Travaux pratiques de Méthodes numériques

THEODON Leo - DORLAND Paul, *compte rendu de projet informatique - L3PFA.*

Mercredi 21 décembre 2018

Le but de ce projet est d'étudier les propriétés de diffusion d'une particule quantique soumise à une énergie potentielle rectangulaire. La résolution de l'équation de Schrödinger sera effectuée à partir de deux méthodes. Un calcul direct analytique d'une part, et un calcul matriciel faisant appel aux fonctions de *Green* d'autre part.

1 Propriétés quantiques d'une particule soumise à une énergie potentielle rectangulaire

Dans toute la suite, on va considérer une particule de masse m soumise à une énergie potentielle $V(x)$. L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit $H\varphi = E\varphi$ où φ est la fonction d'onde décrivant l'état quantique de la particule à l'état stationnaire d'énergie E. Pour un problème à une dimension, l'Hamiltonien s'écrit :

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

Nous allons étudier le comportement de φ sous l'effet d'une marche de potentiel. On rappelle que φ est de classe C_1, ce qui impose la continuité de φ et de φ' en tout point de l'espace.

1.1 Barrière rectangulaire

Soit l'énergie potentielle de portée a telle que :

$$\begin{cases} V(x) = V_0, & \text{si } |x| < a/2, \\ V(x) = 0, & \text{sinon,} \end{cases} \tag{2}$$

avec $V_0 > 0$. Elle sépare l'espace en trois régions que l'on note :

$$\begin{cases} I: & x < -a/2, \\ II: & -a/2 < x < a/2, \\ III: & x > a/2. \end{cases} \tag{3}$$

Expression de la fonction d'onde et conditions de continuité :
La fonction d'onde φ décrit l'état quantique de la particule dans les trois régions de l'espace. Elle s'écrit donc :

$$\begin{cases} \varphi_I(x) & = A_- e^{-i\rho x} + A_+ e^{i\rho x}, \\ \varphi_{II}(x) & = B_- e^{-ikx} + B_+ e^{ikx}, \\ \varphi_{III}(x) & = C_+ e^{i\rho x}, \end{cases} \tag{4}$$

avec :

$$\rho = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \tag{5}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}. \tag{6}$$

On aura supposé que la particule venait des x négatifs et que l'on a $E > V_0$.

Conditions de continuité :
Comme la fonction φ est de classe C_1 sur son ensemble de définition, elle l'est en particulier au passage des trois régions (I, II et III). Il vient alors :

$$\begin{cases} \varphi_I(-a/2) & = \varphi_{II}(-a/2), \\ \varphi'_I(-a/2) & = \varphi'_{II}(-a/2), \\ \varphi_{II}(a/2) & = \varphi_{III}(a/2), \\ \varphi'_{II}(a/2) & = \varphi'_{III}(a/2). \end{cases}$$

On en déduit que

$$A_- e^{i\rho a/2} + A_+ e^{-i\rho a/2} = B_- e^{ika/2} + B_+ e^{-ika/2} \tag{7}$$

d'une part, et

$$B_- e^{-ika/2} + B_+ e^{ika/2} = C_+ e^{i\rho a/2} \tag{8}$$

d'autre part en ce qui concerne la continuité de φ. On peut également écrire

$$-i\rho A_- e^{i\rho a/2} + i\rho A_+ e^{-i\rho a/2} = -ikB_- e^{ika/2} + ikB_+ e^{-ika/2} \tag{9}$$

et enfin

$$-ikB_- e^{-ika/2} + ikB_+ e^{ika/2} = i\rho C_+ e^{i\rho a/2} \tag{10}$$

pour ce qui est de la continuité de φ'.

Les équations (7), (8), (9) et (10) forment un système dont la solution peut s'exprimer de la façon suivante :

$$\frac{A_-}{A_+} = ie^{-i\rho a}\frac{(k^2-\rho^2)\sin(ka)}{2\rho k\cos(ka) - i(\rho^2+k^2)\sin(ka)}, \tag{11}$$

$$\frac{B_+}{A_+} = \rho(\rho+k)e^{-i\frac{a}{2}(k+\rho)}\frac{1}{2\rho k\cos(ka) - i(\rho^2+k^2)\sin(ka)}, \tag{12}$$

$$\frac{B_-}{A_+} = \rho(\rho-k)e^{i\frac{a}{2}(k-\rho)}\frac{1}{-2\rho k\cos(ka) + i(\rho^2+k^2)\sin(ka)}, \tag{13}$$

$$\frac{C_+}{A_+} = 2\rho k e^{-i\rho a}\frac{2\rho k\cos(ka) + i(\rho^2+k^2)\sin(ka)}{4\rho^2k^2\cos^2(ka) + (\rho^2+k^2)^2\sin^2(ka)}. \tag{14}$$

