



HAL
open science

Les fondamentaux de la mécanique quantique sous Python : Rappel de cours et exercices d'application avec programmes inclus

Mehdi Ayouz, Jean-Michel Gillet, Pierre-Eymeric Janolin, Viatcheslav Kokoouline

► To cite this version:

Mehdi Ayouz, Jean-Michel Gillet, Pierre-Eymeric Janolin, Viatcheslav Kokoouline. Les fondamentaux de la mécanique quantique sous Python : Rappel de cours et exercices d'application avec programmes inclus. A paraître. hal-02907437

HAL Id: hal-02907437

<https://hal.science/hal-02907437>

Submitted on 30 Jul 2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

CENTRALESUPÉLÉC
UNIVERSITY OF CENTRAL FLORIDA

LES FONDAMENTAUX DE LA MÉCANIQUE
QUANTIQUE SOUS PYTHON

RAPPEL DE COURS ET EXERCICES D'APPLICATION AVEC
PROGRAMMES INCLUS

MEHDI AYOUZ, JEAN-MICHEL GILLET, PIERRE-EYMERIC
JANOLIN ET VIATCHESLAV KOKOULINE

RÉFÉRENCES SCIENCES : ÉDITIONS ELLIPSES
disponible : [ici](#)

Description

Cet ouvrage a pour objectif de fournir des outils pédagogiques performants sous formes de programmes numériques Python, simples d'utilisation, permettant à tout lecteur de mieux appréhender les concepts de base de la physique quantique.

L'ouvrage a été découpé en deux parties : une première partie destinée aux enseignements de licence et une seconde partie qui s'adresse davantage aux étudiants ou élèves de niveaux supérieurs (master ou doctorat). Les programmes Python, donnés en annexe et disponibles pour le téléchargement sur les sites de CS et UCF, pourront être utilisés dans un enseignement de type travaux pratiques numériques pour la physique ainsi que pour tester les méthodes de résolutions approchées de l'équation de Schrödinger, vues en cours de physique quantique. L'environnement graphique du langage Python permet d'une part à tout formateur d'utiliser les résultats de simulations comme support de cours et d'autre part à tout étudiant de réaliser ses propres expériences numériques afin de mieux se représenter l'essentiel des concepts : de la quantification de l'énergie à la propagation du paquet d'ondes en passant par la théorie du moment cinétique et la théorie des perturbations stationnaires et dépendantes du temps.

Table des matières

I	Partie I destinée aux enseignements de licence	1
1	Rappels sur les outils mathématiques et numériques	3
1.1	Rappel de mécanique quantique	3
1.1.1	Notion de fonction d'onde	3
1.1.2	Espace des états et notation de Dirac	4
1.1.3	Représentations $\{ \mathbf{r}\rangle\}$ et $\{ \mathbf{p}\rangle\}$	7
1.1.4	Postulats de la mécanique quantique	10
1.1.5	Équation de Schrödinger	14
1.2	Équation de Schrödinger : résolution numérique	17
1.2.1	Boîte de simulation	17
1.2.2	Bases pour représenter l'équation de Schrödinger	18
1.2.3	Méthode de <i>Représentation d'une Variable Discrète</i> (DVR)	20
1.2.4	Méthode de <i>Représentation d'une Base Finie</i> (FBR)	21
1.2.5	Lien entre méthodes DVR-FBR et différences finies	33
1.2.6	Grille de Fourier dépendante du temps	37
1.2.7	Formalisme du potentiel complexe absorbant	38
1.3	Problèmes aux valeurs propres	41
1.4	Structure des programmes	43
1.5	Langage de programmation	45
1.5.1	Installation de PYTHON	45
1.5.2	Les bases de la programmation PYTHON	46
2	Potentiels à une dimension constants par morceaux	53
2.1	Puits de potentiel infini	55
2.2	Double puits de potentiel infini	59
2.3	Puits de potentiel carré	61
2.4	Double puits de potentiel carré	66
2.5	Marche ou saut de potentiel	69
2.6	Barrière de potentiel	71
2.7	Puits de potentiels delta	75

2.7.1	Potentiel avec une fonction delta	75
2.7.2	Double puits de potentiel delta : modèle simple d'une molécule	77
2.8	Exercices d'approfondissement	80
3	Effet tunnel et approximation WKB	81
3.1	Rappels sur la radioactivité	82
3.1.1	Structure du noyau atomique	82
3.1.2	Loi de décroissance et constante radioactive	83
3.1.3	Énergie de la particule α émise	84
3.2	Approche quantique de la désintégration α	85
3.2.1	Modèle de Gamow	86
3.2.2	Relation entre temps de franchissement de la barrière et constante radioactive	89
3.2.3	Approximation Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)	90
3.2.4	Validité de l'approximation WKB	93
3.3	Traitement numérique de la désintégration α	94
3.4	Exercices d'approfondissement	101
4	Oscillateur harmonique	103
4.1	Rappel sur l'oscillateur harmonique	104
4.1.1	Approche classique	105
4.1.2	Approche quantique	107
4.2	États stationnaires de l'oscillateur harmonique à une dimension	108
4.2.1	Solution analytique	108
4.2.2	Traitement numérique	111
4.3	Généralisation à l'oscillateur harmonique à deux dimensions	114
4.3.1	Traitement analytique	115
4.3.2	Traitement numérique	116
4.4	Exercices d'approfondissement	118
5	Harmoniques sphériques et rotateur rigide	121
5.1	Rappel sur le moment cinétique	122
5.2	Les états propres du moment cinétique	124
5.2.1	Valeurs et vecteurs propres de \hat{L}^2 et \hat{L}_z	124
5.2.2	Les harmoniques sphériques	126
5.2.3	Solutions numériques de l'opérateur \hat{L}^2	128
5.3	Rotateur rigide : états rotationnels d'une molécule diatomique	132
5.3.1	Rotateurs classique et quantique	133
5.3.2	Traitement numérique du rotateur rigide	136
5.3.3	Calcul des constantes rotationnelles	137

