et postule que le mouvement est défini par 3 paramètres, et c'est à ce moment qu'il a eu l'idée de génie de considérer ce mouvement comme un mouvement ondulatoire, défini par l'équation des cordes vibrantes.

Il utilise le formalisme hamiltonien pour décrire la dynamique du mouvement et aboutit ainsi à son équation.

Pour rester dans les généralités, il faut souligner un point qui nous semble essentiel. Schrödinger n'a jamais voulu donner une signification physique à son équation! Il a toujours considéré que c'était un outil mathématique pratique pour retrouver les coefficients numériques des séries de Balmer. En fait, cette équation signifie pour lui, que dans un atome, tout électron peut avoir un certain nombre d'états énergétiques  $E_n$  et qu'à chacune de ces énergies, correspond une fonction d'onde  $\psi(r, \varphi, \theta)$  de paramètre  $r$ ,  $\varphi$  et  $\theta$ . Et donc, son équation permet de calculer les valeurs de  $\psi_n$  qui sont associées à 3 nombres quantiques.

C'est tout.... Bien sûr, d'autres se sont chargés de changer cette approche!

Voyons maintenant tout ça en un peu plus de détails.

# ***CHAPITRE 1***

## ***Rappel sur l'équation de Schrödinger***

**Introduction :**➤ **1-1 -Physique classique et physique quantique : comparaison et enjeux****1-1-1-Panorama de la physique classique**

Quatre grandes matières :

– La mécanique classique, régie par la deuxième loi de Newton :

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}$$

p : représente la quantité de mouvement

Valable aussi en relativité restreinte avec une définition adéquate de p.

– L'électromagnétisme, régie par les équations de Maxwell :

$$\text{div } \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad \text{rot } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\text{div } \vec{B} = 0 \quad \text{rot } \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

la force de Lorentz :  $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \square \vec{B})$

-la thermodynamique (entropie), l'origine microscopique de celle-ci a été comprise à la fin du 19<sup>ème</sup> siècle et se ramène à un postulat sur la probabilité pour le système d'avoir une énergie E à une température T donnée, qui est proportionnelle au poids de Boltzmann

$$P(E) = \exp\left(-\frac{E}{K_B T}\right)$$

Où  $K_B$  est une constante de Boltzman.

– la gravitation : en fait, c'est la théorie de la relativité générale d'Einstein qui associe le mouvement des masses à une courbure de l'espace-temps. [1]

### 1-1-2-Première approche de la physique quantique

#### -Dualité onde–corpuscule

La mécanique quantique est une théorie très ambitieuse : prédire tous les comportements de la matière à partir de ses constituants élémentaires.

En fait, certains physiciens croient à « l'équation de tout ». Pour l'instant, cette équation n'existe pas. En fait, les hypothèses considérées consistent, en partant des noyaux et des électrons, à trouver des équations qui permettent, au moins dans le principe, des prédictions sur tout le monde qui nous entoure. Ces équations permettent en fait avec quelques adaptations de décrire aussi la matière nucléaire, ce qui permet d'arriver aux étoiles et donc à tout le système solaire.

En fait, il faut aussi associer la théorie de Maxwell du champ électromagnétique à la théorie quantique, afin de décrire la lumière émise par les atomes.

La longueur d'onde ( $\lambda$ ) associée à une particule de quantité de mouvement  $\vec{P}$  ( $\vec{P} = m\vec{v}$ ) est donnée par la relation de de Broglie :

$$P = \frac{h}{\lambda}$$

$h$  : constante de Planck



## 1-2-Probabilité ; Fonction d'onde ; équation de Schrödinger

### 1-2-1- Description probabiliste et densité de probabilité

En fait, toute la physique est une description probabiliste : un résultat de mesure est donné par un nombre et son incertitude, et on peut même dire que l'on peut souvent donner une loi de probabilité de trouver telle valeur de la mesure (on fait plusieurs fois la même expérience).

On prendra l'exemple de la mesure de position d'une particule. En général, on envoie la particule sur un détecteur (par exemple si c'est un photon, une plaque photo), et on répète plein de fois l'expérience. La densité d'impacts sur la plaque photo est proportionnelle à la densité de probabilité  $P(r)$  de trouver le photon au point  $r$ . Pour fixer les idées, on rappelle la définition de  $P(r)$ . La probabilité  $dP(r)$  de trouver la particule dans un petit volume  $d^3r$  est  $dP(r) = P(r)d^3r$ . Cela n'est pas limité à la mesure de la position, mais peut-être étendu à la mesure de toute variable continue, par exemple la vitesse ( $dP(v) = P(v) dv$ ), ou une seule coordonnée  $x$  ( $dP(x) = P(x)dx$ ).

On peut aussi avoir des probabilités discrètes (le résultat de mesure est une parmi  $N$  possibilités), par exemple, savoir si la particule est dans un volume  $V$  (résultat  $V$ ) en dehors (résultat  $\bar{V}$ ). On définit alors les deux valeurs  $P_V$  et  $P_{\bar{V}}$ .

A partir de la mécanique classique, on pourrait écrire alors l'évolution de ces densités de probabilités au cours du temps (en supposant qu'on les connaît au temps  $t = 0$  et en résolvant les équations de Newton).

Il se trouve que cette méthode ne donne pas les bons résultats dès qu'on arrive dans le domaine microscopique (c.-à-d. quand  $\lambda_d$  est de l'ordre de grandeur des distances de variation de cette probabilité). On doit alors avoir recours à une autre description.

$\lambda_d$  : longueur d'onde de de Broglie

### 1-2-2- Fonction d'onde

Après quelques tâtonnements, les physiciens sont arrivés à la conclusion que pour bien décrire la physique d'une particule à des échelles de longueur de l'ordre de  $\lambda_d$ , il fallait introduire une nouvelle fonction de la position, appelée fonction d'onde, notée en général  $\psi(r)$  dont les valeurs sont *complexes* et qui a la propriété que  $|\psi(r)|^2 = P(r)$ , la densité de probabilité. En clair, on complète la description par  $P(r)$  en ajoutant une phase  $\psi(r) = \sqrt{P(r)} \exp(i\varphi(r))$ . Il se trouve que l'on peut retrouver toutes les autres probabilités ( $P(v)$ ,  $P_V$  par exemple) à partir de la seule connaissance de  $\psi(r)$ . Nous verrons comment dans quelques exemples.

### 1-2-3- Équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger dépendante du temps Cette équation décrit comment la fonction d'onde se transforme au cours du temps. On a donc une fonction  $\psi(r)$  pour chaque valeur du temps  $t$ . On définit donc une fonction  $\psi(r, t)$ . Attention, cette fonction n'est en aucun cas reliée à une densité de probabilité de mesure d'un temps ou quelque chose comme ça :  $|\psi(r, t)|^2 dt$  (noter l'élément différentiel  $dt$ ) n'a aucune signification physique !  $t$  est ici un paramètre et non un résultat de mesure. L'équation s'écrit (On ne répète pas les variables de la fonction afin d'alléger l'écriture) :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + E_p(r) \psi \quad (1.1)$$

Où  $\hbar = h/2\pi$ ,  $\Delta$  est le laplacien et  $E_p(r)$  est l'énergie potentielle d'interaction de la particule (qui pourrait dépendre aussi du temps d'ailleurs).

#### Remarque :

Le fait que l'équation de Schrödinger est linéaire par rapport au temps on peut lui appliquer **le principe de superposition**.

**1-2-3-1- Principe de superposition :**

On peut faire une constatation très importante en regardant l'équation de Schrödinger, c'est qu'elle est *linéaire*. Cette constatation anodine est à la base de méthodes puissantes de résolution de l'équation. D'abord qu'est-ce que ça veut dire linéaire ? Que si  $\psi_1(r, t)$  et  $\psi_2(r, t)$  sont deux solutions de l'équation (1.1), alors  $\alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2$  est aussi solution de l'équation ( $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  peuvent être deux constantes complexes quelconques). C'est ce que l'on appelle le principe de superposition.

## ***CHAPITRE 2***

### ***Particule libre - Paquet d'onde***

D'après le principe de superposition, C'est ce qui permet d'essayer d'écrire la solution générale sous la forme d'une combinaison linéaire de solutions ayant certaines propriétés qui simplifient l'équation. En particulier, on peut éliminer le temps de l'équation, et obtenir l'**Équation de Schrödinger indépendante du temps**

### 2-1-Équation de Schrödinger pour une particule libre ( $E_p = 0$ ):

Pour une particule libre, on a  $E_p = 0$ , et l'équation s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \quad (1.1)$$

On peut en particulier constater qu'il n'y a aucun moyen d'obtenir une fonction normalisable à partir de l'équation stationnaire.

#### 2-1-1 Onde plane

Toutefois, on constate que formellement, une solution sous la forme d'une onde plane  $\psi(\vec{r}, t) = A \exp [i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)]$  satisfait à l'équation de Schrödinger pour une particule libre pourvu que  $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . D'autre part, la relation de Planck d'un côté  $E = \hbar\omega$  et la relation de Broglie de l'autre  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ , permettent de dire que l'on a bien  $E = \frac{p^2}{2m}$  qui est l'énergie cinétique, ce qui justifie a posteriori les conventions que nous avons prises pour  $(\omega = \frac{\hbar k^2}{2m})$ .

Comme cela est cité plus haut, cette solution n'est pas normalisable (L'intégrale du module au carré sur tout l'espace est infinie, quoiqu'on fasse !).

Mais on peut faire des superpositions linéaires de ces fonctions d'onde qui sont normalisables. Ce sont les paquets d'onde

#### 2-2-2- Le paquet d'ondes

##### 2-2-2-1-Définition

L'onde plane monochromatique d'étendue illimitée, ne peut être une solution physiquement acceptable de l'équation de propagation. D'abord une onde de ce type représente une particule dont la densité de probabilité de présence est uniforme dans tout l'espace, ensuite l'énergie qu'elle véhicule n'est pas une quantité finie.

On ne peut cependant abandonner complètement l'onde monochromatique en raison de sa simplicité mathématique et du potentiel de généralisation qu'elle contient, et dans la recherche d'une "bonne solution", l'idée la plus simple consiste à superposer plusieurs ondes monochromatiques en raison même du caractère linéaire de l'équation d'onde. Il reste alors à déterminer la superposition convenable. [2], [3], [4], [5], [6]

Montrons en effet que la densité de probabilité cesse d'être uniforme lorsqu'on superpose deux ondes de fréquences voisines et de même amplitude.

On a :

$$\psi_1 = \psi_0 e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} \text{ Avec } \omega_1 = \omega_0 - \Delta\omega, \omega_2 = \omega_0 + \Delta\omega$$

$$\psi_2 = \psi_0 e^{-i(\omega_2 t - k_2 x)} \quad k_1 = k_0 - \Delta k, k_2 = k_0 + \Delta k$$

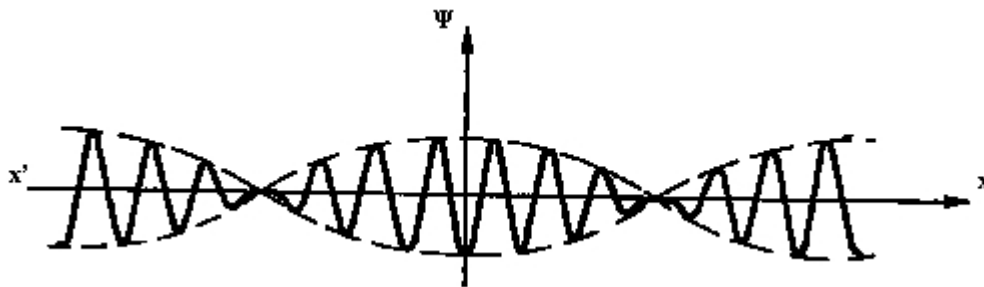
L'onde résultante en chaque point de l'espace est définie dans ce cas par :

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_1 + \psi_2 \\ &= \psi_0 [e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} + e^{-i(\omega_2 t - k_2 x)}] \quad (2.2) \end{aligned}$$

Soit :

$$\psi(x, t) = 2\psi_0 \cos(\Delta\omega t - \Delta k x) e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \quad (2.3)$$

L'amplitude de l'onde résultante est donc  $2\psi_0 \cos(\Delta\omega t - \Delta k x)$  et une photographie instantanée de cette onde donne une image telle que celle représentée sur la figure 2.1



**Figure 2.1 : Paquet résultant de la superposition de deux ondes monochromatiques de fréquences voisines**

On remarque que la densité de probabilité cesse d'être uniforme dans tout l'espace puisqu'elle est maximale dans certaines régions et nulle dans d'autres.

L'énergie demeure toutefois infinie car la particule est délocalisée sur tout l'axe  $\acute{x}$ .