Il convient alors de calculer les coefficients de réflexion $\mathcal{R} = |A_-/A_+|^2$ et de transmission $\mathcal{T} = |C_+/A_+|^2 \equiv 1 - \mathcal{R}$.

$$\begin{aligned}
\left|\frac{A_-}{A_+}\right|^2 &= \left|ie^{-i\rho a}\frac{(k^2-\rho^2)\sin(ka)}{2\rho k\cos(ka) - i(\rho^2+k^2)\sin(ka)}\right|^2 \\
&= \frac{(k^2-\rho^2)^2\sin^2(ka)}{|2\rho k\cos(ka) - i(\rho^2+k^2)\sin(ka)|^2} \\
&= \frac{(k^2-\rho^2)^2\sin^2(ka)}{(2\rho k)^2\cos^2(ka) + (\rho^2+k^2)^2\sin^2(ka)} \\
&= \frac{\left(\frac{k^2-\rho^2}{2\rho k}\right)^2\sin^2(ka)}{\cos^2(ka) + \left(\frac{k^2+\rho^2}{2\rho k}\right)^2\sin^2(ka)} \\
&= \frac{\left(\frac{k^2-\rho^2}{2\rho k}\right)^2\sin^2(ka)}{1 - \sin^2(ka) + \left(\frac{k^2+\rho^2}{2\rho k}\right)^2\sin^2(ka)} \\
&= \frac{\left(\frac{k^2-\rho^2}{2\rho k}\right)^2\sin^2(ka)}{1 - \left(\frac{2\rho k}{2\rho k}\right)^2\sin^2(ka) + \left(\frac{k^2+\rho^2}{2\rho k}\right)^2\sin^2(ka)} \\
&= \frac{\left(\frac{k^2-\rho^2}{2\rho k}\right)^2\sin^2(ka)}{1 - \frac{4(\rho k)^2}{(2\rho k)^2}\sin^2(ka) + \frac{k^4+2(\rho k)^2+\rho^4}{(2\rho k)^2}\sin^2(ka)} \\
&= \frac{\left(\frac{k^2-\rho^2}{2\rho k}\right)^2\sin^2(ka)}{1 + \frac{k^4-2(\rho k)^2+\rho^4}{(2\rho k)^2}\sin^2(ka)} \\
&= \frac{\left(\frac{k^2-\rho^2}{2\rho k}\right)^2\sin^2(ka)}{1 + \left(\frac{k^2-\rho^2}{2\rho k}\right)^2\sin^2(ka)}
\end{aligned}$$

On en déduit immédiatement l'expression suivante de $\mathcal{R}$:

$$\mathcal{R} = \frac{\left(\frac{\rho^2-k^2}{2\rho k}\right)^2 \sin^2(ka)}{1+\left(\frac{\rho^2-k^2}{2\rho k}\right)^2 \sin^2(ka)}. \tag{15}$$

De la même manière, on a pour le coefficient de transmission :

$$\begin{aligned}
\left|\frac{C_+}{A_+}\right|^2 &= \left|2\rho k e^{-i\rho a}\frac{2\rho k\cos(ka)+i(\rho^2+k^2)\sin(ka)}{4\rho^2k^2\cos^2(ka)+(\rho^2+k^2)^2\sin^2(ka)}\right|^2 \\
&= (2\rho k)^2\frac{4\rho^2k^2\cos^2(ka)+(\rho^2+k^2)^2\sin^2(ka)}{(4\rho^2k^2\cos^2(ka)+(\rho^2+k^2)^2\sin^2(ka))^2} \\
&= (2\rho k)^2\frac{1}{4\rho^2k^2\cos^2(ka)+(\rho^2+k^2)^2\sin^2(ka)} \\
&= (2\rho k)^2\frac{1}{4\rho^2k^2(1-\sin^2(ka))+(\rho^2+k^2)^2\sin^2(ka)} \\
&= (2\rho k)^2\frac{1}{(2\rho k)^2+(\rho^2-k^2)^2\sin^2(ka)} \\
&= \frac{1}{1+\left(\frac{k^2-\rho^2}{2\rho k}\right)^2\sin^2(ka)}
\end{aligned}$$

On obtient alors l'expression du coefficient de $\mathcal{T}$:

$$\mathcal{T} = \frac{1}{1+\left(\frac{\rho^2-k^2}{2\rho k}\right)^2\sin^2(ka)} = 1-\mathcal{R}. \tag{16}$$

Étude pour $E < V_0$: Effet tunnel

Dans ce cas, il nous faut reprendre l'expression de $\varphi_{II}(x)$. En effet, dans ce cas, on ne peut plus considérer la quantité $\sqrt{E-V_0}$ sans prendre de précautions. On pose alors :