5.4	Exercices d'approfondissement	139
6	Atome d'hydrogène	141
6.1	Rappel sur un système de deux particules en interaction	142
6.1.1	Hamiltonien classique	142
6.1.2	Hamiltonien quantique	144
6.2	États rovibrationnels de l'atome d'hydrogène	146
6.2.1	Le modèle de l'atome de Bohr	146
6.2.2	Hamiltonien quantique de l'atome d'hydrogène	149
6.2.3	Traitement numérique	154
6.3	Systèmes hydrogénoïdes	162
6.4	Exercices d'approfondissement	164
7	Équation de Schrödinger dépendante du temps	167
7.1	Structure des programmes dépendants du temps	168
7.2	Propagation du paquet d'ondes libres gaussien	170
7.2.1	Particule libre	170
7.2.2	Paquet d'ondes libres gaussien	173
7.3	Coefficients de réflexion et de transmission	176
7.3.1	Méthodologie pour déterminer numériquement les coefficients $\mathcal{R}(E)$ et $\mathcal{T}(E)$	177
7.3.2	Marche ou saut de potentiel	179
7.3.3	Barrière de potentiel	185
7.3.4	Puits de potentiel carré	190
7.3.5	Potentiel delta de Dirac	192
7.4	Généralisation au paquet d'ondes à deux dimensions	195
7.4.1	Paquet d'ondes libre gaussien à deux dimensions	195
7.4.2	Diffraction d'électrons	198
7.5	Exercices d'approfondissement	205
II	Partie II destinée aux enseignements de master	207
8	Méthodes d'approximation I	209
8.1	Théorie des perturbations stationnaires	210
8.1.1	Cas d'un niveau initial non-dégénéré	213
8.1.2	Cas d'un niveau initial dégénéré	215
8.1.3	L'oscillateur anharmonique	216
8.1.4	Effet Zeeman de l'atome d'hydrogène	223
8.1.5	Effet Stark de l'atome d'hydrogène	225

8.1.6	Puits de potentiel infini carré en présence d'une perturbation de forme delta de Dirac	233
8.2	Méthode des variations	235
8.2.1	Cas de l'oscillateur harmonique : solution analytique	237
8.2.2	Problèmes séculaires	238
8.3	Exercices d'approfondissement	244
9	Méthodes d'approximation II	247
9.1	Rappel sur la résolution approchée de l'équation de Schrödinger	248
9.1.1	Position du problème	248
9.1.2	Solution à l'ordre 1 en ϵ	249
9.1.3	Solution à l'ordre 2 en ϵ	250
9.2	Étude de cas particuliers importants	250
9.2.1	Structure des programmes	250
9.2.2	Oscillateur harmonique à une dimension soumis à une perturbation constante à partir de $t = 0$	252
9.2.3	Molécule diatomique soumise à une perturbation sinusoïdale	254
9.3	Exercices d'approfondissement	258
10	Potentiels de formes simples	259
10.1	Potentiel de Morse	260
10.2	La molécule d'ammoniac	265
10.2.1	Barrière de potentiel finie	265
10.2.2	Traitement numérique	267
10.3	Exemples de molécules diatomiques	268
10.3.1	Rappel sur les niveaux de vibration-rotation des molécules diatomiques	269
10.3.2	États rovibrationnels de la molécule H_2	276
10.3.3	États vibrationnels de l'ion H_2^+	278
10.4	Exercices d'approfondissement	280
11	Structure électronique d'atomes et de molécules simples	283
11.1	Description du système moléculaire	283
11.2	Approximation de Born-Oppenheimer	285
11.3	Méthode de Hartree-Fock	286
11.4	Combinaison linéaire d'orbitales atomiques	288
11.5	Exemples d'application	289
11.5.1	Les bases $1s$ de <i>Slater</i> et de <i>Gauss</i>	289
11.5.2	Atome d'hélium	293
11.5.3	Liaison chimique : l'ion H_2^+	296

