

## ZZZZ399 – Fréquences d'un oscillateur harmonique quantique à une dimension

---

### Résumé :

L'objectif de ce test est de calculer les fréquences d'un oscillateur harmonique quantique<sup>1</sup> à une dimension, pour la solution stationnaire.

---

1 [http://fr.wikipedia.org/wiki/Oscillateur\\_harmonique\\_quantique](http://fr.wikipedia.org/wiki/Oscillateur_harmonique_quantique)

## 1 Problème de référence

---

### 1.1 Géométrie

Le problème, tout en étant unidimensionnel, est modélisé en deux dimensions (il n'y a pas en ce moment une modélisation 1D pour la thermique en Code\_Aster).

Pour des raisons de mise en échelle, on utilise le Système d'unités atomiques<sup>2</sup>.

On considère une bande de longueur  $L = 10,0 a_0$  et d'épaisseur  $L/100 a_0$ , centrée à l'origine des axes, pour représenter l'espace.



L

Une particule chargée (dans ce cas, un électron), soumise à un potentiel, peut assumer seulement des valeurs spécifiques d'énergie, qu'on peut obtenir par résolution de l'équation de Schroedinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) + \frac{1}{2} kx^2 \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$$
$$n = 0, 1, \dots$$
$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Il s'agit d'un problème aux fonctions propres<sup>3</sup>: il faut trouver les valeurs  $E_n$  (autovaleurs).

L'équation est de type diffusion (en analogie au calcul de l'équilibre thermique), la résolution des fonctions propres sera faite par un calcul modal.

### 1.2 Matériaux

Le test utilise deux matériaux : un pour la résolution de l'équation de diffusion ( $\lambda = 1, \rho_{cp} = 1$ ) et l'autre pour affecter le potentiel, avec  $\rho_{cp}$  variable en fonction d'une valeur d'un champ, calculé avec la formule du potentiel.

### 1.3 Conditions aux limites

On impose la valeur zéro aux extrémités du domaine. Il n'y a pas réellement besoin de cette condition, qui est mise pour tester aussi cette mise en données mais qui peut-être enlevée sans modifications.

### 1.4 Conditions initiales

Néant.

---

2 [http://fr.wikipedia.org/wiki/Syst%C3%A8me\\_d%27unit%C3%A9s\\_atomiques](http://fr.wikipedia.org/wiki/Syst%C3%A8me_d%27unit%C3%A9s_atomiques)

3 [http://fr.wikipedia.org/wiki/Fonction\\_propre](http://fr.wikipedia.org/wiki/Fonction_propre)

## 2 Solution de référence

---

Une solution exacte est connue pour ce problème :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (1)$$

### 2.1 Références bibliographiques

- [1] ATKINS P.W. Molecular Quantum Mechanics

## 3 Modélisation A

---

### 3.1 Caractéristiques de la modélisation

On utilise une modélisation `PLAN`.

### 3.2 Caractéristiques du maillage

Le maillage contient 212 éléments de type `TRIA8`.

### 3.3 Grandeurs testées et résultats

On teste les valeurs de l'énergie calculée à partir des « fréquences » obtenues par le calcul modal, par rapport à la solution exacte.

Lieu	Type de référence	VALE_REFE	Précision
Différence entre solution analytique (1) et calcul	'ANALYTIQUE'	0	5.0E-4

## 4 Synthèse des résultats

Voici une visualisation de la partie réelle des fonctions propres calculés. On remarque une alternance de fonctions symétriques et anti-symétriques, typique de la solution de ce problème.