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)}. \tag{17}$$

Il vient alors immédiatement que $k = -i\alpha$. On rappelle également que $\sin(ix) = i\sinh(x), \forall x \in \mathbb{R}$. Ainsi, on peut donner la nouvelle expression des coefficients $\mathcal{R}$ et $\mathcal{T}$ en fonction de α :

$$\mathcal{R}_\alpha = \frac{\left(\frac{\rho^2+\alpha^2}{2\rho\alpha}\right)^2\sinh^2(\alpha a)}{1+\left(\frac{\rho^2+\alpha^2}{2\rho\alpha}\right)^2\sinh^2(\alpha a)} \tag{18}$$

$$\mathcal{T}_\alpha = \frac{1}{1+\left(\frac{\rho^2+\alpha^2}{2\rho\alpha}\right)^2\sinh^2(\alpha a)} \tag{19}$$

1.2 Applications

1.2.1 Coefficients $\mathcal{R}$ et $\mathcal{T}$

On suppose que la particule est un électron soumis à l'énergie potentielle de portée $a = 1\mathring{A}$ et d'amplitude $V_0 = 2$ eV. Nous allons utiliser le programme **Octave** afin de modéliser cette situation. Nous calculerons les différentes valeurs de coefficients $\mathcal{R}$ et $\mathcal{T}$ et nous les tracerons en fonction de l'énergie E de la particule (Fig. 1).

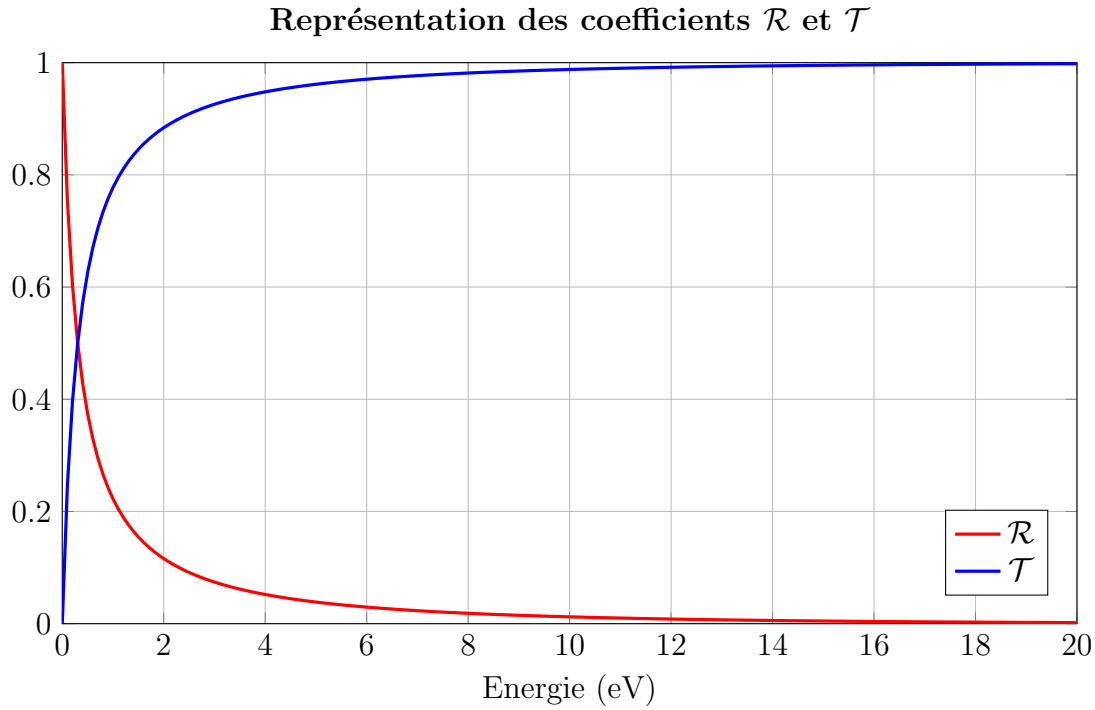

Figure 1 – *Évolution des coefficients $\mathcal{R}$ et $\mathcal{T}$ pour une particule traversant une marche de potentielle de portée $1\mathring{A}$ et d'amplitude $2eV$.*

Notre programme se décompose de la façon suivante :

1. On définit les constantes et les fonctions de base que nous utiliserons de manière globale.

```
%Constantes
me = 9.10955*10^(-31);
eV = 1.6021895*10^(-19);
hb = 1.0545896*10^(-34);
mp = 1.672651*10^(-27);
a = 1*10^(-10);

%Fonctions de base
function [p] = rho(E,m,hb)
  p = sqrt((2*m*E)/hb^2);
endfunction

function [k] = kha(E,m,hb,V)
  k = sqrt((2*m*(E-V))/hb^2);
endfunction

function [a] = alph(E,m,hb,V)
  a = sqrt((2*m*(V-E))/hb^2);
endfunction
```