11.5.4 La molécule H ₂	302
11.6 Exercices d'approfondissement	309
12 Particule de spin 1/2 et système à deux niveaux	311
12.1 Particule de spin 1/2	312
12.1.1 Expérience de Stern-Gerlach	312
12.1.2 Valeurs propres et états propres de spin	314
12.1.3 Spin 1/2 dans un champ magnétique	316
12.2 Système à deux niveaux : cas simple de la molécule d'ammoniac	320
12.2.1 Position du problème	321
12.2.2 Influence du champ électrique statique	322
12.3 Couplage spin-orbite de l'atome d'hydrogène	328
12.3.1 Expression du terme spin-orbite	328
12.3.2 Effet du couplage spin-orbite sur le niveau $n = 2$	328
12.4 Exercices d'approfondissement	332
Annexes	333
A Programmes du chapitre 2	333
B Programmes du chapitre 3	341
C Programmes du chapitre 4	359
D Programmes du chapitre 5	371
E Programmes du chapitre 6	381
F Programmes du chapitre 7	391
G Programmes du chapitre 8	425
H Programmes du chapitre 9	445
I Programmes du chapitre 10	455
J Programmes du chapitre 11	471
K Programmes du chapitre 12	491
 Bibliographie	 495

Index

497

Première partie

Partie I destinée aux
enseignements de licence

Chapitre 3

Effet tunnel et approximation WKB

Dans ce chapitre, nous allons voir une application directe de la théorie de l'effet tunnel, introduite au chapitre 2, à la radioactivité α . Nous démontrerons le lien entre constante radioactive et coefficient de transmission d'une barrière, propriété physique que l'on verra en détail dans le chapitre 7. Nous introduirons également l'approximation Wentzel-Kramers-Brillouin (noté WKB au paragraphe 3.2.3) et indiquerons comment George Gamow l'a utilisée pour décrire la désintégration α d'un radioélément.

Nous utiliserons ensuite le programme de l'annexe B pour décrire la désintégration du polonium ${}_{84}^{212}\text{Po}$ et déterminer l'énergie d'émission de la particule α ainsi que son temps de demi-vie. Nous montrerons enfin que ces résultats numériques sont en accord avec ceux prédits par la théorie de l'effet tunnel ainsi que par l'approximation WKB.

Méthodologie pour s'assurer de la convergence des résultats numériques :

Fixer l'énergie maximale E_{\max} du spectre du hamiltonien que l'on souhaite calculer. Cette énergie permet de définir la longueur d'onde de Broglie λ_{dB} minimale que l'on peut représenter sur la grille. Le calcul est dit convergé si le pas de la grille Δx est bien inférieur à λ_{dB} , conformément à la relation (1.68).

Tester le nombre de points de grille N : le résultat est dit convergé si l'énergie (parties réelle et imaginaire) de l'état recherché ne varie plus (ou peu) en fonction de N , conformément à la figure 3.8.

Analyser la fonction d'onde dans l'espace réel et réciproque (impulsion) : le résultat est dit convergé si d'une part la composante $-k$ (ou $k < 0$) est absente du spectre de Fourier de la fonction d'onde de l'état recherché, conformément à la figure 3.7. D'autre part, la fonction d'onde aura un comportement asymptotique en $\exp(-kr)$ et doit par conséquent s'annuler dans la région du CAP, conformément à la figure 3.6.

Choisir une boîte de simulation assez grande (c'est-à-dire avec $L = x_L - x_0$ assez grand) pour s'assurer que les fonctions d'onde recherchées sont bien nulles en dehors de cette boîte.

Analyser les nœuds de la fonction d'onde afin d'attribuer des *nombre quantiques* définissant l'état quantique du système étudié.

3.1 Rappels sur la radioactivité

3.1.1 Structure du noyau atomique

La structure du noyau atomique a été mise en évidence par Rutherford, Marsden et Geiger en 1911 lors d'une expérience de diffusion de particules d'hélium notée α , émise par du radium, sur une mince feuille d'or. Un noyau atomique est formé de N^a neutrons et de Z protons appelés *nucléons*. Le noyau d'un élément X est généralement désigné par ${}^A_Z X$ avec la somme $A = N + Z$ qui représente le nombre de masse et Z le numéro atomique dans le tableau périodique de Mendeleïev.

Expérimentalement, on constate que certains noyaux sont *stables*, c'est-à-dire qu'ils ne changent pas, et d'autres *instables* qui se transforment^b en d'autres noyaux en émettant du rayonnement (gamma) ou des particules (He

a. À ne pas confondre avec le nombre de points de grille N lors du calcul numérique.

b. On distingue trois types de désintégration selon la nature de la particule émise : on parle de désintégration α lorsque la particule éjectée correspond à He, β à celle de l'électron (plus précisément, β^+ pour positron ou β^- pour électron) et γ pour une désintégration émettant un rayonnement électromagnétique très énergétique de type γ .