On peut penser que le modèle s'améliore en superposant un plus grand nombre d'ondes de fréquences voisines de sorte que  $\Psi(x, t)$  s'écrive :

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^N g_n e^{-i(\omega_n t - k_n x)} \quad (2.4)$$

On montre cependant qu'une telle superposition d'un nombre fini d'ondes planes conduirait toujours à une délocalisation de la particule et à une divergence de l'énergie. La solution du problème ne peut être qu'une superposition infinie d'ondes planes ayant des vecteurs d'ondes  $k$  très voisins. On parvient ainsi à la définition du paquet d'ondes dont l'expression est :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{-i(\omega t - kx)} dk \quad (2.5)$$

$dk$  : espace des  $k$  (espace Réciproque)

Où  $g(k)$  est une fonction généralement complexe de la variable  $k$  et qui est localisée autour d'une valeur  $k_0$  et  $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$  est un facteur multiplicatif utilisé pour la normalisation des fonctions.

Une photographie du train d'onde à l'instant  $t = 0$  conduit à :

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (2.6)$$

On remarque que  $\psi(x, 0)$  et  $g(k)$  sont transformées de Fourier l'une de l'autre :

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx \quad (2.7)$$

On a, par conséquent la relation suivante :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk \quad (2.8)$$

Cette relation est appelée relation de Parseval et montre que si  $g(k)$  est une fonction de carré sommable  $\Psi(x, 0)$  l'est aussi. On peut donc pallier les insuffisances de l'onde plane monochromatique en construisant des paquets d'ondes à partir de fonctions  $g(k)$  adéquates.

Ce formalisme se généralise dans l'espace à trois dimensions et on aura :

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(k) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d\vec{k} \quad (2.9)$$

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(k) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{k} \quad (2.10)$$

## 2-2-Particule dans un potentiel constant

### 2-2-1- Résolution de l'équation de Schrödinger

On suppose (comme c'est souvent le cas) que l'énergie potentielle est indépendante du temps. Chercher des solutions de la forme d'un produit d'une fonction d'espace  $\varphi(\vec{r})$  et d'une fonction dépendant du temps  $\chi(t)$  soit :

Méthode de séparation variable

$$(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})\chi(t) \quad (2.11)$$

En portant cette expression dans l'équation de Schrödinger, il vient

$$i\hbar\varphi \frac{d\chi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\chi\Delta\varphi + E_p\chi\varphi \quad (1.12)$$

En divisant les deux membres de l'équation par le produit  $\chi\varphi$ , on obtient l'égalité:

$$i\hbar \frac{1}{\chi} \frac{d\chi}{dt} = \frac{\left[\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_p\right] \varphi}{\varphi} \quad (1.13)$$

Le membre de gauche est une fonction du temps tandis que le membre de droite est fonction uniquement de la position. Pour qu'il y ait égalité quelque soient  $\vec{r}$  et  $t$  il faut que les deux membres soient constants. Cette constante a les dimensions d'une énergie qu'on notera  $E$ . On aura alors les deux équations suivantes :

$$i\hbar \frac{d\chi}{\chi} = E dt \quad (1.14)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_p\right)\varphi = E\varphi \quad (1.15)$$

La première équation se résout simplement et a pour solution :

$$\chi(t) = \chi(0)e^{-i(E/\hbar)t} \quad (1.16)$$

Ce qui donne pour  $(\vec{r}, t)$  :

$$(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})e^{-i(E/\hbar)t} \quad (1.17)$$

La dépendance sinusoidale indique que la particule a une énergie bien définie et que sa densité de probabilité de présence est indépendante du temps:

$$|(\vec{r}, t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2 \quad (1.18)$$

On dit dans ce cas que la particule est dans des **états stationnaires** c'est à dire pour lesquels l'énergie  $E$  est constante.

On obtient ces états en résolvant l'équation (1.15) qui s'écrit aussi sous la forme :

$$H\varphi = E\varphi \quad (1.19)$$



Où  $H$  est l'opérateur hamiltonien  $(H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_p)$  et tel que :  $\int |\varphi(\vec{r})|^2 d^3r = 1$  (1.20)

Cette équation est appelée équation aux valeurs propres : C'est à dire pour des conditions imposées à  $\varphi(\vec{r})$ , celle-ci n'existe que pour certaines valeurs de l'énergie  $E$ , appelées valeurs propres de  $H$ .

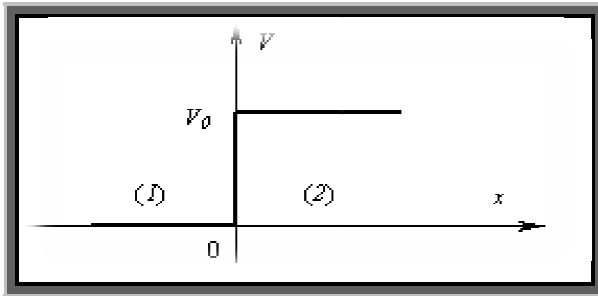
$\varphi(\vec{r})$  est alors appelée fonction propre correspondant à la valeur propre  $E$ .

## 2-3-1-Marche de potentiel

Soit une particule "incidente" d'énergie  $E$  venant des  $x$  négatifs et se dirigeant vers les  $x$  positifs. Cette particule rencontre en  $x = 0$  une marche de potentiel de hauteur  $V_0$  (fig. 1.1) définie par : [2], [3], [4], [5], [6]

$$V(x) = 0 \quad \text{pour } x < 0 \quad (2.21)$$

$$V(x) = V_0 \quad \text{pour } x > 0 \quad (2.22)$$



**Figure 2.2: Marche de potentiel**

Nous devons considérer deux cas, suivant que  $E$  est supérieur ou inférieur à la hauteur de la marche  $V_0$ .

**Cas où  $E > V_0$**

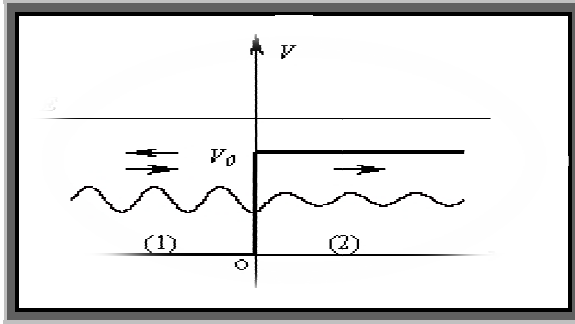


Figure 2.3 : Marche de potentiel ( $E > V_0$ )

**-Etude classique**

La particule d'énergie  $E$  à une vitesse  $\sqrt{2E/m}$  dans la région (1), elle est ralentie à la discontinuité et prend la vitesse  $\sqrt{2(E - V_0)/m}$  dans la région(2).

**- Etude quantique**

L'équation de Schrödinger peut s'écrire :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \varphi = 0 \quad (2.23)$$

On a alors dans les deux régions (1) et (2) :

**Région (1) :**  $\ddot{\varphi}_1 + K_1^2 \varphi_1 = 0$  , soit(2.24)

$\varphi_1(x) = A_1 e^{iK_1 x} + \hat{A}_1 e^{-iK_1 x}$ , avec  $K_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$  Solution de(1.15)

**Région (2) :**  $\ddot{\varphi}_2 + K_2^2 \varphi_2 = 0$  , soit(2.25)

$\varphi_2(x) = A_2 e^{iK_2 x} + \hat{A}_2 e^{-iK_2 x}$ , avec  $K_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$

$A_1 e^{iK_1 x}$  Représente l'onde incidente et  $\hat{A}_1 e^{-iK_1 x}$  l'onde réfléchi par le saut de potentiel.

$A_2 e^{iK_2 x}$  Représente l'onde transmise et  $\hat{A}_2 e^{-iK_2 x}$  est une onde réfléchi qui vient de l'infini, ce qui est impossible, donc  $\hat{A}_2 = 0$ .

Les solutions dans les deux régions sont en définitive :

$\varphi_1(x) = A_1 e^{iK_1 x} + \hat{A}_1 e^{-iK_1 x}$  (2.26)

$\varphi_2(x) = A_2 e^{iK_2 x}$  (2.27)

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée  $\varphi_1(0) = \varphi_2(0)$  et  $\dot{\varphi}_1(0) = \dot{\varphi}_2(0)$  donnent :

$$\frac{\hat{A}_1}{A_1} = \frac{K_1 - K_2}{K_1 + K_2} \text{ et } \frac{\hat{A}_1}{A_1} = \frac{2K_1}{K_1 + K_2} \quad (2.28)$$

On définit alors les coefficients de réflexion  $R$  et de transmission  $T$  de la particule par :

$$R = \left| \frac{\hat{A}_1}{A_1} \right|^2 \text{ et } T = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 \frac{v_2}{v_1} \quad (2.29)$$

Où  $V_{g1}$  et  $V_{g2}$  sont les vitesses de groupe associées aux paquets d'ondes dans les deux régions :

$$V_{g1} = \frac{\hbar K_1}{m} \text{ et } V_{g2} = \frac{\hbar K_2}{m} \quad (2.30)$$

On reviendra sur le bien-fondé de ces définitions de **R** et de **T** lors de l'étude du courant de probabilité.

On a alors :

$$R = \left( \frac{K_1 - K_2}{K_1 + K_2} \right)^2 = 1 - \frac{4K_1 K_2}{(K_1 + K_2)^2} \quad (2.31)$$

$$T = \frac{4K_1 K_2}{(K_1 + K_2)^2} \quad (2.32)$$

On vérifié bien que l'on a **R + T = 1**. Cette relation signifie qu'on a conservation du flux incident de particules : chaque particule incidente ne peut être que réfléchié ou transmise. Cette situation est similaire à la conservation de l'énergie en mécanique classique.

En conclusion on peut dire que contrairement aux prévisions classiques la particule a une probabilité non nulle de revenir en arrière **fig. 2.2** (onde réfléchié)

**Cas ou  $0 \leq E \leq V_0$**

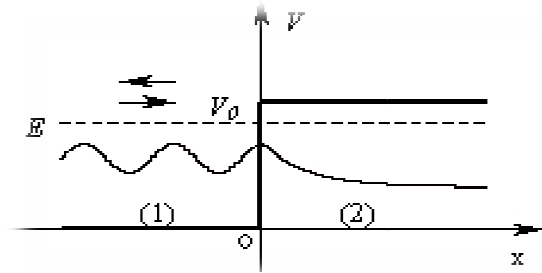


Figure 2.4 : Marche de potentiel ( $E < V_0$ )

### 3.2.1. Etude classique :

La particule a une vitesse  $\sqrt{2E/m}$  dans la région (1), sa vitesse  $V^2$  devient négative dans la région (2)  $\sqrt{2(E - V_0)/m}$  (pas de transmission).

### 3.2.2. Etude quantique :

Les fonctions d'onde de la particule dans les deux régions sont données par :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{iK_1 x} + \hat{A}_1 e^{-iK_1 x} \quad (2.33)$$

$$\varphi_2(x) = B_2 e^{\rho_2 x} + \hat{B}_2 e^{-\rho_2 x} \quad (2.34)$$

$$\text{Ou :} \quad K_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad \text{et} \quad \rho_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \quad (2.35)$$

Pour que  $\varphi_2(x)$  reste bornée lorsque  $x$  tend vers l'infini il faut que  $B_2 = 0$ , ce qui conduit à :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{iK_1 x} + \hat{A}_1 e^{-iK_1 x} \quad (2.36)$$

$$\varphi_2(x) = \hat{B}_2 e^{-\rho_2 x} \quad (2.37)$$

Les mêmes conditions de quantification que précédemment donnent :

$$\frac{\hat{A}_1}{A_1} = \frac{K_1 - i\rho_2}{K_1 + i\rho_2} \text{ et } \frac{\hat{B}_2}{A_1} = \frac{2K_1}{K_1 + i\rho_2} \quad (2.38)$$

Le coefficient de réflexion  $R$  vaut alors :

$$R = \left| \frac{\hat{A}_1}{A_1} \right|^2 = 1 \quad (2.39)$$

On doit donc avoir  $T = 0$ , cependant  $\left| \frac{\hat{B}_2}{A_1} \right|^2$  est différent de zéro, ce qui implique que la vitesse de groupe du paquet d'ondes est nulle dans la région (2).

Comme en mécanique classique, la particule est toujours réfléchié néanmoins il existe une onde du type évanescence ( $e^{-\rho_2 x}$ ) qui montre que la particule a une probabilité non nulle de se trouver dans la région (2), probabilité qui décroît exponentiellement (atténuation) en fonction de  $x$  et devient négligeable lorsque  $x$  est supérieure à la portée  $\frac{1}{\rho_2}$  (fig. 3.4).