2. On code les fonctions permettant de calculer les coefficients $\mathcal{R}$ et $\mathcal{T}$ selon le signe de $E - V_0$.

```
function [r] =
        Refc(E,m,hb,V,a)
  im = sqrt(-1);
  if(E == 0)
    r = 1;
  elseif(E == V)
    p = rho(E,m,hb);
    r = p*p*a*a/4;
    r = r/(1+r);
  else
    p = rho(E,m,hb);
    k = alph(E,m,hb,V);
    r = (p^2-(im*k)^2)/
        (2*p*(im*k));
    r = r*r;
    r = (r*(im*sinh(k*a))^2)/
        (1+r*(im*sinh(k*a))^2);
  endif
endfunction
```

```
function [t] =
        Tranc(E,m,hb,V,a)
  im = sqrt(-1);
  if(E == 0)
    t = 0;
  elseif(E == V)
    p = rho(E,m,hb);
    t = p*p*a*a/4;
    t = 1/(1+t);
  else
    p = rho(E,m,hb);
    k = alph(E,m,hb,V);
    t = (p^2-(im*k)^2)/
        (2*p*(im*k));
    t = t*t;
    t = 1/(1+t*(im*sinh(k*a))^2);
  endif
endfunction
```

On peut remarquer ici plusieurs points intéressants.

a) Il n'est pas nécessaire de coder les fonctions pour le cas complexe étant donné qu'**Octave** gère les calculs avec les nombres complexes.

b) La fonction $Tranc$ n'a pas forcément lieu d'être étant donné que $\mathcal{T}$ peut être calculé de manière bien plus efficace par la relation $\mathcal{T} = 1 - \mathcal{R}$, connaissant $\mathcal{R}$.

c) De plus, on gère les cas où l'on a affaire à une forme indéterminée avec des divisions par zéro (cas $E = 0$ ou $E = V_0$), d'où les blocs conditionnels dans le code. On aura bien entendu calculé au préalable la valeur du prolongement par continuité de la fonction φ.

3. Enfin, les valeurs des coefficients $\mathcal{R}$ et $\mathcal{T}$ sont calculées pour des énergies allant de 0 eV à 20 eV et rangées dans des vecteurs afin d'être affichées (Fig. 1). On notera que les courbes sont cohérentes à la fois avec la théorie et avec l'intuition. Quand l'énergie augmente, $\mathcal{R}$ tend vers 0 et $\mathcal{T}$ tend vers 1.

Remarque : *On notera le cas particulier, avec les valeurs numériques choisies ($V_0 = 2$ eV, $a = 1\mathring{A}$ pour un électron), où les coefficients de réflexion et de transmission sont égaux : $\mathcal{R} = \mathcal{T}$. La particule a autant de chance de passer la barrière de potentiel que d'être réfléchie si son énergie est $E = 0,3$ eV.*

1.2.2 Tracé de $|\varphi(x)|^2$ et calcul de probabilité

En choisissant $A_+ = 1$ et en considérant les relations de l'équation (4), on peut tracer $|\varphi(x)|^2$ en fonction de x en découpant de la fonction φ sur les trois régions de l'espace préalablement mentionnées. Le script **Octave** est relativement simple. On range les valeurs de $\varphi(x)$ dans un vecteur, calculées à l'aide des fonctions *rho* et *kha* précédentes et de fonctions AA, BA et CA permettant d'obtenir les coefficients des relations (11), (12), (13) et (14).

```
function [aa] = AA(E,m,hb,V,a)
  p = rho(E,m,hb);
  k = kha(E,m,hb,V);
  aa = i*exp(-i*p*a);
  aa = aa * (k*k - p*p)
  * sin(k*a);
  den = 2*p*k*cos(k*a)
  - i*(p*p + k*k)*sin(k*a);
  aa = aa/den;
endfunction
```

```
function [ba] = BA(E,m,hb,V,a,ind)
  p = rho(E,m,hb);
  k = kha(E,m,hb,V);
  ba = ind*p*(p+ind*k)
  * exp(-ind*i*a*(k+ind*p)/2);
  den = 2*p*k*cos(k*a)
  -i*(p*p+k*k)*sin(k*a);
  ba = ba/den;
endfunction
```

Remarque : *La fonction* BA *permet de calculer les coefficients* B_+/A_+ *et* B_-/A_+ *en fonction du paramètre* ind *qui peut valoir* $+1$ *ou* -1.