Comme $\mathcal{T} \ll 1$, il est possible de procéder à un développement limité de l'expression précédente, $(1 - \mathcal{T})^{N_F} \simeq 1 - N_F \mathcal{T}$, ce qui permet de trouver :

$$\delta\mathcal{P} \simeq N_F \mathcal{T} = \frac{\mathcal{T} \delta t}{\tau_F} \quad (3.18)$$

En identifiant la probabilité ci-dessus avec celle de la désintégration du noyau père (équation 3.2), on obtient ^g :

$$\Gamma = \frac{\mathcal{T}}{\tau_F} \quad (3.19)$$

ou bien (à partir de 3.5) :

$$\tau = \frac{\tau_F \ln 2}{\mathcal{T}} \quad (3.20)$$

Ainsi si l'on connaît \mathcal{T} , on peut estimer soit τ à partir d'un modèle donnant τ_F ou bien τ_F à partir de données expérimentales.

3.2.3 Approximation Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)

L'approximation WKB a été développée en 1923 par le mathématicien Harold Jeffreys et introduite pour la première fois en mécanique quantique en 1926. Cette approximation est utilisée pour résoudre l'équation de Schrödinger à une dimension pour un système dont l'énergie potentielle n'est pas uniforme mais varie lentement en comparaison avec la longueur d'onde. Dans ce cas, on peut dire que le potentiel est essentiellement constant et que $\psi(r)$ aura toujours une forme sinusoïdale si $E > V(r)$ (voir résultats du chapitre 2).

On cherche alors une solution de l'équation de Schrödinger (1.36), après séparation des variables angulaires et radiales, de la forme :

$$\psi(r) = A(r)e^{i\phi(r)} \quad (3.21)$$

avec $A(r)$ et $\phi(r)$ respectivement l'amplitude complexe et la phase de la fonction d'onde qui dépendent de r . En injectant l'expression précédente dans l'équation de Schrödinger (1.36), on obtient :

$$\left[\frac{d^2 A(r)}{dr^2} + iA(r) \frac{d^2 \phi(r)}{dr^2} + 2i \frac{dA(r)}{dr} \frac{d\phi(r)}{dr} - A(r) \left(\frac{d\phi(r)}{dr} \right)^2 \right] e^{i\phi(r)} = -k(r)A(r)e^{i\phi(r)} \quad (3.22)$$

^g. Notons que la définition de Γ est différente dans le cas du formalisme du CAP, elle a la dimension d'une énergie. C'est le rapport \hbar/Γ qui a la dimension d'un temps.

où $k(r) = \sqrt{2m[E - V(r)]}/\hbar$ est le vecteur d'onde local dépendant de r avec $E > V(r)$. Si l'on égalise partie réelle et partie imaginaire dans l'équation précédente, on trouve :

$$\frac{d^2 A(r)}{dr^2} = A(r) \left[\left(\frac{d^2 \phi(r)}{dr^2} \right)^2 - k^2(r) \right] \quad (3.23)$$

$$\frac{d}{dr} \left(A^2(r) \frac{d\phi(r)}{dr} \right) = 0 \quad (3.24)$$

L'équation (3.24) se résout aisément et donne :

$$A(r) = \frac{A'}{\sqrt{\frac{d\phi(r)}{dr}}} \quad (3.25)$$

avec A' une constante réelle. Quant à l'équation (3.23), elle peut être résolue de manière approximative en faisant l'hypothèse que le potentiel varie lentement en comparaison avec la longueur d'onde. Ainsi l'amplitude $A(r)$ varie également lentement, vérifiant la condition :

$$\frac{1}{A(r)} \frac{d^2 A(r)}{dr^2} \ll \left(\frac{d^2 \phi(r)}{dr^2} \right)^2 - k^2(r) \quad (3.26)$$

L'approximation précédente permet de résoudre l'équation (3.23) et on trouve :

$$\left(\frac{d^2 \phi(r)}{dr^2} \right)^2 = \pm k^2(r) \Rightarrow \frac{d\phi(r)}{dr} = k(r) \Rightarrow \phi(r) = \pm \int k(r) dr \quad (3.27)$$

En injectant l'expression précédente dans la solution (3.21), on obtient :

$$\psi(r) = \frac{A'}{\sqrt{k(r)}} \exp \left\{ -i \int k(r) dr \right\} + \frac{B'}{\sqrt{k(r)}} \exp \left\{ i \int k(r) dr \right\} \quad (3.28)$$

La formule (3.28) est appelée *approximation WKB* pour $E > V(r)$. Pour la région classiquement interdite $E < V(r)$, $k(r)$ est imaginaire : $ik(r) \rightarrow q(r) = \sqrt{2m(V(r) - E)}/\hbar$ et la fonction d'onde est une exponentielle réelle de forme :

$$\psi(r) = \frac{C'}{\sqrt{q(r)}} \exp \left\{ - \int q(r) dr \right\} + \frac{D'}{\sqrt{q(r)}} \exp \left\{ \int q(r) dr \right\} \quad (3.29)$$

L'expression précédente, appelée également approximation WKB, reste valide si $V(r)$ varie lentement en comparaison avec $1/q(r)$.

En conclusion, connaissant la forme du potentiel, on peut remonter aisément à la fonction d'onde à l'aide des formules (3.28) et (3.29). Notons d'ailleurs que si $V(r)$ est constant et indépendant de r , $\phi = \pm kr$ (pour $E > V$) et $\phi = \pm qr$ (pour $E < V$). Nous retrouvons ainsi dans ces cas les solutions du chapitre 2 pour des potentiels à une dimension constants par morceaux.