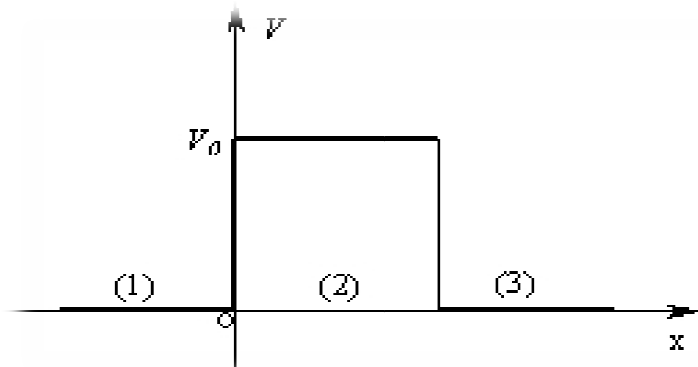
### 2-3-2-Barriere de potentiel

Elle est représentée par un potentiel qui est discontinu aux deux points d'abscisse  $x = 0$  et  $x = a$  (fig. 2.5) et est décrite par :

$$V(x)=0 \quad \text{pour } x < 0 \quad (2.40)$$

$$V(x)= V_0 \quad \text{pour } 0 \leq x \leq a \quad (2.41)$$

$$V(x)=0 \quad \text{pour } x > a \quad (2.42)$$



*Figure 2.5 : Barriere carrée de potentiel*

$a$  est appelé épaisseur de la barrière et  $V_0$  son hauteur.

#### 2-3-2-1- Cas ou $E < V_0$ : Effet Tunnel

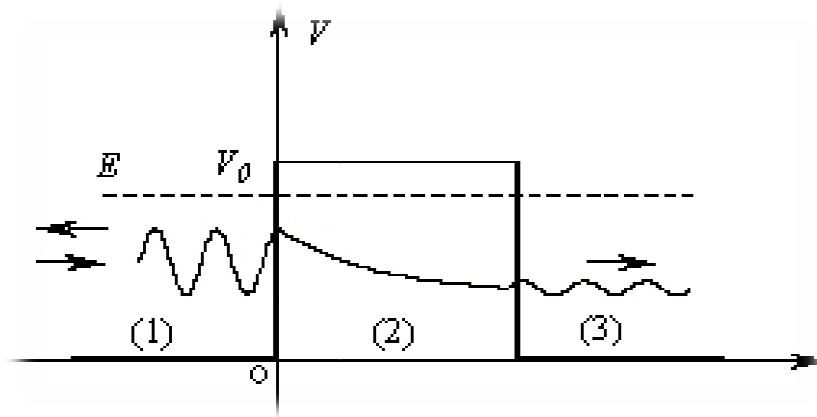


Figure 2.6 : Barrière carrée de potentiel ( $E < V_0$ )

### 2-3-2-1-1- Traversée de la barrière

La barrière de potentiel est infranchissable pour la particule classique qui est toujours réfléchiée dans la région (1).

En écrivant l'équation de Schrödinger dans les trois régions (1), (2) et (3) on montre facilement que les fonctions d'onde de la particule dans ces régions s'écrivent :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{iK_1 x} + \hat{A}_1 e^{-iK_1 x} \quad (2.43)$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{\rho_2 x} + \hat{A}_2 e^{-\rho_2 x} \quad (2.44)$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{iK_1 x} + \hat{A}_3 e^{-iK_1 x} \quad (2.45)$$

$K_1$  et  $\rho_2$  ont leur signification précédente et  $A_3$  doit être nul car toute réflexion à l'infini est impossible.

Les conditions de continuité en  $x = 0$  et  $x = a$  donnent, après un calcul laborieux mais non difficile à mener, les expressions suivantes des coefficients de réflexion et de transmission  $R$  et  $T$ :

$$R = \left| \frac{\hat{A}_2}{A_1} \right|^2 = \frac{(K_1^2 + \rho_2^2) \text{sh}^2(\rho_2 a)}{4K_1^2 \rho_2^2 + (K_1^2 + \rho_2^2)^2 \text{sh}^2(\rho_2 a)} \quad (2.46)$$

$$T = \frac{4K_1^2 \rho_2^2}{4K_1^2 \rho_2^2 + (K_1^2 + \rho_2^2)^2 \text{sh}^2(\rho_2 a)} \quad (2.47)$$

Donc, contrairement aux prévisions classiques, la particule a une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel : c'est l'effet Tunnel (fig. 2.6).

Cet effet est une réalité physique et intervient dans l'interprétation de beaucoup de phénomènes : radioactivité  $\alpha$ , passage des électrons d'un atome à un autre.

### 2-3-2-2- Cas ou $E > V_0$ : Transfert résonnant

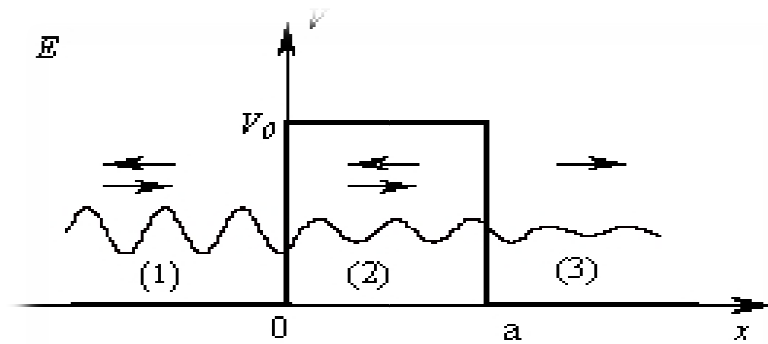


Figure 2.7 : Barrière carrée de potentiel ( $E > V_0$ )

Dans ce cas, on a toujours en mécanique classique une transmission de la particule avec un ralentissement dans la région centrale. Quantiquement on obtient les fonctions d'onde suivantes :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{iK_1 x} + \hat{A}_1 e^{-iK_1 x} \quad (2.48)$$

$$\varphi_2(x) = B_2 e^{iK_2 x} + \hat{B}_2 e^{-iK_2 x} \quad (2.49)$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{iK_1 x} + \hat{A}_3 e^{-iK_1 x} \quad (2.50)$$

$$\text{Avec } k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$$

$\hat{A}_3$  sera bien sûr nul car la réflexion à l'infini est impossible.

En remplaçant  $\rho_2$  par  $iK_2$  dans les expressions (2.46) et (2.47) de  $R$  et  $T$ , on obtient :

$$R = \left| \frac{\hat{A}_2}{A_1} \right|^2 = \frac{(K_1^2 - K_2^2) \sin^2(k_2 a)}{4K_1^2 k_2^2 + (K_1^2 - k_2^2) \sin^2(k_2 a)} \quad (2.51)$$

$$T = \frac{4K_1^2 k_2^2}{4K_1^2 k_2^2 + (K_1^2 - k_2^2) \sin^2(k_2 a)} \quad (2.52)$$

On remarque qu'il n'y a transmission complète ( $T = 1$ ) que lorsque  $k_2 a$  est un multiple de  $\pi$ .

Au fur et à mesure que la largeur de la barrière croît, le coefficient de transmission oscille entre cette valeur maximum et une valeur minimale  $T_m$  pour laquelle  $k_2 a = (2n + 1) \pi/2$  et qu'on montre également :

$$T_m = \frac{4E(E - V_0)}{(2E - V_0)^2} \quad (2.53)$$

### 2-3-3- Puits de potentiel

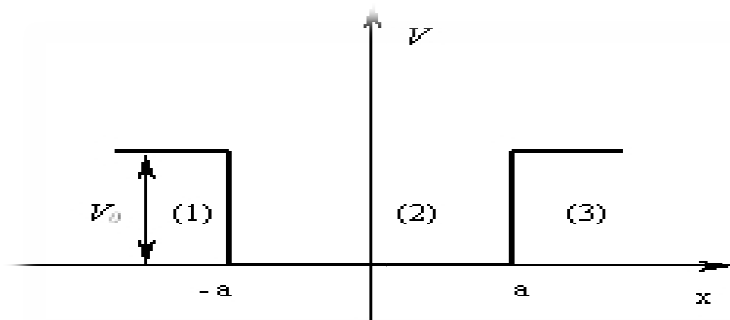


### 2-3-3-1- Puits de potentiel fini

Il est représenté sur la figure 2.8

La particule est en mouvement dans un potentiel  $V(x)$  tel que  $V(x)$  est nul sur le segment  $[a, -a]$  et  $V(x) = V_0$  en dehors de ce segment.

En mécanique classique, lorsque  $V_0$  est inférieur à l'énergie  $E$  de la particule ; celle-ci venant des  $x$  négatifs subit une accélération au passage de la discontinuité du potentiel en  $x = -a$  et reprend sa vitesse au passage de la discontinuité du potentiel en  $x = a$  pour aller se perdre à l'infini. Lorsque  $V_0$  est supérieur à  $E$ , tout mouvement de la particule est interdit en dehors du segment  $]a, -a[$ . La particule est donc astreinte à se mouvoir sur le segment de droite de longueur  $2a$  ou elle est confinée.



**Figure 2.8 : Puits carré de potentiel**

C'est à ce confinement qu'on va s'intéresser en mécanique quantique en écrivant l'équation de Schrödinger dans les trois régions (1), (2) et (3) où agit le potentiel :

- A l'extérieur du puits :  $|x| > a$

L'équation de Schrödinger s'écrit:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \rho^2\varphi = 0 \quad \text{avec } \rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) \quad (2.54)$$

et ses solutions sont :

$$\varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x} + \hat{B}_1 e^{-\rho x} \quad (2.55)$$

$$\varphi_3(x) = B_2 e^{\rho x} + \hat{B}_2 e^{-\rho x} \quad (2.56)$$

Comme  $\varphi(x)$  doit être bornée dans les régions (1) et (3), on a nécessairement  $\hat{B}_1 = B_2$ :

- A l'intérieur du puits :  $|x| < a$

L'équation de Schrödinger est :

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0 \text{ avec } k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \text{ (2.57)}$$

La solution générale de cette équation est donc de la forme :

$$\varphi_2(x) = A_1 e^{iK_1 x} + \hat{A}_1 e^{-iK_1 x} \text{ (2.58)}$$

Comme le potentiel est pair, les fonctions d'onde à l'intérieur du puits sont soit paires soit impaires c'est à dire qu'on a :

$$\rho_2^P = A \cos kx \quad \text{et} \quad \rho_2^I = B \sin kx \text{ (2.59)}$$

En conclusion le problème admet deux ensembles de solutions :

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x} \\ \rho_2^P = A \cos kx \\ \varphi_3(x) = \hat{B}_2 e^{-\rho x} \end{array} \right. \text{ et } \left\{ \begin{array}{l} \varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x} \\ \rho_2^I = B \sin kx \\ \varphi_3(x) = \hat{B}_2 e^{-\rho x} \end{array} \right.$$

Avec  $\hat{B}_2 = B_1$

Les conditions de raccordement imposées à la fonction d'onde et à sa dérivée aux points  $x = -a$  et  $x = +a$  conduisent pour les deux ensembles de solutions aux deux conditions de quantification suivantes :

$$tg(ka) = \frac{\rho}{k} \quad \text{et} \quad \cotg(ka) = -\frac{\rho}{k} \text{ (2.60)}$$

Il est possible de résoudre graphiquement ces équations implicites en E, mais il est plus simple de les ramener aux deux systèmes d'équations équivalentes suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} |\cos ka| = \frac{K}{k_0} \\ tg(ka) > 0 \end{array} \right. \text{ et } \left\{ \begin{array}{l} |\sin ka| = \frac{K}{k_0} \\ tg(ka) < 0 \end{array} \right.$$

$$\text{Où } k_0 \text{ est tel que : } K_0^2 = K^2 + \rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \text{ (2.61)}$$

Les niveaux d'énergie sont déterminés par l'intersection d'une droite de pente  $1/K_0$  avec des arcs de sinussoïde (fig. 2.9). Ces niveaux sont intercales en niveaux pairs et impairs correspondant à des fonctions d'onde paires et impaires représentant les états liés de la particule.

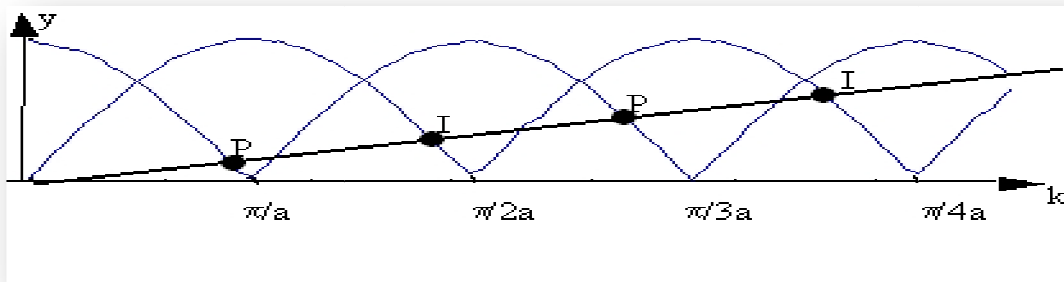
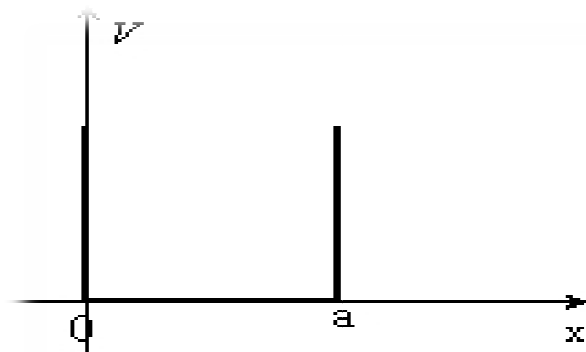


Figure 2.9: Détermination graphique des énergies des états liés d'une particule dans un puits carré de potentiel.