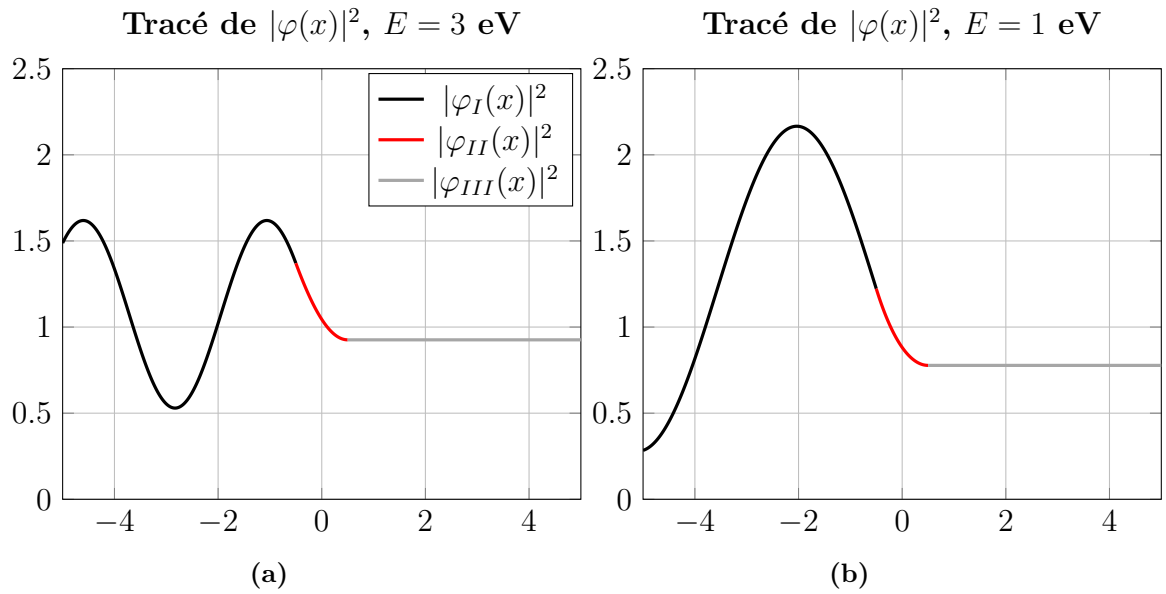

Figure 2 – *Tracé de* $|\varphi(x)|^2$ *en fonction de la position* x *(Å) pour un électron d'énergie* $E = 1eV$ *(2b) et* $E = 3eV$ *(2a) soumis à un potentiel* $V_0 = 2eV$ *dans la région* II *de largeur* $1\mathring{A}$.

On peut constater (Fig. 2) que la probabilité de passer la marche de potentiel est plus grande lorsque l'énergie de l'électron est plus élevée. En effet, la probabilité de passer la marche est égale à la probabilité de se trouver dans la zone III, c'est-à-dire égale à $|\varphi_{III}(x)|^2$. Pour $E = 3$ eV, elle est de $92,6\%$ et pour $E = 1$ eV, elle est d'environ $77,7\%$.

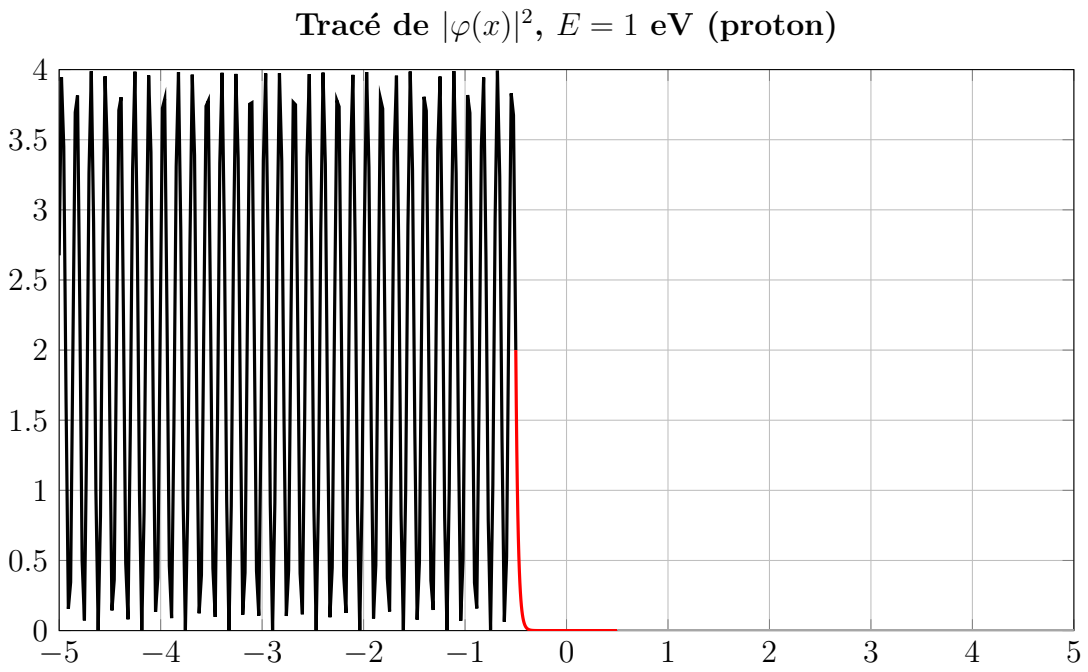

Figure 3 – *Tracé de $|\varphi(x)|^2$ en fonction de la position x (Å) pour un proton d'énergie $E = 1eV$ soumis à un potentiel $V_0 = 2eV$ dans la région II de largeur $1\mathring{A}$.*