Pour le cas du potentiel (3.11) avec $V_m = 0$, l'approximation WKB permet d'écrire (les solutions en $r < r_1$ et $r \gg r_2$ sont analogues à celles obtenues dans le chapitre 2) :

$$\begin{cases} \psi(r) = Ae^{ikr} + Be^{-ikr} & r < r_1 \\ \psi(r) \simeq \frac{C'}{\sqrt{q(r)}} \exp\{-\int q(r)dr\} + \frac{D'}{\sqrt{q(r)}} \exp\{\int q(r)dr\} & r_1 \leq r \leq r_2 \\ \psi(r) = Fe^{ikr} & r \gg r_2 \end{cases} \quad (3.30)$$

où r_1 et r_2 sont les points tournants classiques pour lesquels l'énergie est égale au potentiel (voir figure 3.2). Ici, $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ est indépendant de r et $E > 0$.

Comme la hauteur effective du potentiel $V(r = R) - E$ est grande ~ 20 MeV, le coefficient D' est petit et peut donc être négligé, $D' = 0$. D'après la définition du coefficient de transmission $\mathcal{T} = |F|^2/|A|^2$ et en utilisant les conditions de continuité de la fonction d'onde en r_1 et r_2 (voir chapitre 7), on peut écrire :

$$\mathcal{T} = \frac{|F|^2}{|A|^2} = e^{-2\phi} = e^{-2\int_{r_1}^{r_2} q(r)dr} = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m[V_{model}(r) - E]}dr} \quad (3.31)$$

En substituant l'expression de V_{model} dans l'équation précédente et en posant $V(r_2) = 2(Z - 2)e^2/r_2 = E$ (définition des points tournants), on trouve :

$$\begin{aligned} \mathcal{T} &\simeq \exp\left\{-\frac{2\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{r_2}{r} - 1}dr\right\} \\ &= \exp\left\{-\frac{2\sqrt{2mE}}{\hbar} \left[r_2 \left(\frac{\pi}{2} - \underbrace{\arcsin\sqrt{\frac{r_1}{r_2}}}_{\sim\sqrt{r_1/r_2}} \right) - \underbrace{\sqrt{r_1(r_2 - r_1)}}_{\sim\sqrt{r_1 r_2}} \right]\right\} \\ &\simeq \exp\left\{-\frac{2\sqrt{2mE}}{\hbar} \left[\frac{\pi}{2}r_2 - 2\sqrt{r_1 r_2} \right]\right\} \\ &= \exp\left\{-\underbrace{\mathcal{C}_1 \frac{2(Z - 2)}{\sqrt{E}} + \mathcal{C}_2 \sqrt{2(Z - 2)r_1}}_{-2\phi}\right\} \end{aligned} \quad (3.32)$$

avec $\mathcal{C}_1 = \pi\sqrt{2me^2}/\hbar$ et $\mathcal{C}_2 = 4\sqrt{2me}/\hbar$ qui sont des constantes. À partir de l'équation (3.19), on obtient une relation entre constante radioactive et énergie :

$$\log_{10} \Gamma = \log_{10} \mathcal{T} - \log_{10} \tau_F = -\frac{2\phi}{\ln 10} - \log_{10} \tau_F \propto \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (3.33)$$

Puisque $\tau = \ln 2/\Gamma$, on peut écrire :

$$\log_{10} \tau = \log_{10}(\ln 2) - \log_{10} \Gamma \propto \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (3.34)$$

et donc $\log_{10} \tau$ (et $\log_{10} \Gamma$) est une fonction linéaire de $1/\sqrt{E}$, de pente et d'ordonnée à l'origine dépendant de $2(Z-2)$ d'après (3.32). Si l'on trace $\log_{10} \tau$ en fonction de E , on observe que pour chaque radioélément (pour une valeur de Z fixée), il y a regroupement sur une même courbe de l'ensemble de ses isotopes. Cette relation est confirmée par les mesures [Perlman *et al.* \(1949\)](#).

3.2.4 Validité de l'approximation WKB

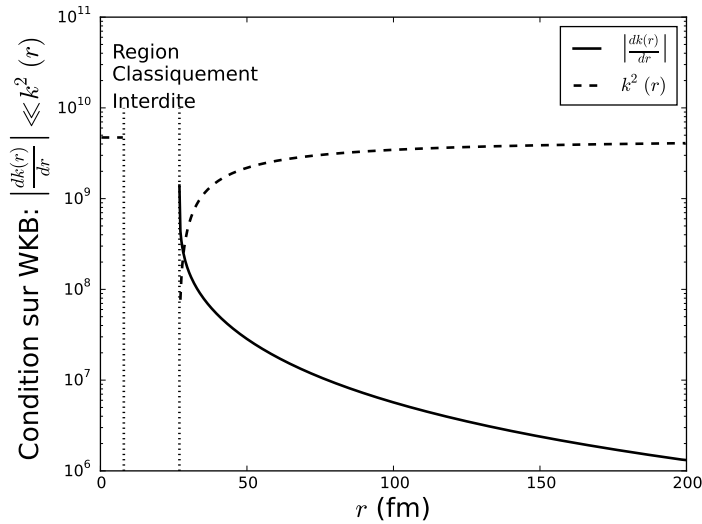


FIGURE 3.3 Condition de validité de l'approximation WKB dans le cas du potentiel (3.11). Cette condition est vérifiée tant que la courbe en trait plein reste au dessous de celle en trait pointillé. Notons que les courbes présentent des discontinuités dans la région classiquement interdite, c'est-à-dire la barrière.