### 2-3-3-2- Puits de potentiel infini

Une particule confinée entre deux murs rigides (\$V(x) = \infty\$)



Entre \$x = 0\$ et \$x = a\$, \$V(x) = 0\$ ;  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E \psi(x)$  (2.62)

Solution générale

$$\psi(x) = A \cdot e^{iK_1x} + B \cdot e^{-iK_1x} \tag{2.63}$$

A et B définies aux conditions limites

$$\psi(x) = A \cdot e^{iK_1x} + B \cdot e^{-iK_1x} \tag{2.64}$$

$$= (A + B) \cos kx + i(A - B) \sin kx \tag{2.65}$$

Conditions limites :

- En \$x = 0\$, \$\psi(x) = 0 \Leftrightarrow B = -A\$ (2.66)

$$\psi(x) = C \sin kx \tag{2.67}$$

- En \$x = a\$, \$\psi(x) = 0\$ (2.68)

$$\Leftrightarrow ka = n\pi, n = 1, 2, \dots$$

$$k = \frac{n\pi}{a}; \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2a}{n} \tag{2.69}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E \psi(x) \quad (2.70)$$

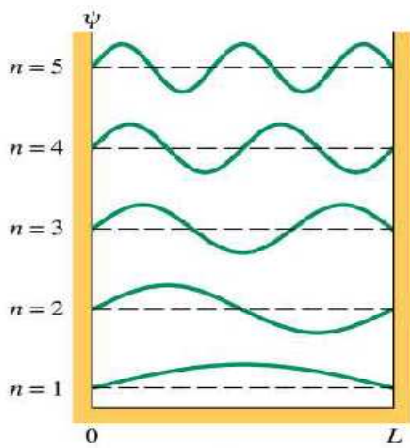
et  $\psi(x) = C \sin kx$  (2.71)

$$\Leftrightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.72)$$

Avec:  $k = \frac{n\pi}{a}$

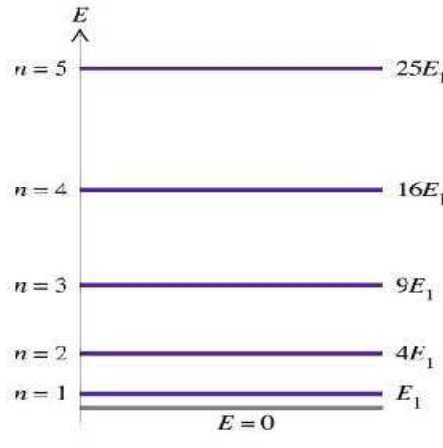
Spectre discret d'énergie :

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (2.73)$$



(a)

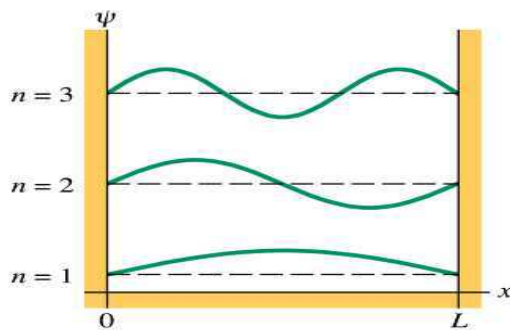
Copyright © Addison Wesley Longman, Inc.



(b)

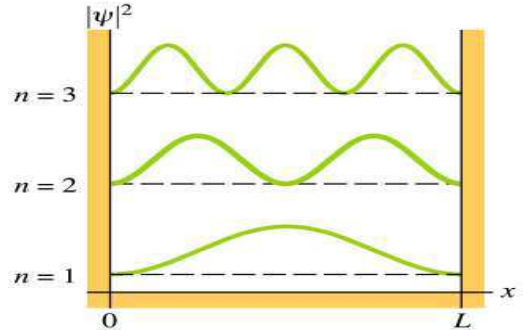
La quantité  $|\psi(x)|^2 dx$  est proportionnelle à la probabilité que la particule se trouve dans le petit intervalle  $dx$  autour de  $x$

$$|\psi(x)|^2 dx = C^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx \quad (2.74)$$



(a)

Copyright © Addison Wesley Longman, Inc.



(b)

**Contrairement à la mécanique classique**, la probabilité de trouver

la particule à un endroit donné entre les deux murs n'est pas constante suivant  $x$ .

***CHAPITRE 3***  
***Méthodes de résolution***

**Présentation de MATLAB****3-1-Introduction et historique**

MATLAB est une abréviation de Matrix LABORatory. Écrit à l'origine, en Fortran, par C. Moler, MATLAB était destiné à faciliter l'accès au logiciel matriciel développé dans les projets LINPACK et EISPACK. La version actuelle, écrite en C par the Math Works Inc., existe en version professionnelle et en version étudiant. Sa disponibilité est assurée sur plusieurs plateformes: Sun, Bull, HP, IBM, compatibles PC (DOS, Unix ou Windows), Macintosh, iMac et plusieurs machines parallèles. [7]

MATLAB est un environnement puissant, complet et facile à utiliser destiné au calcul scientifique. Il apporte aux ingénieurs, chercheurs et à tout scientifique un système interactif intégrant calcul numérique et visualisation. C'est un environnement performant, ouvert et programmable qui permet de remarquables gains de productivité et de créativité. Il dispose de plusieurs centaines (voire milliers, selon les versions et les modules optionnels autour du noyau Matlab) de fonctions mathématiques, scientifiques et techniques. L'approche matricielle de MATLAB permet de traiter les données sans aucune limitation de taille et de réaliser des calculs numériques et symboliques de façon fiable et rapide. Grâce aux fonctions graphiques de MATLAB, il devient très facile de modifier interactivement les différents paramètres des graphiques pour les adapter selon nos souhaits.

L'approche ouverte de MATLAB permet de construire un outil sur mesure. On peut inspecter le code source et les algorithmes des bibliothèques de fonctions (Toolboxes), modifier des fonctions existantes et ajouter d'autres.

MATLAB possède son propre langage, intuitif et naturel qui permet des gains de temps de CPU spectaculaires par rapport à des langages comme le C, le TurboPascal et le Fortran. Avec MATLAB, on peut faire des liaisons de façon dynamique, à des programmes C ou Fortran, échanger des données avec d'autres applications (via la DDE : MATLAB serveur ou client) ou utiliser MATLAB comme moteur d'analyse et de visualisation.

MATLAB comprend aussi un ensemble d'outils spécifiques à des domaines, appelés Toolboxes (ou Boîtes à Outils). Indispensables à la plupart des utilisateurs, les Boîtes à Outils sont des collections de fonctions qui étendent l'environnement MATLAB pour résoudre des catégories

spécifiques de problèmes. Les domaines couverts sont très variés et comprennent notamment le traitement du signal, l'automatique, l'identification de systèmes, les réseaux de neurones, la logique floue, le calcul de structure, les statistiques, etc.

MATLAB fait également partie d'un ensemble d'outils intégrés dédiés au Traitement du Signal. En complément du noyau de calcul MATLAB, l'environnement comprend des modules optionnels qui sont parfaitement intégrés à l'ensemble :

- 1) une vaste gamme de bibliothèques de fonctions spécialisées (**Toolboxes**)
- 2) **Simulink**, un environnement puissant de modélisation basée sur les **schémas-blocs** et de simulation de systèmes dynamiques linéaires et non linéaires
- 3) Des bibliothèques de blocs **Simulink** spécialisés (**Blocksets**)
- 4) D'autres modules dont un **Compilateur**, un **générateur de code C**, un **accélérateur**,...
- 5) Un ensemble d'outils intégrés dédiés au Traitement du Signal : le **DSP Workshop**.

### - Quelles sont les particularités de MATLAB ?

MATLAB permet le travail interactif soit en mode commande, soit en mode programmation ; tout en ayant toujours la possibilité de faire des visualisations graphiques. Considéré comme un des meilleurs langages de programmations (C ou Fortran), MATLAB possède les particularités suivantes par rapport à ces langages :

- la programmation facile,
- la continuité parmi les valeurs entières, réelles et complexes,
- la gamme étendue des nombres et leurs précisions,
- la bibliothèque mathématique très compréhensive,
- l'outil graphique qui inclue les fonctions d'interface graphique et les utilitaires,
- la possibilité de liaison avec les autres langages classiques de programmations (C ou Fortran).

Dans MATLAB, aucune déclaration n'est à effectuer sur les nombres. En effet, il n'existe pas de distinction entre les nombres entiers, les nombres réels, les nombres complexes et la simple ou double précision. Cette caractéristique rend le mode de programmation très facile et très rapide.[8]

En Fortran par exemple, une sous-routine est presque nécessaire pour chaque variable simple ou double précision, entière, réelle ou complexe. Dans MATLAB, aucune nécessité n'est demandée pour la séparation de ces variables.

La bibliothèque des fonctions mathématiques dans MATLAB donne des analyses mathématiques très simples. En effet, l'utilisateur peut exécuter dans le mode commande n'importe quelle fonction mathématique se trouvant dans la bibliothèque sans avoir à recourir à la programmation.

Pour l'interface graphique, des représentations scientifiques et même artistiques des objets peuvent être créées sur l'écran en utilisant les expressions mathématiques. Les graphiques sur MATLAB sont simples et attirent l'attention des utilisateurs, vu les possibilités importantes offertes par ce logiciel.

### **3-1-1-Démarrage de MATLAB**

Pour lancer l'exécution de MATLAB :

- sous Windows, il faut cliquer sur Démarrage, ensuite Programme, ensuite MATLAB,
- sous d'autres systèmes, se référer au manuel d'installation.

L'invite '>>' de MATLAB doit alors apparaître, à la suite duquel on entrera les commandes.

La fonction "**quit**" permet de quitter MATLAB :

```
>>quit
```

La commande "**help**" permet de donner l'aide sur un problème donné.

#### **Exemple:**

```
>> help cos
```

COS Cosine.

COS(X) is the cosine of the elements of X.

#### **Autres commandes :**

- what : liste les fichiers \*.m et \*.mat dans le directory utilisé
- who : liste les variables utilisées dans l'espace courant
- ans : réponse retournée après exécution d'une commande



### Calcul arithmétique :

+ plus.	/ Division.
- moins.	* multiplication.

**Test 'if'** Ce test s'emploie, souvent, dans la plupart des programmes. Un test 'if' est toujours suivi par un 'end'.

### Autres opérateurs :

> Supérieur à	>= Supérieur ou égal
< Inférieur à	<= Inférieur ou égal

> : supérieur à	.*: produit élément par élément de matrices
<: inférieur à	.^ : puissance élément par élément dematrices
>= : supérieur ou égal	./ : division élément par élément de matrices
<= : inférieur ou égal	x: or OU exclusif (XOR)
Error : affiche le message : 'error'	message spécifié, émet un 'bip' et interrompt l'exécution du programme

### 3-1-2-Écriture d'un programme MATLAB :

En MATLAB, les programmes se terminent par une extension '.m' dans le nom du fichier programme. Aucune compilation n'est à faire avant l'exécution du programme. Au cours de l'exécution, un message d'erreur apparaît et indique les lieux où se trouvent les erreurs.

Pour lancer l'exécution du programme, il faut se mettre toujours dans le même répertoire où se trouve ce programme.[9]

*Exemple :* ce dernier se trouve dans c:\utilisateur ; il faut changer tout d'abord de répertoire après avoir lancé MATLAB en tapant :"`cd c:\utilisateur`"

Les fichiers de données sont enregistrés avec une extension '.mat' et les variables sont enregistrées en double précision.