Enfin, on peut effectuer les mêmes calculs pour un proton (seule la masse de la particule varie dans notre modèle) d'énergie 1 eV afin de comparer la probabilité de passage par effet tunnel (Fig. 3). Cette fois, la probabilité pour le proton de se trouver dans la zone III est de l'ordre de $3,4.10^{-17}\%$, soit pratiquement nulle.

Particule	Énergie (eV)	Probabilité de passage (zone III)
Électron	3 eV	$92,6\%$
Électron	1 eV	$77,7\%$
Proton	1 eV	$3,4.10^{-17}\%$

Remarque : *On peut remarquer que, comme prévu, plus l'énergie augmente, plus il est probable que la particule puisse passer dans la zone III, ce qui est en accord avec les courbes des coefficients $\mathcal{R}$ et $\mathcal{T}$. De plus, pour une particule massive comme un proton, il est pratiquement impossible de passer une telle barrière de potentiel avec une énergie si faible.*

2 Fonctions d'onde diffusées par un potentiel quelconque par la méthode des fonctions de Green

2.1 Équation de Lippmann-Schwinger

On considère l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x). \tag{20}$$

On note φ^o la solution de l'équation (20) pour $V(x) = 0$ et on pose

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ et } U(x) = \frac{2m}{\hbar^2}V(x), \tag{21}$$

ainsi que $G(x, x')$ la fonction de *GREEN* vérifiant :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}G(x, x') + k^2 G(x, x') = \delta(x - x'). \tag{22}$$

On peut remarquer, en notant $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, que l'équation (20) peut s'écrire sous la forme

$$(\Delta + k^2)\varphi(x) = U(x)\varphi(x) \tag{23}$$

avec en particulier $(\Delta + k^2)\varphi^o(x) = 0$, par définition de φ^o, et aussi que l'équation (22) peut se mettre sous la forme :

$$(\Delta + k^2)G(x, x') = \delta(x - x'). \tag{24}$$

on peut alors écrire à partir de l'équation (23) et par définition de la fonction de *Dirac* que

$$\begin{aligned}
(\Delta + k^2)\varphi(x) &= U(x)\varphi(x) \\
&= 0 + \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\delta(x - x')U(x')\varphi(x') \\
&= (\Delta + k^2)\varphi^o(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx'(\Delta + k^2)G(x, x')U(x')\varphi(x') \\
(\Delta + k^2)\varphi(x) &= (\Delta + k^2)\left(\varphi^o(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx'G(x, x')U(x')\varphi(x')\right)
\end{aligned}$$

c'est-à-dire que

$$\varphi(x) = \varphi^o(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx'G(x, x')U(x')\varphi(x'), \forall x. \tag{25}$$

On peut à présent chercher une expression pour la fonction de *Green* ainsi définie par la relation(22).

On a :

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2}G(x,x') + k^2 G(x,x') &= \delta(x-x') \\ -w^2\widehat{G}(w) + k^2\widehat{G}(w) &= e^{-iwx'} \\ \widehat{G}(w) &= -\frac{e^{-iwx'}}{w^2-k^2}\end{aligned} \tag{26}$$

Ainsi, on a (pour $x - x' > 0$) :

$$\begin{aligned}G(x,x') &= -\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{iw(x-x')}}{(w-k)(w+k)}dw \\ &= -\frac{i\pi}{2\pi}\left(\frac{e^{ik(x-x')}}{2k} + \frac{e^{-ik(x-x')}}{-2k}\right) \\ &= \frac{\sin(k(x-x'))}{2k}\end{aligned} \tag{27}$$

Ainsi, on a (après changement de variable pour le cas $x - x' < 0$) :

$$G(x,x') = \frac{\sin(k|x-x'|)}{2k}, \forall x \in \mathbb{R} \tag{28}$$

Néanmoins, cette solution n'est que partielle. En effet, on peut remarquer que dans la relation (26), on a :

$$\widehat{G}(w) = -\frac{e^{-iwx'}}{w^2-k^2} = \frac{e^{-iwx'}}{k^2+(iw)^2}. \tag{29}$$

Or, on sait que

$$e^{-\alpha|x|} = F_x^{-1}\left(\frac{2\alpha}{\alpha^2+w^2}\right) \tag{30}$$

où F^{-1} est la TF inverse. Ainsi, on a

$$G(x,x') = F_x^{-1}\left(\frac{e^{-iwx'}}{k^2+(iw)^2}\right) = F_{x-x'}^{-1}\left(\frac{1}{k^2+(iw)^2}\right) = F_{x'-x}^{-1}\left(\frac{1}{(ik)^2+w^2}\right) \tag{31}$$

et donc

$$G(x,x') = \frac{e^{-ik|x-x'|}}{2ik}. \tag{32}$$

En choisissant une fonction d'onde φ^o évoluant selon les x croissants, on en déduit l'équation de *LIPPMAN-SCHWINGER* :

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \frac{e^{-ik|x-x'|}}{2ik}U(x')\varphi(x') \tag{33}$$

où A est une constante de normalisation.