Comme nous l'avons vu dans le paragraphe précédent, les fonctions d'onde (3.28) et (3.29) sont valides si la condition (3.26) est vérifiée. En substituant l'expression de $A(r)$ de l'équation (3.25) dans (3.26), nous aurons :

$$\frac{d^2k(r)}{dr^2} \ll \left(\frac{dk(r)}{dr} \right)^2 k^{-1}(r) \quad (3.35)$$

ou encore :

$$\left| \frac{dk(r)}{dr} \right| \ll k^2(r) \quad (3.36)$$

La condition précédente est représentée sur la figure 3.3 en fonction r pour le potentiel (3.11). On voit que la condition (3.36) est vérifiée dans ce cas car la courbe en trait plein représentant $\left| \frac{dk(r)}{dr} \right|$ est au-dessous de la courbe en trait pointillé $k^2(r)$.

3.3 Traitement numérique de la désintégration α

Nous pouvons modéliser l'interaction entre une particule α et un noyau, ici le plomb (noyau de spin total nul), par un potentiel à symétrie sphérique :

$$V(r) = V_w(r) + V_{SR}(r) + V_{LR}(r) + V_{WS}(r) \quad (3.37)$$

avec $V_w(r)$ un potentiel de très courte portée, $V_{SR}(r) + V_{LR}(r)$ est la contribution électrostatique et $V_{WS}(r)$ celle des interactions fortes.

Le potentiel répulsif :

$$V_w(r) = V_1 e^{-\frac{r}{\delta}} \quad (3.38)$$

simule un mur au voisinage de $r \simeq 0$ de hauteur V_1 et dont la *profondeur de pénétration* serait δ . Le terme $V_{SR}(r) + V_{LR}(r)$ correspond à l'énergie potentielle d'interaction entre une particule ponctuelle de charge $2q_e$ et une sphère uniformément chargée de rayon R et de charge totale^h $(Z-2)q_e$ Duarte et Siegel (2010) :

$$\begin{cases} V_{SR}(r) &= \frac{2(Z-2)e^2(3R^2-r^2)}{2R^3} & r \leq R \\ V_{LR}(r) &= \frac{2(Z-2)e^2}{r} & r > R \end{cases} \quad (3.39)$$

h. Pour rappel : $e^2 = q_e^2/(4\pi\epsilon_0)$ avec $\epsilon_0 = 8.85418782 \times 10^{-12} \text{ m}^{-3}\text{kg}^{-1}\text{s}^4\text{A}^2$ la permittivité du vide.

avec R le rayon effectif. Pour modéliser les interactions fortes, nous avons utilisé le potentiel de Wood-Saxon :

$$V_{WS}(r) = \frac{V_0}{1 + e^{\frac{r-R}{\sigma}}} \quad (3.40)$$

où σ est appelée *épaisseur de surface*.

Le potentiel $V(r)$, donné par (3.37), possède cinq paramètres libres : σ , V_0 , V_1 , δ et R qui peuvent être ajustés de sorte que les valeurs calculées de E et τ soient en accord avec les données expérimentales. Pour le cas du polonium $^{212}_{84}\text{Po}$, nous avons fixé le paramètre σ à 0.8 fm et utilisé l'expression (3.12) pour R . Les paramètres restants ont été ajustés afin de reproduire une énergie de la particule α , $E \sim 8 - 9$ MeV. Pour ce faire, nous avons choisi $V_0 = -115$ MeV, $V_1 = 500$ MeV et $\delta = 1$ fm.

Notons qu'avec ces paramètres choisis et la forme du potentiel (3.37), il est difficile de reproduire le temps de demi-vie expérimental (voir paragraphe 3.2.1) car la hauteur effective de la barrière $V(r_{\max} \simeq 11 \text{ fm}) - E \simeq 12$ MeV est bien plus petite que celle modélisée par le potentiel (3.11), $V(r = R) - E \simeq 22$ MeV pour $R \simeq 8$ fm. Bien que le temps de demi-vie obtenu numériquement soit plus petit de deux ordres de grandeur que celui donné par l'expérience dans le cas du polonium, le potentiel (3.37) nous a toutefois permis de tester la méthode DVR-FBR et de confronter les résultats obtenus à ceux donnés par la théorie de l'effet tunnel ainsi que l'approximation WKB.