### 3-1-3-Génération de graphique avec MATLAB

MATLAB est un outil très puissant et très convivial pour la gestion des graphiques, que ce soit en une dimension, en deux dimensions ou en trois dimensions. Pour tracer une courbe  $y=\sin(x)$  par exemple, où  $x=0:50$  ; il suffit de faire :

```
>>x=0:50;y=sin(x);plot(x, y)
```

Ci-dessous, un petit résumé très succinct est donné pour tracer, concernant le traçage des graphiques et la manipulation des axes et des échelles :

- xlabel('temps') : pour donner un titre à l'axe x,
- ylabel('vitesse') : pour donner un titre à l'axe y,
- title ('évolution de la vitesse') : pour donner un titre au graphique,
- text (2, 4,'+++Température T1') : au point  $M=\begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix}$ , écrire la légende de la courbe tracée avec "+++",
- loglog(x, y) : tracer la courbe en échelle logarithmique (log-log),
- semilogx(t, f(t)) : tracer la courbe seulement en échelle logarithmique suivant x,
- semilogy(t, f(t)) : tracer la courbe seulement en échelle logarithmique suivant y,
- grid on : afficher le quadrillage dans le graphique,
- grid off : masqué le quadrillage dans le graphique,
- clf : effacer le graphique,
- close figure(i) : fermer (ou quitter) la figure (i),

- close all : fermer tous les graphiques ouverts,
- plot(x, y, x,z,x,w) : tracer y, z et w en fonction de x sur le même graphe,
- polar(x, y) : tracer la courbe y en fonction de x en coordonnées polaires,
- plot(x, y, 'g') : tracer y en fonction de x avec des marques '+' en couleur verte,
- fplot('f\_nom', [x-mini, x-maxi]) : tracer la fonction f\_nom selon les axes données (x),
- axis('square') : tracer un graphe géométriquement carré,
- axis('off') : masque les axes x et y,
- axis('on') : affiche les axes x et y,
- axis([x-mini, x-maxi, y-mini, y-maxi]) : affiche le graphique selon les limites données des axes x et y,
- hold('on') : traçage des courbes sur le même graphique à chaque fois qu'on exécute la fonction plot,
- hold('off') : traçage de chaque courbe sur un nouveau graphique à chaque fois qu'on exécute la fonction plot,
- plot3(x, y, z) : tracer z en fonction de x et de y en 3D,
- la fonction 'meshgrid' est utilisée : pour créer un maillage 2D (x, y) ; si on se donne,  $x_a = [\dots : \dots]$  et  $y_a = [\dots : \dots]$ , ceci est très important sont des valeurs complexes  $[x, y] = \text{meshgrid}(x_a, y_a)$ ,
- mesh(xa, ya, z) : tracer le graphique en 3D de z,
- quiver(x, y, u, v, s) : tracer le champ vectoriel dans le plan (x, y) où c'est la taille de base à donner aux vecteurs,
- contour(x, y, z, 'niveau') : tracer les lignes iso-valeurs de z dans le plan (x, y) où le niveau représente le nombre de lignes iso-courbes.

### 3-2-Méthodes de résolution

Dans la plupart des cas, les fonctions analytiques, du fait de leurs complexités, ne sont pas intégrables analytiquement. Dans d'autres cas, on a des fonctions qui sont évaluées numériquement en différents points de l'intervalle où ces dernières sont données, et l'intégrale de ces types de fonctions ne peut être obtenue que par des approches numériques. Dans ce chapitre, on s'intéresse aux méthodes utilisées fréquemment ; à savoir la méthode des trapèzes, la méthode de Simpson. Nous étudierons également les méthodes d'intégrations numériques et méthodes itératives.[10]

#### 3-2-1- Méthodes d'intégrations numériques

##### 3-2-1-1- Méthode des trapèzes

Soit la fonction  $f(x)$  à intégrer sur  $[a, b]$ . L'intégrale  $I$  de  $f(x)$  s'écrit en utilisant la méthode des trapèzes :

$$I = \int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2} (f_1 + 2f_2 + 2f_3 + \dots + 2f_i + \dots + 2f_n + 2f_{n+1}) + E$$

$$= \frac{h}{2} (f(x_1) + f(x_{n+1}) + 2 \sum_{i=2}^n f(x_i)) + E$$

$$\text{Où } h = \frac{b-a}{n}; \quad x_i = a + (i-1)h; \quad f_i = f(x_i) \text{ et } i = 1, 2, 3, \dots, n, n+1$$

Le terme représentant l'erreur est :

$$E \approx -\frac{(b-a)}{12} \cdot h^2 \cdot \overline{f''} \approx \frac{(b-a)}{12 \cdot n^2} \cdot \overline{f''}$$

$\overline{f''}$  est la moyenne de  $f''(x)$  sur l'intervalle  $[a, b]$ . L'erreur  $E$  est inversement proportionnelle à la valeur de  $n^2$

Si la fonction  $f$  est donnée sur les intervalles réguliers ( $x_i - x_{i-1} = h$ ), la méthode des trapèzes peut être écrite dans *Matlab* sous la forme :

$$I = h * (\text{sum}(f) - 0.5 * (f(1) + f(\text{length}(f))))$$

Avec :  $sum(f) = f_1 + f_2 + f_3 + \dots + f_i + \dots + f_n + f_{n+1}$

On peut également faire un programme pour calculer l'intégrale .Celui-ci appelé 'trapez\_v.m' par exemple, est listé ci-dessous :

Function I=trapez\_v (g, h)

I= (sum (f)-(f(1) +f (length (f)))/2)\*h;

### 3-2-1-2- Méthode de Simpson

Soit  $I$  l'intégrale de  $f(x)$  sur l'intervalle  $[a b]$  . Par la méthode de *Simpson*,  $I$  s'écrit :

$$I = \int_a^b f(x). dx = \frac{Dx}{3} \left[ f(1) + f(n + 1) + 4 \sum_{i=2}^{n=1} f(i) + 4 \sum_{\substack{i=3 \\ i \rightarrow \text{impair}}} f(i) \right] + E$$

$$f(i) = f \left( a + \frac{i-1}{h} \right) \text{ et } h = \frac{b-a}{n}$$

Le terme  $E$  est donné par :

$$E \approx -(b - a) \frac{h^4}{180} \cdot \overline{f''''}$$

et  $\overline{f''''}$  est la moyenne de  $f''''(x)$  sur l'intervalle ouvert  $]a, b[$

### 3-2-2- Méthodes itératives

#### 3-2-2-1-Méthode de Gauss-Seidel

Résoudre le même système précédent par la méthode de Gauss-Seidel. Écrire un algorithme (Matlab) permettant de résoudre ce système et déterminer le nombre d'itérations nécessaires pour obtenir une erreur

$$\delta(i) = |x_{n+1}(i) - x_n(i)| = 10^{-10}$$

Comparer les résultats avec la méthode de Jacobi et conclure.

Représenter sur le même graphe l'évolution des solutions  $x_i$  en fonction du nombre d'itérations.

Changer les valeurs initiales  $x_i^0$  , exécuter le programme puis conclure.

*Solution :*

\* *Méthode itérative générale :*

Appelons l'algorithme permettant de calculer la solution '*G-seid.m*'

On se donne des valeurs arbitraires  $x_i^0$  : par exemple  $x_i^0 = 0$ . Le système à résoudre est :

$$A \cdot x = y ; \text{ où, et } A = |a_{ij}|, x = x_i \text{ et } y = y_i$$

La matrice  $A$  et le vecteur colonne  $y$  sont connus, le vecteur colonne  $x$  reste inconnu. Ainsi, la méthode itérative générale consiste à écrire :

$$x(i) = \frac{y(i) - \alpha(i,j) \cdot x(j)}{\alpha(i,i)} \text{ Pour } i \neq j \text{ et } \alpha(i,i) \neq 0$$

En particulier, pour un système de 3 équations à 3 inconnues, on a :

$$i = 1 \rightarrow j = 2 \text{ et } 3, x(1) = \frac{y(1) - \alpha(1,2) \cdot x(2) - \alpha(1,3) \cdot x(3)}{\alpha(1,1)}$$

$$i = 2 \rightarrow j = 1 \text{ et } 3, x(2) = \frac{y(2) - \alpha(2,1) \cdot x(1) - \alpha(2,3) \cdot x(3)}{\alpha(2,2)}$$

$$i = 3 \rightarrow j = 1 \text{ et } 2, x(3) = \frac{y(3) - \alpha(3,1) \cdot x(1) - \alpha(3,2) \cdot x(2)}{\alpha(3,3)}$$

et ceci pour chaque itération.

### 3-3-Résolution numérique des équations différentielles

Le comportement dynamique des systèmes est un sujet très important en physique. Un système mécanique par exemple, se traduit par des déplacements, des vitesses et des accélérations. Un système électrique ou électronique, etc. En général, les équations utilisées pour décrire de tels comportements dynamiques, incluent des quantités inconnues représentant les fonctions recherchées et leurs dérivées.

Une équation qui comporte une ou plusieurs dérivées de la fonction inconnue est appelée 'équation différentielle', qui est représentée dans MATLAB par l'abréviation 'ODE'. L'ordre de cette équation est déterminée par l'ordre du degré le plus élevé de la dérivation.

Les équations différentielles peuvent être classées en deux catégories : les équations différentielles avec des *conditions initiales* et les équations différentielles avec des *conditions aux limites*.

#### 3-3-1- Équations différentielles du second ordre

##### 3-3-1-1-Méthode d'Euler

Ces équations sont du type :

$$\begin{cases} \ddot{u}(t) + \alpha(t) \cdot \dot{u}(t) + b(t) \cdot u(t) = s(t) \\ \dot{u}(0) = \dot{u}_0 \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

où  $\alpha(t)$ ,  $b(t)$  et  $s(t)$  sont des constantes ou des fonctions de  $t$ .

$\dot{u}_0$  et  $u_0$  sont des conditions initiales.

Avant d'appliquer la méthode d'Euler par exemple, on peut rendre l'équation précédente à une équation du type 1er ordre. Dans ce cas, on pose.  $v(t) = \dot{u}(t)$

$$\text{D'où : } \begin{cases} \dot{v}(t) + \alpha(t) \cdot v(t) + b(t) \cdot u(t) = s(t) \\ v(0) = \dot{u}_0 \end{cases}$$

Les conditions initiales deviennent :

$$\begin{cases} \dot{u}(t) = \dot{v}_1(u, v) \\ \dot{v}(t) = \dot{v}_2(u, v) \end{cases}$$

$$\text{Ou } f(x) = \begin{cases} f_2(u, v, t) = -\alpha(t) - b(t).u(t) + s(t) \\ f_1(u, v, t) = v(t) \end{cases}$$

En faisant le calcul pas par pas, on obtient :

$$\text{- Pour } t = h \quad \begin{cases} v_1(t) = v_0 + hf_2(u_0, v_0, 0) = h.(-\alpha v_0 - bu_0 + s(0)) \\ u_1(t) = u_0 + hf_1(u_0, v_0, 0) = hv_0 \end{cases}$$

$$\text{- Pour } t = 2.h \quad \begin{cases} v_2(t) = v_1 + h.f_2(u_1, v_1, 0) = h.(-\alpha v_1 - bu_1 + s(h)) \\ u_2(t) = u_1 + hf_1(u_1, v_1, 0) = hv_1 \end{cases}$$

Ainsi, dans Matlab, le calcul pour chaque pas de temps peut être décrit par les matrices ci-dessous.

On définit au départ  $y$  et  $f$  par :

$$y = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \text{ et } f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} v \\ -\alpha.v - b.u + s \end{bmatrix}$$

ensuite, on écrit  $y' = f(y, t)$ , et on résout l'équation :  $y_{n+1} = y_n + h.f(y_n, t_n)$

### 3-3-1-2-Méthode de Runge-Kutta

#### 3-3-1-2-1-Méthode de Runge-Kutta du second ordre

$$\text{Elle est de la forme : } \begin{cases} \bar{y}_{i+1} = y_i + h.f(y_i, t_i) \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}f(y_i, t_i) + f(\bar{y}_{i+1} + y_{i+1}) \end{cases}$$

Ou bien sa forme standard peut être écrite ainsi :

$$\begin{cases} k_1 = h.f(y_i, t_i) \\ k_2 = h.f(y_i + k_1, t_{i+1}) \\ y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{cases}$$



***CHAPITRE 4***  
***Résultats et simulation***

### Exemples de résolution analytique de l'équation de Schrödinger dépendante du temps

Tout comme pour les problèmes indépendants du temps, très peu de problèmes dépendants du temps peuvent être résolus complètement de manière analytique. Néanmoins de telles résolutions sont quasi indispensables pour tester l'efficacité d'un algorithme qui résout l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Des cas bien différents seront traités (cas de l'énergie potentielle constante et celui de l'énergie potentielle dépendante de  $x$ ).

En réalité ce problème ne dépend pas explicitement du temps mais il est intéressant pour tester le comportement des différentes techniques de discrétisation spatiale pendant l'évolution.