2.2 Discrétisation de l'espace

2.2.1 Forme matricielle

A partir de l'équation de *LIPPMAN-SCHWINGER* (33), en discrétisant l'espace avec un pas constant Δx par un ensemble $\{x_j; j = 1, N\}$ où le potentiel $V(x)$ s'annule aux bords, et en posant donc $V(x_0) = V(x_{N+1}) = 0$, on peut écrire, en utilisation la méthode des trapèzes que :

$$\begin{aligned}
\varphi(x) &= \varphi^o(x) + \sum_{j=0}^{N} \int_{x_j}^{x_{j+1}} dx' G(x, x') U(x') \varphi(x') \\
&= \varphi^o(x) + \sum_{j=0}^{N} \frac{\Delta x}{2} \left(G(x, x_j) U(x_j) \varphi(x_j) + G(x, x_{j+1}) U(x_{j+1}) \varphi(x_{j+1}) \right) \\
&= \varphi^o(x) + \sum_{j=1}^{N} \Delta x \left(G(x, x_j) U(x_j) \varphi(x_j) \right)
\end{aligned}$$

et ainsi, si l'on pose

$$\overrightarrow{\varphi} = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_N \end{pmatrix}, \quad \overrightarrow{\varphi^b} = \begin{pmatrix} \varphi_1^o \\ \vdots \\ \varphi_N^o \end{pmatrix}, \quad \text{avec} \quad \varphi_j = \varphi(x_j) \quad \text{et} \quad \varphi_j^o = \varphi(x_j^o);$$

$$\mathcal{G} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{11} & \dots & \mathcal{G}_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{G}_{N1} & \dots & \mathcal{G}_{NN} \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \mathcal{G}_{ij} = \frac{e^{-ik|x_i - x_j|}}{2ik};$$

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} \mathcal{U}_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \mathcal{U}_{NN} \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \mathcal{U}_{ij} = U(x_i)\delta_{ij},$$

alors on peut écrire

$$\overrightarrow{\varphi} = \overrightarrow{\varphi^b} + \Delta x \mathcal{G}\mathcal{U}\overrightarrow{\varphi}. \tag{34}$$

Il vient alors immédiatement que

$$\overrightarrow{\varphi} = (I_N - \Delta x \mathcal{G}\mathcal{U})^{-1} \overrightarrow{\varphi^b}. \tag{35}$$

2.2.2 Simplification

On sépare les régions de l'espace où $U(x) = 0$ (région A) et $U(x) \neq 0$ (région B) :

$$\{x_{A_j}; j = 1, N_A(\Delta x_A); U(x_{A_j}) = 0\}, \quad \{x_{B_j}; j = 1, N_B(\Delta x_B); U(x_{B_j}) \neq 0\} \tag{36}$$

On note

$$\mathcal{G} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{AA} & \mathcal{G}_{AB} \\ \mathcal{G}_{BA} & \mathcal{G}_{BB} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{U} = \begin{pmatrix} \mathcal{U}_{AA} & 0 \\ 0 & \mathcal{U}_{BB} \end{pmatrix} \equiv \mathcal{U} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{U}_{BB} \end{pmatrix}, \quad \overrightarrow{\varphi} = \begin{pmatrix} \overrightarrow{\varphi_A} \\ \overrightarrow{\varphi_B} \end{pmatrix}.$$

D'après l'équation (34), la matrice $\mathcal{U}$ étant diagonale par bloc, on peut alors écrire :

$$\overrightarrow{\varphi_A} = \overrightarrow{\varphi_A^o} + \Delta x_B \mathcal{G}_{\mathcal{AB}} \mathcal{U}_{\mathcal{BB}} \overrightarrow{\varphi_B}, \tag{37}$$

$$\overrightarrow{\varphi_B} = \overrightarrow{\varphi_B^o} + \Delta x_B \mathcal{G}_{\mathcal{BB}} \mathcal{U}_{\mathcal{BB}} \overrightarrow{\varphi_B}, \tag{38}$$

et on peut réécrire l'équation (38) sous la forme

$$\overrightarrow{\varphi_B} = (I_N - \Delta x_B \mathcal{G}_{\mathcal{BB}} \mathcal{U}_{\mathcal{BB}})^{-1} \overrightarrow{\varphi_B^o}. \tag{39}$$

2.3 Fonction d'onde diffusée par un mur de potentiel rectangulaire

Nous allons à nouveau nous placer dans la situation de la section 1.2 et nous allons utiliser l'équation de *LIPPMAN-SCHWINGER* discrétisée afin de calculer la fonction d'onde φ pour un électron en procédant en deux étapes.