Le programme *alpha_decay.py* de l'annexe B résout l'équation de Schrödinger (1.36) avec la méthode DVR dont la FBR est formée de fonctions sinus (1.85). Ceci revient à diagonaliser la matrice hamiltonienne dont les éléments sont donnés par :

$$H_{ii'} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (-1)^{i-i'}}{4m(r_L - r_0)^2} \left\{ \begin{array}{ll} \frac{2(N+1)^2 + 1}{3} - \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\pi(i+1)}{N+1}\right)} & i = i' \\ \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\pi(i-i')}{2(N+1)}\right)} - \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\pi(i+i'+2)}{2(N+1)}\right)} & i \neq i' \end{array} \right\} + V_{ii'} \delta_{ii'} \quad (3.41)$$

avec

$$V_{ii'} = V_1 e^{-\frac{r_i}{\delta}} + \left\{ \begin{array}{ll} \frac{2(Z-2)e^2(3R^2 - r_i^2)}{2R^3} & r_i \leq R \\ \frac{2(Z-2)e^2}{r_i} & r_i > R \end{array} \right\} + \frac{V_0}{1 + e^{\frac{r_i - R}{\sigma}}} - i \frac{3}{2} A_2 \left[\frac{r_i - (r_L - L_{\text{CAP}})}{L_{\text{CAP}}} \right]^2 \quad (3.42)$$

Annexe B

Programmes du chapitre 3

Programme *alpha_decay.py* du chapitre 3 simulant la désintégration α d'un radioélément. En posant la variable `Do_CAP=True`, le programme calcule le temps de demi-vie de la particule dans le noyau. La variable `Type`, permet de choisir la base pour représenter l'opérateur énergie cinétique : 0 pour FGHR et 1 pour la base sinus.

```
#####  
#   March 2018  
#   Author: Mehdi Ayouz lgpm Centralesupelec (cs)  
#   mehdi.ayouz@centralesupelec.fr  
#   Co-authors: V. Kokoouline (University of Central Florida),  
#   JM Gillet and PE Janolin (spms, cs)  
#   input: N, r0, rL, m, ... see below  
#   output : E[0:N] (eigen energies)  
#           Gamma (withd of the resonat state) and half-life tau=1/Gamma  
#           psi[0:N-1,0:N-1] (normalized eigen fonctions)  
#####  
from __future__ import division  
from math import *  
import numpy as np  
from time import clock  
from pylab import *  
from numpy import linalg as LA  
from scipy.interpolate import interp1d  
import scipy.special  
import gc  
#####  
def CAP(r):
```



```

c=0.0133969
b=-0.00078675
a=1.65013e-5

Ekin_average=10**((0.6242*log10(Ekin_min)+0.3759*log10(Ekin_max))
lambda_dB_average=2*pi/sqrt(2*m*Ekin_average)
tmp_L_lambda=LCAP/lambda_dB_average

A2_E=a*L_lambda**5+b*L_lambda**4+c*L_lambda**3+d*L_lambda**2+\
e*L_lambda+f
tmp_A2_E=a*tmp_L_lambda**5+b*tmp_L_lambda**4+c*tmp_L_lambda**3+\
d*tmp_L_lambda**2+e*tmp_L_lambda+f
A2=tmp_A2_E*Ekin_average
figure(3)
plot(L_lambda,A2_E,'-k',lw=2)
plot(tmp_L_lambda,tmp_A2_E,'or',lw=2)
xlabel("$L_{CAP}/\lambda_{dB}$ ",size=20)
ylabel("$A_2/E$ ",size=20)
annotate('$A_2/E$', xy=(tmp_L_lambda,tmp_A2_E+0.1*tmp_A2_E),\
xytext=(tmp_L_lambda,tmp_A2_E+0.1*tmp_A2_E),xycoords='data',size=20)
savefig('CAP_parameters.eps')
return A2,Ekin_average,lambda_dB_average
#####
if __name__ == "__main__":

    print('')
    print ('Schrodinger equation solving')
    print ('He decay in Po atom')

    wtime1 = clock ( )
    gc.collect()

    N=600          # total number of grid point
    Nk=2000        # total number of grid point in reciprocal-space
    r0=0.0001      # minimal distance of the grid point in fm
    rL=200.0       # maximal distance of the grid point in fm
    m=4.002603     # He particle mass in uma
    LCAP=30        # lenght of the complex absorbing potential in fm
    Z=84           # atomic number for parent nucleus
    V0=-115        # depth of the potential in MeV