#### 4-1- Etalement d'un paquet d'ondes gaussien

L'équation de Schrödinger d'une particule libre ( $V = 0$ ) à une dimension peut s'écrire :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) \quad (4.1)$$

D'après [11], la solution générale de cette équation peut être exprimée par une combinaison linéaire de ses solutions particulières qui sont les ondes planes définies par :

$$\psi(x,t) = A e^{i(kx - \omega(k)t)} \quad (4.2)$$

Où  $k$  et  $\omega$  sont liés par  $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ . Une telle solution, appelée paquet d'ondes, prend donc la forme suivante :

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (4.3)$$

Où  $g(k)$  est une fonction complexe arbitraire de carré sommable. Le paquet d'ondes est dit gaussien si  $g(k)$  est une fonction gaussienne centrée autour de  $k_0$  :

$$g(k) = e^{-\alpha^2(k-k_0)^2} \quad (4.4)$$

$\omega(k)$  Peut être transformé de la manière suivante :

$$\omega(k) = \frac{\hbar}{2m} (K_0^2 + 2k_0(k - k_0) + (k - k_0)^2) = \omega_0 + v(k - k_0) + \frac{\hbar}{2m} (k - k_0)^2$$

Où  $\omega_0 = \omega(k_0)$  et  $v = \frac{\hbar k_0}{m}$  (vitesse de groupe), ce qui permet, en posant  $\hat{k} = (k - k_0)$ , de réécrire (4.2) sous la forme :

$$\psi(x,t) = e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 \hat{k}^2} e^{i(x-vt)\hat{k}} e^{-i\frac{\hbar \hat{k}^2}{2m} t} d\hat{k} \quad (4.5)$$

L'argument de l'exponentiel peut être réécrit sous la forme

$$-\alpha^2 k^2 + i(x - vt) - i \frac{\hbar k^2}{2m} t = -\left(\alpha^2 + i \frac{\hbar t}{2m}\right) \left( k - i \frac{(x - vt)}{2\left(\alpha^2 + i \frac{\hbar t}{2m}\right)} \right)^2 - \frac{(x - vt)^2}{4\left(\alpha^2 + i \frac{\hbar t}{2m}\right)}$$

En utilisant la propriété suivante (valable pour tout  $\beta$  et pour  $\text{Re}\alpha > 0$ )

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha(k-\beta)^2} dk = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

On obtient la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  décrivant l'évolution du paquet d'ondes gaussien libre au cours du temps :

$$\psi(x, t) = e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2 + i \frac{\hbar t}{2m}}} \exp\left(\frac{(x - vt)^2}{4\left(\alpha^2 + i \frac{\hbar t}{2m}\right)}\right) \quad (4.6)$$

Son module au carré vaut

$$|\psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m}}} \exp\left(\frac{\alpha^2 (x - vt)^2}{2\left(\alpha^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m}\right)}\right) \quad (4.7)$$

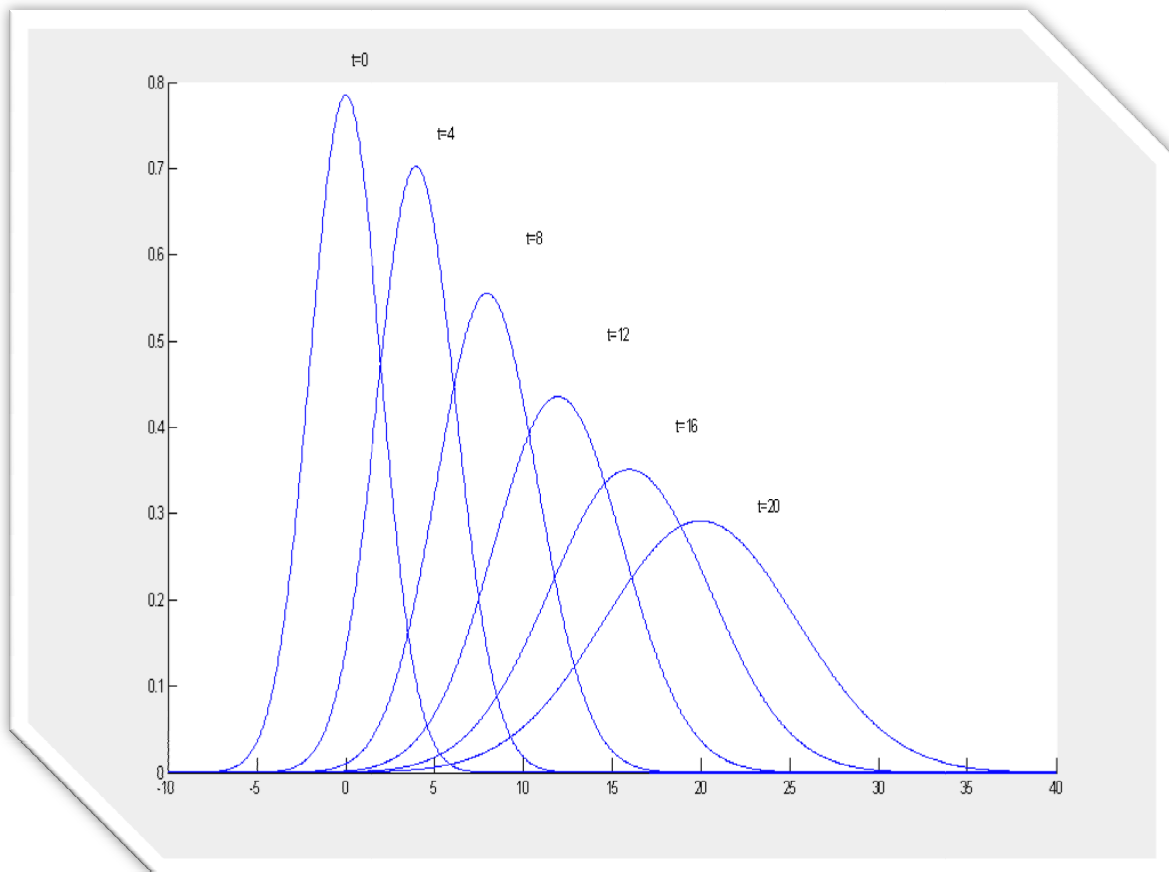
**4-2-Résultats :****4-2-1-Etalement d'un paquet d'ondes gaussien :**

Nous avons simulé à partir de l'équation de Schrödinger une condition initiale de type paquet

d'onde gaussien :  $\psi(x, t = 0) = e^{ik_0x} \cdot e^{-\beta^2(x-x_0)^2}$

**Les données :**

$\hbar = m = 1, \alpha = 2, k_0 = 1; w_0 = 0.5; x_0 = 1; v = 1$



**Figure 4.1 – Etalement d'un paquet d'ondes gaussien :  $|\psi(x, t)|^2$  en fonction de  $x$  pour différentes valeurs de  $t$  (unités arbitraires)**

On remarque que :

-Il y a un déplacement du paquet d'onde vers les  $x$  positives, cela se traduit par le terme  $(x - vt)$

-l'amplitude des pics diminue avec le temps  $\left( \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m}}} \right)$

-Il y a étalement (élargissement) de la largeur des pics  $2 \left( \alpha^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m} \right)$

### 4-2-2-Barrière de potentielle :

#### ➤ Cas ou $E < V_0$ : Effet Tunnel

Nous avons résolu numériquement l'équation différentielle du 2ème ordre

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \varphi = 0 \quad (4.8)$$

On pose  $\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$  et  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$

#### ➤ Région 1 : ( $x < 0$ )

La solution numérique trouvée est la somme de deux termes :

- une onde incidente ( $e^{ikx}$ )
- une onde réfléchie ( $e^{-ikx}$ )

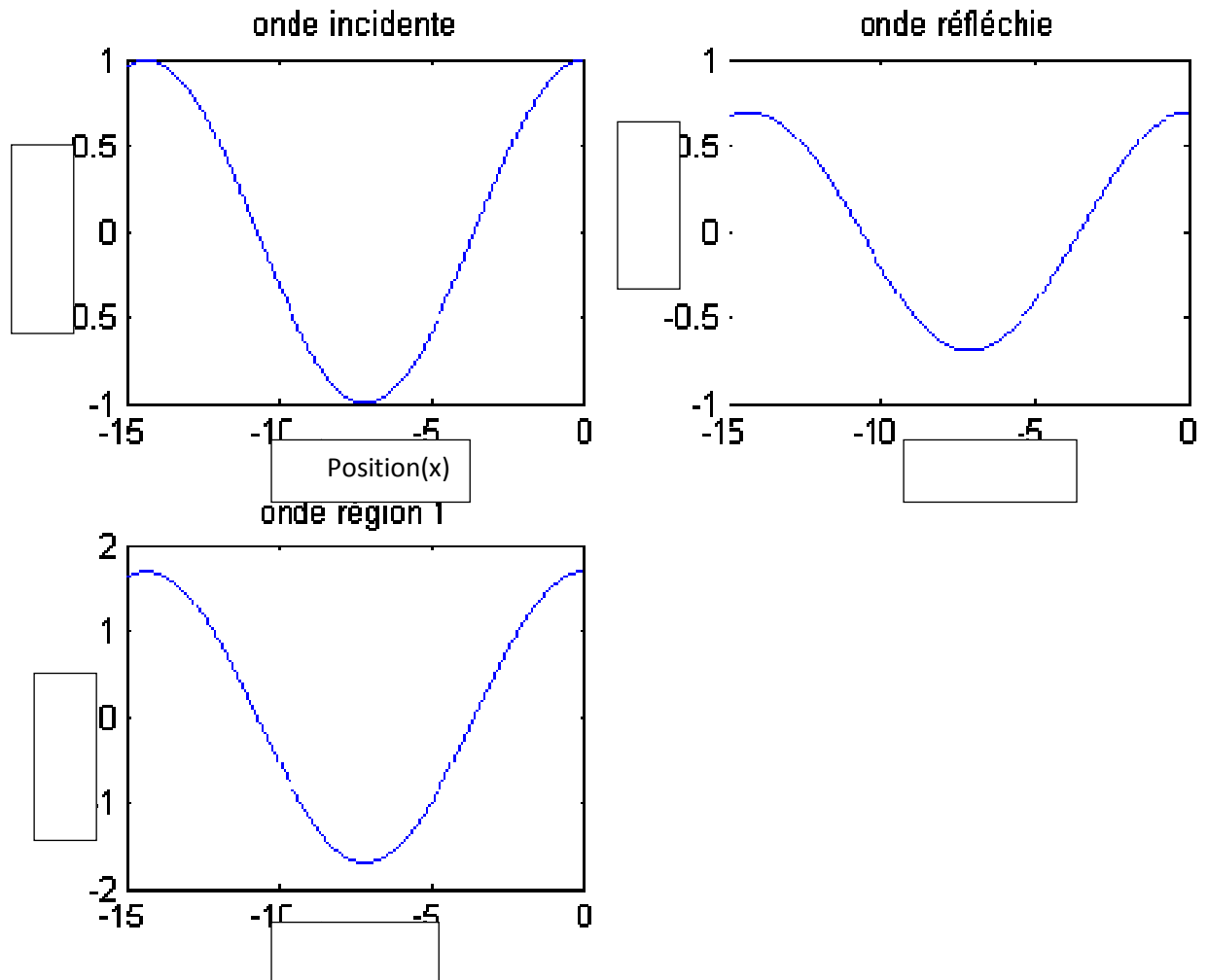


Figure 4.2.Représentation des ondes incidentes et réfléchies (unités arbitraires)

➤ Région 2 : ( $0 < x < L$ )

-l'énergie potentielle :  $V_0 = \text{constante}$

La solution numérique trouvée la somme de deux termes :

- onde évanescante ( $e^{-\rho_2 x}$ )

- onde ( $e^{\rho_2 x}$ )