1. Nous pouvons constater que l'équation (39) permet de calculer $\overrightarrow{\varphi_B}$ par de simples opérations matricielles.
2. Une fois $\overrightarrow{\varphi_B}$ connu, l'équation (37) nous permet de calculer $\overrightarrow{\varphi_A}$ facilement.

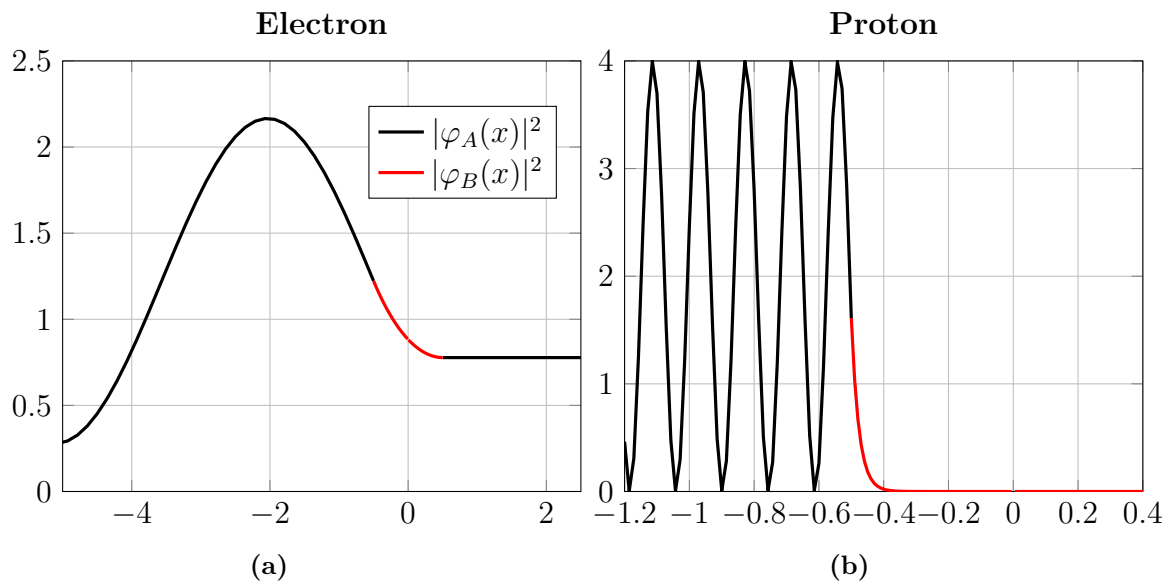

Figure 4 – *Tracé de $|\varphi(x)|^2$ en fonction de la position x (Å) pour un électron (4a) d'énergie $E = 1eV$ et un proton (4b) de même énergie soumis à un potentiel $V_0 = 2eV$ dans la région B de largeur 1Å.*

Notre programme **OCTAVE** est donc relativement simple, en ce sens qu'il ne s'agit que de définir des matrices $\mathcal{U}$ et $\mathcal{G}$ après avoir discrétisé l'espace de travail. Quelques

opérations matricielles plus tard, la fonction d'onde est calculée (Fig. 4). Nous pourrons comme précédemment calculer la probabilité de passage de la particule par effet tunnel.

Particule	Énergie (eV)	Probabilité de passage
Électron	1 eV	$77,7\%$
Proton	1 eV	$4,9.10^{-17}\%$

Remarque : *On peut remarquer que, quelle que soit la méthode utilisée, les probabilités de passage par effet tunnel sont extrêmement proches. Bien entendu, la précision de la seconde méthode dépend de plusieurs paramètres, dont le pas choisi pour discrétiser l'espace.*

Conclusion

Nous avons pu voir que la méthode de *LIPPMAN-SCHWINGER* possède de nombreux avantages. En effet, la possibilité de discrétiser l'espace permet de n'effectuer que des opérations matricielles, ce que la machine sait faire rapidement, comparé à des calculs de coefficients complexes comme lors de la première partie. De plus, cette simplicité et cette rapidité ne se fait pas au détriment de la précision comme on a pu le constater en comparant les probabilités de passage par effet tunnel (ainsi qu'en observant les courbes obtenues).

Enfin, on peut citer d'autres méthodes, comme les méthodes itératives ou encore la méthode de *Galerkin* (utilisant la théorie de ondelettes), qui pourraient permettre de résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire, et calculer la fonction d'onde, de manière différente.