```

```

V1=500          # height of the wall at short range
delta=1.        # strength of the the wall at short range in fm
A=212          # mass number of the parent nucleus
R=1.07*(4**((1./3.)+(A-4)**(1./3.))) # Radius of alpha particle and
                                     # daughter nucleus in fm
Ekin_min=8.    # alpha particle minimal energy in MeV to look for
Ekin_max=9.    # alpha particle maximal energy in MeV to look for
sigma=0.8      # skin parameter of Wood-Saxon potential in fm
Type=1         # 0 for Fourier and 1 for Sin basis set
Do_CAP=True    # CAP variable
n=5            # number of segment in barrier approximation

au_to_amu=5.4857990946e-4
au_to_fm=0.5291772083e5
au_to_MeV=1./3.67493245e4
au_to_sec=2.4188843e-17

r=np.zeros(N,float)          # declare the grid point
delta_r=np.zeros(N,float)
P=np.zeros((N,N),complex)   # declare the right transfer matrix
PL=np.zeros((N,N),complex)  # declare the left transfer matrix
H=np.zeros((N,N),complex)
V=np.zeros((N,N),complex)
T=np.zeros((N,N),float)
psi=np.zeros((N,N),complex)
E=np.zeros(N,complex)
Eplot=np.zeros(N,complex)
Ratio=np.zeros(N,float)
Lambda=np.zeros(N,float)
psi_FT=np.zeros(Nk,complex)
k=np.zeros(Nk,float)
V_Model=np.zeros(N,float)
ci=complex(0,1.)

# conversion into a.u.
r0=r0/au_to_fm
rL=rL/au_to_fm
R=R/au_to_fm
sigma=sigma/au_to_fm
LCAP=LCAP/au_to_fm

```

```

m=m/au_to_amu
V0=V0/au_to_MeV
V1=V1/au_to_MeV
Ekin_min=Ekin_min/au_to_MeV
Ekin_max=Ekin_max/au_to_MeV

if(Type==0):
    delta_r[:]=(rL-r0)/N
elif(Type==1):
    delta_r[:]=(rL-r0)/(N+1)
else:
    print("Uknown input method")

# Complex absorbing potential part
if(Do_CAP):
    A2,Ekin_average,lambda_dB_average=Get_CAP_Magnetude(Ekin_min,Ekin_max,\
    m,LCAP)
else:
    A2=0.

# Build the grids
r,k,delta_k,kmax=Get_Constant_Grid(N,r0,delta_r,Type)

print("mass of alpha particle=%g a.u."%m)
print("radius of alpha particle R=%g fm"%(R*au_to_fm))
print('kmax=%g 1/a.u.'%kmax)
print('<Ekin>=%g MeV  lambda_dB=%g fm ' %(Ekin_average*au_to_MeV,\
lambda_dB_average*au_to_fm))
print('L/lambda_dB=%g delta r=%g fm'\
%(LCAP/lambda_dB_average,delta_r[0]*au_to_fm))
print('The optimal A2 is %g in MeV and %g in a.u.' %(A2*au_to_MeV, A2))
print("V0=%g MeV"%(V0*au_to_MeV))
print("V1=%g MeV"%(V1*au_to_MeV))
print("Nuclear radius R=%g fm "%(R*au_to_fm))

# Get the potential energy operator
V,minloc,maxloc,minval,maxval,rmax,rmin,V_Model=Get_Potential_Operator(N,\
r,V0,V1,R,Z,delta)
print('V.....')

```

```

# Build the kinetic operator using DVR method
T=Get_Kinetic_Operator(m,N,delta_r,Type)
print('T.....')

# Build the hamiltonian operator  $H=T+V$ 
H=Get_Hamiltonian_Operator(N,T,V)
print('H.....')

# Call diagonalization routine
E,PL,P,INFO =scipy.linalg.lapack.zgeev(H,0,1,2*N,0)
#E,P-LA. eig(H)
E, P =Get_Ordered_Eigen_States(N,P,E)
print('Diagonalization done.')
```

Normalize eigen vectors

```
psi,Ratio=Get_Wave_Functions_Normalization(P,delta_r,N,V,rmax,maxloc)
```

Get resonant state to be plotted

```
rw,r1,r2,i2,i1,v_plot,Lambda=Get_v_plot(N,delta_r,V,m,Ekin_min,Ekin_max)
```

Get classical model

```
print("          Classical Model          ")
tauF,tauF_Vmodel=Get_Classical_Model(v_plot,psi,rw,r1,i1,i2,R)
```

Get WKB model

```
print('          WKB          ')
Get_WKB(r1,r2,m,V,delta_r,tauF,v_plot)
```

Get Fourier Transform of the wave function

```
psi_FT=Get_Fourrier_Transform_WF(N,Nk,k,r,delta_r,psi,v_plot,ci,r2)
```

get wave fuction

```
Get_Wave_Functions_Plot(r,psi,psi_FT,Ratio,v_plot,r2,i2)
```

Get Barrier transmission

Get Gamow model

```
print('          Gamow Model          ')
Get_Barrier_Transimission(N,E,V,m,n,r1,r2,i1,i2,v_plot,psi,tauF_Vmodel,V_Model)
```

```
print('v   Re(E) in MeV   Im(E) in a.u.   tau(s)   psi(0<r<rb)|/|psi(r)|')
```

```
print ''

for v in range(N):
    if(Ratio[v]>90 and real(E[v])<Ekin_max):
        print ' %8d %14f %14e %14e %14f' % ( v, real(E[v])*au_to_MeV,\
            imag(E[v]),1./(2*abs(imag(E[v])))*au_to_sec, Ratio[v])

wtime2 = clock ( )
print('')
print (' Elapsed wall clock time = %g seconds.' % ( wtime2 - wtime1 ))
print ('')
print ('Schrodinger 1D')
print (' Normal end of execution.')
print ('')
```