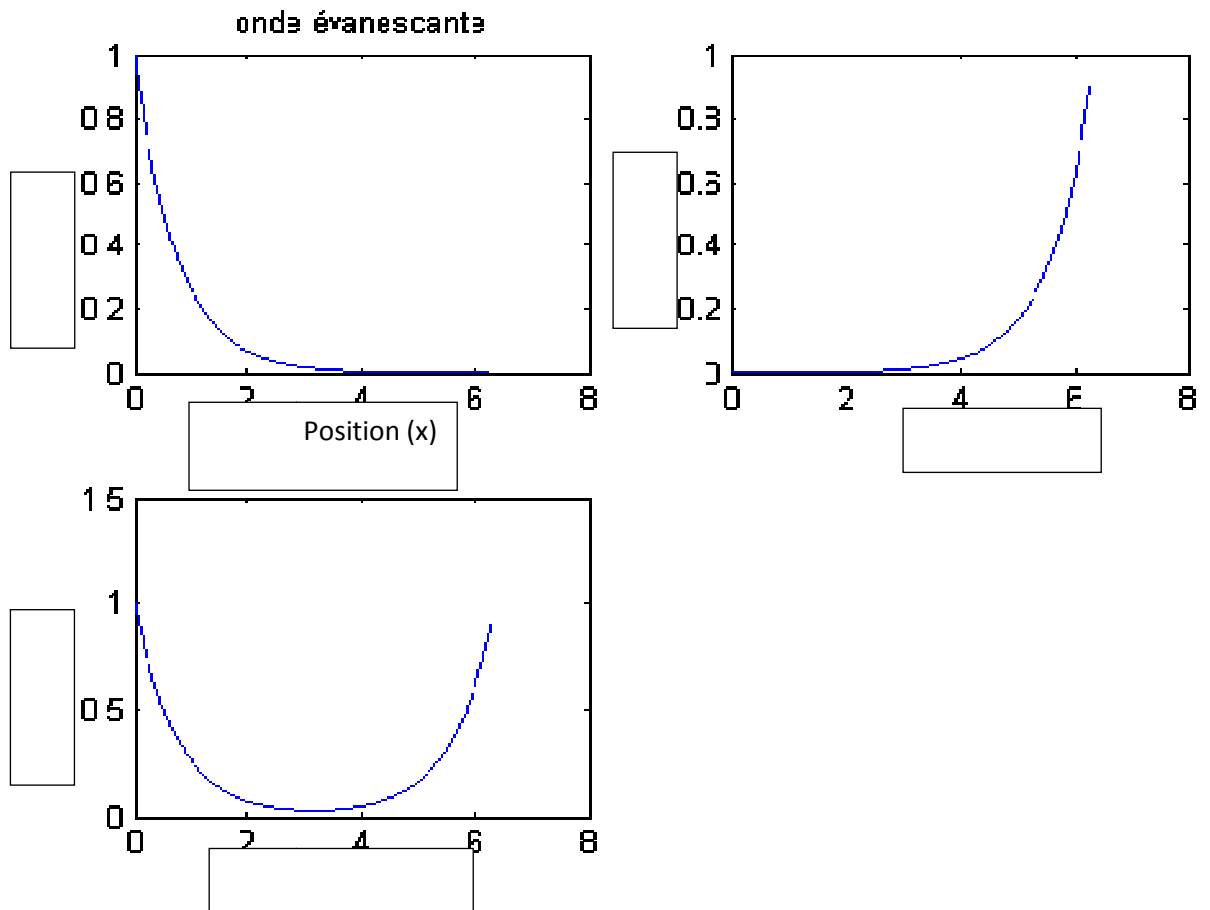


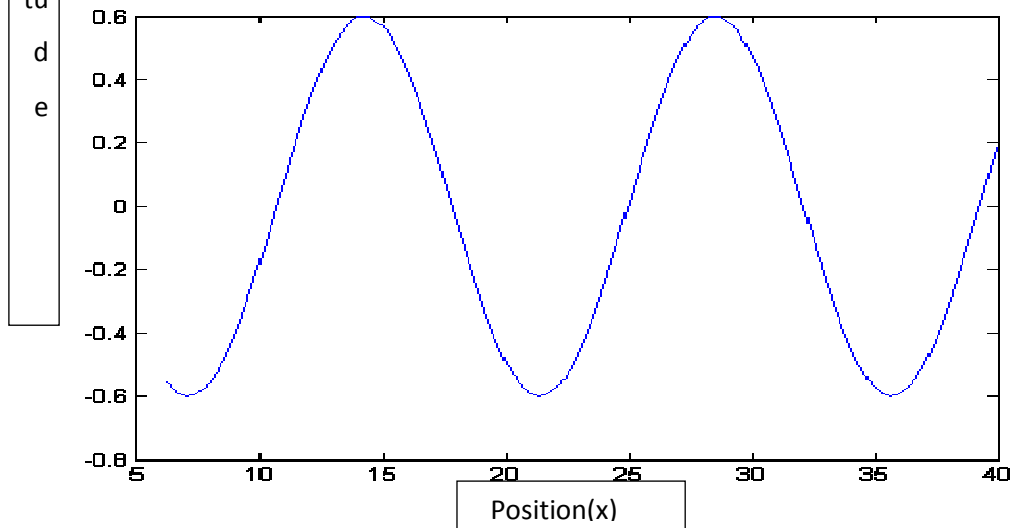
Figure 4.3. Représentation des 2 ondes (région 2) (unités arbitraires)

➤ **Région 3 : ( $x > L$ )**

Identique à la région 1.

-s m change les amplitudes.

-l' amplitude de l'onde réfléchie est prise nulle (l'onde n'existe pas).



*Figure 4.4. Représentation de l'onde transmise*

➤ Cas ou  $E > V_0$  : Transfert résonnant

Nous avons résolu numériquement l'équation différentielle du 2ème ordre

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \varphi = 0$$

On pose  $k^2_2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$  et  $k^2_1 = \frac{2m}{\hbar^2} E$

➤ Région 1 : ( $x < 0$ )

La solution numérique trouvée est la somme de deux termes :

- une onde incidente ( $e^{ik_1x}$ )
- une onde réfléchie ( $e^{-ik_1x}$ )

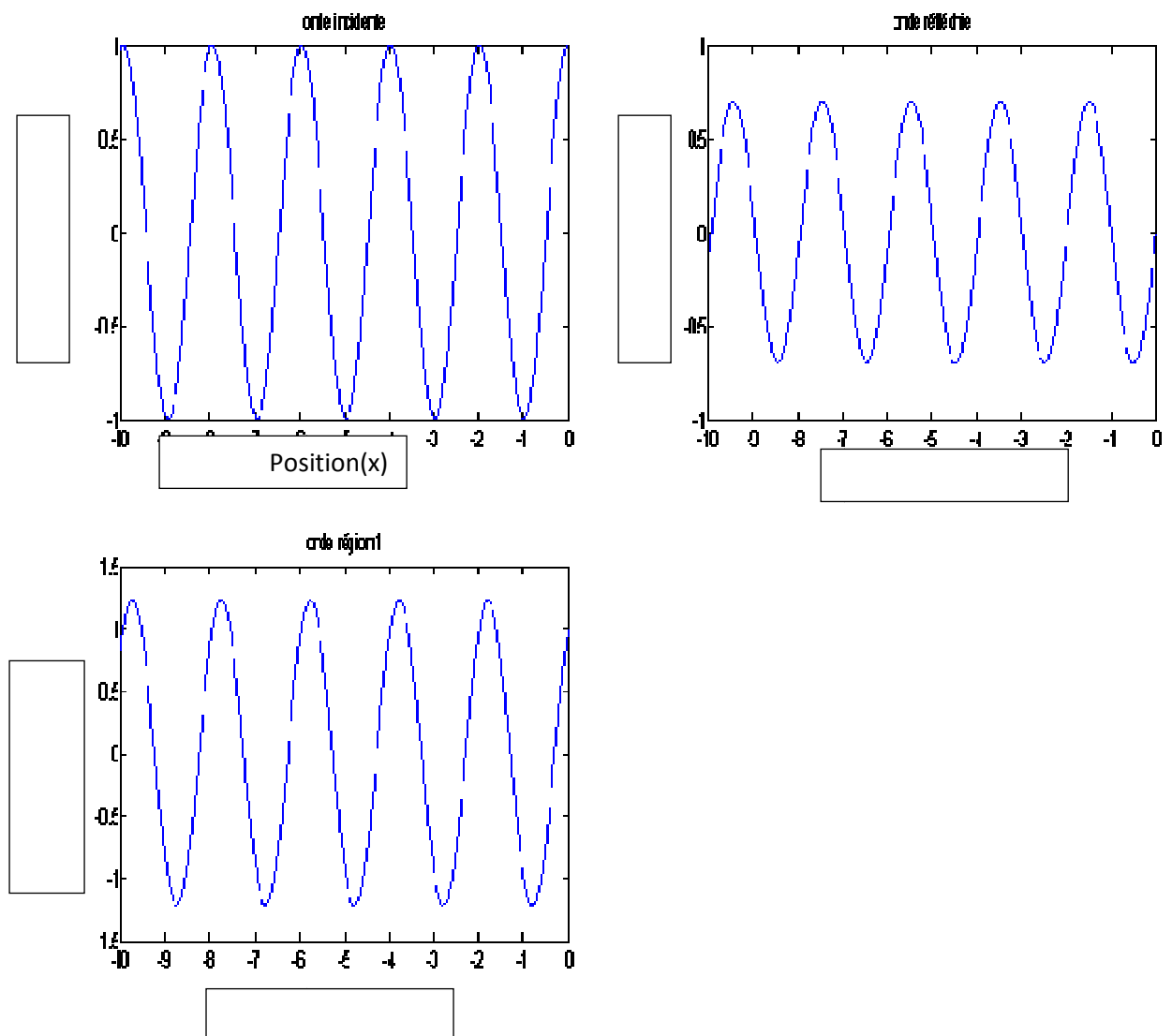


Figure 4.5. Représentation des ondes incidentes et réfléchies (unités arbitraires)



➤ Région 2 : ( $0 < x < L$ )

La solution numérique trouvée est la somme de deux termes :

- une onde incidente ( $e^{ik_2x}$ )
- une onde réfléchie ( $e^{-ik_2x}$ )

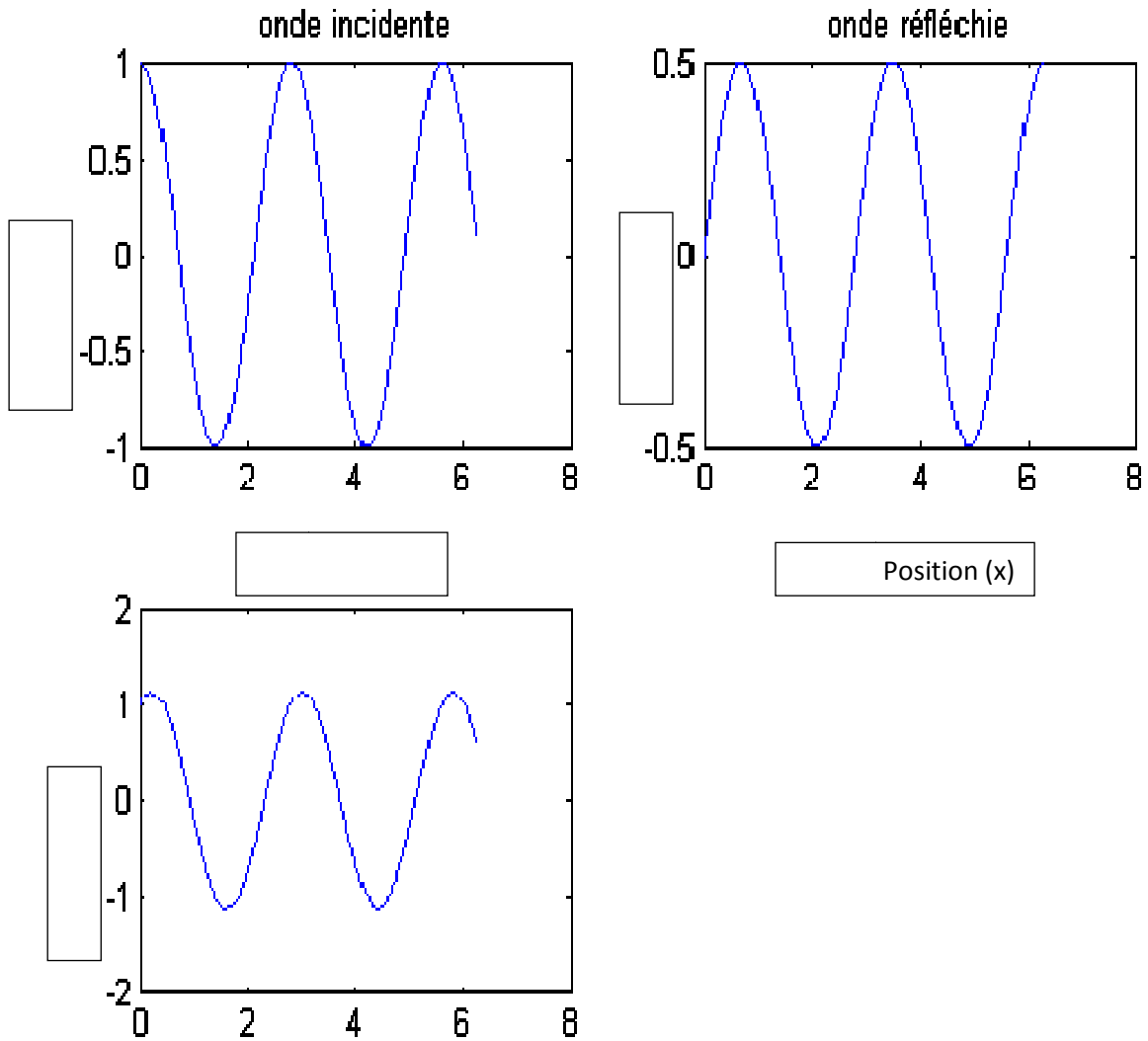


Figure 4.6. Représentation des ondes incidentes et réfléchies (unités arbitraires)

➤ Région 3 : ( $x > L$ )

Identique à la région 1.

-seule change les amplitudes.

-l'amplitude de l'onde réfléchie est prise nulle (l'onde n'existe pas)

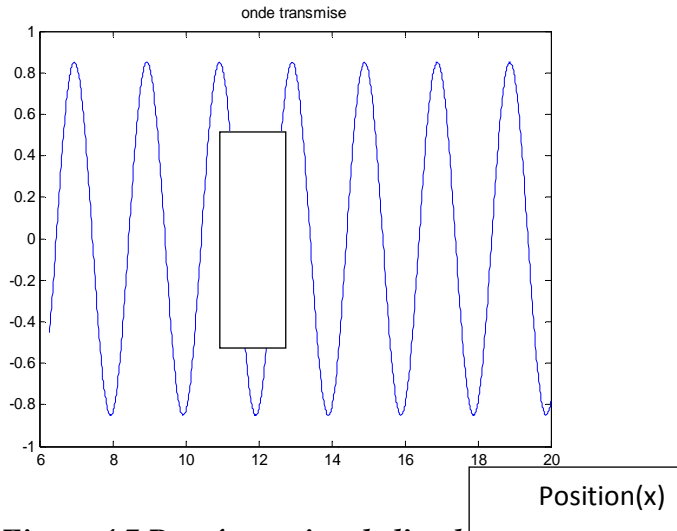


Figure 4.7.Représentation de l'onde transmise

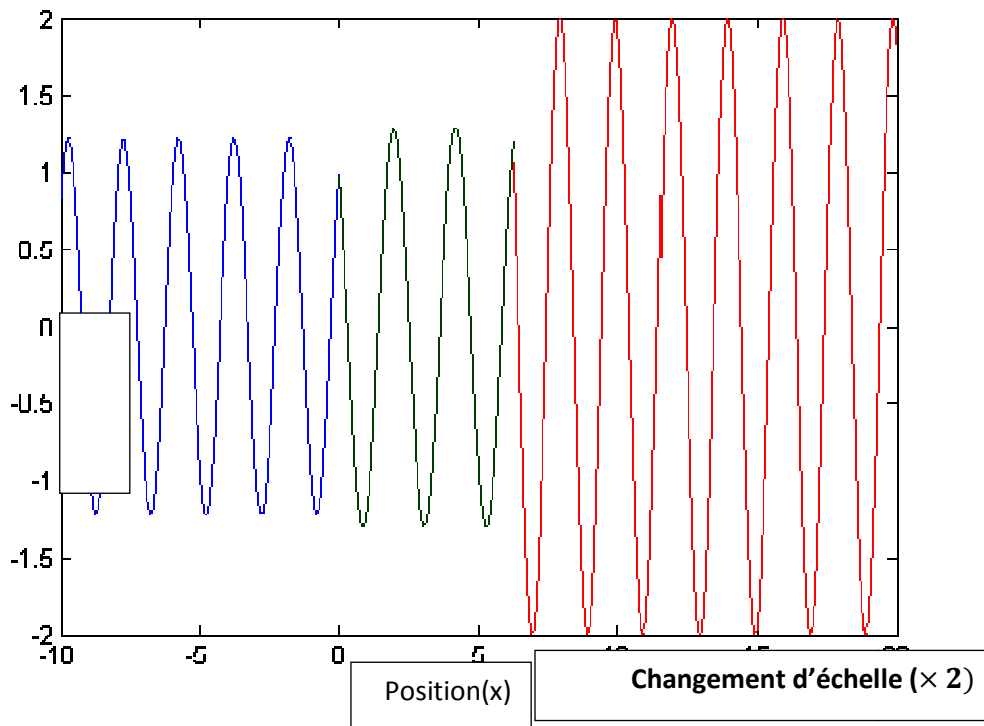


Figure 4.8.Représentation des ondes dans les 3 régions

**4-2-3-Puits de potentiel infini :**

On considère un puits de potentiel infini de largeur  $L$ , on suppose l'énergie potentielle nulle entre  $0 < x < L$

Nous avons résolu numériquement l'équation différentielle du 2<sup>ème</sup> ordre

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi = 0$$

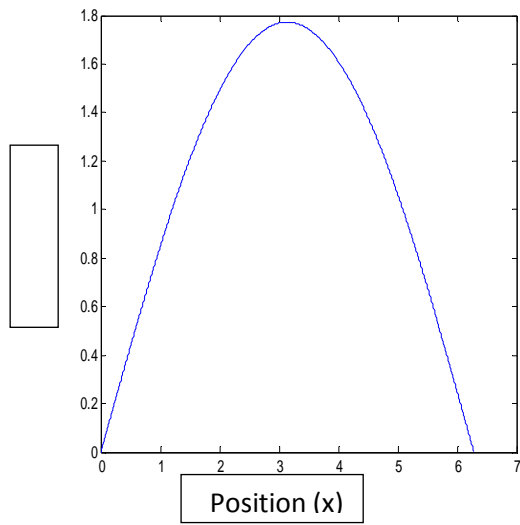
**On pose**  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$

Les conditions aux limites sont prises tel que :

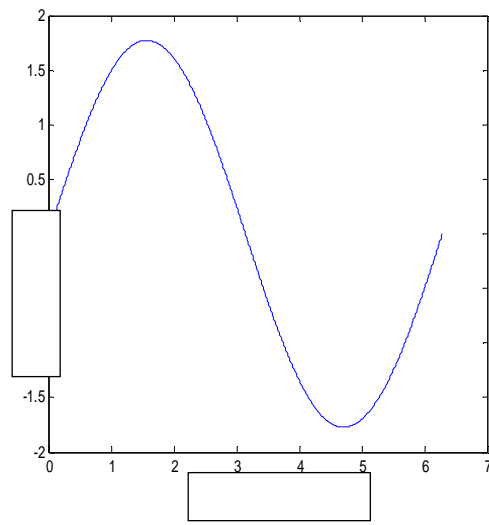
$$\varphi(x = 0) = 0 \text{ et } \varphi(x = L) = 0$$

Les énergies sont alors quantifiées  $E_n = \frac{n^2 \pi^2}{2L^2}$  ( $n=1, 2, 3, 4, \dots$ )

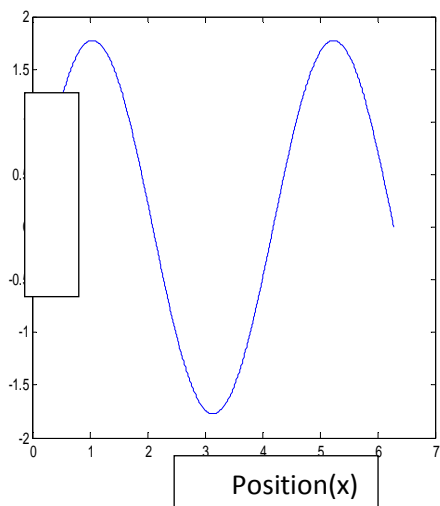
**n=1**



**n=2**



**n=3**



**n=4**

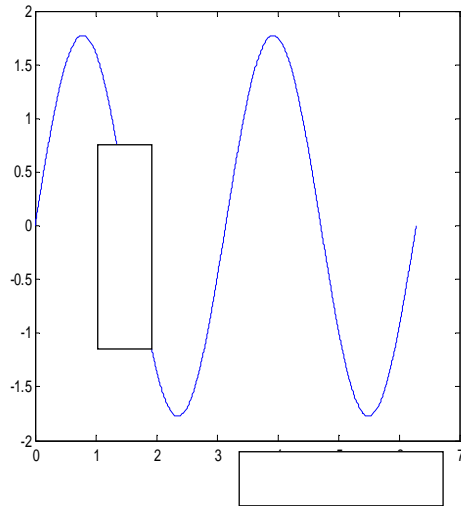


Figure 4.9. Représentation de la fonction d'onde pour différentes valeurs de n

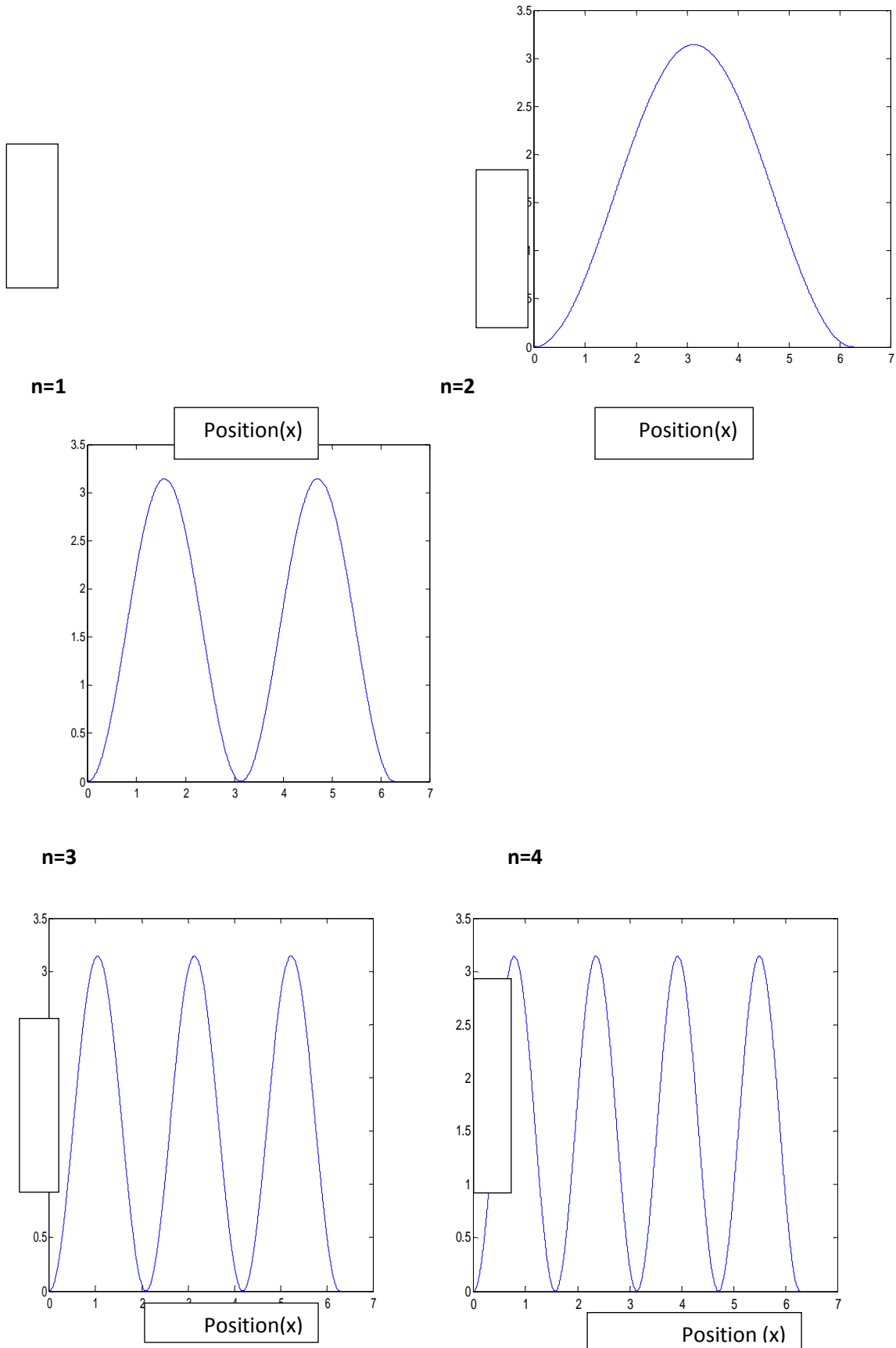


Figure 4.10. Représentation de la densité de probabilité  $|\varphi(r)|^2$  pour différentes valeurs de  $n$

# ***Références bibliographiques***

## Références bibliographies

---

- [1] M. Le Bellac, Physique quantique, 2e édition, Savoirs actuels, EDP Sciences/CNRS éditions (environ 45 Euros).
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B.Diu et F. Laloë, Mécanique quantique - Tomes 1 et 2, Edition Heramann (1973).
- [3] A. Messiah Mécanique quantique - Tomes 1 et 2, Editions Dunod (1965).
- [4] L. Landau et E. Lifchitz Mécanique quantique Editions Mir (1967).
- [5] J. L. Basdevant Mécanique quantique Editions Ellipses (1986).
- [6] J. M. Levy-Leblond et F. Balibar Quantique, Rudiments.
- [7] Mokhtari et all : Apprendre et Maîtriser MATLAB. Springer Verlag.
- [8] Nachaoui A. (Université de Nantes, France) : Formation MATLAB. Kénitra, 2001.
- [9] Kelly Black, Université du New Hampshire.  
(<http://www.math.unh.edu/~mathadm/tutorial/software/Matlab/>).
- [10] Eberhard A. (LMC, Grenoble France) : Formation MATLAB. Ecole sur Algèbre Linéaire et Application. FSR et INPT, Rabat, Septembre 1999.
- [11] D. Baye, Eléments de physique quantique et statistique, Presses Universitaires de Bruxelles, 1999.