Potentiel quartique – Méthode variationnelle

On considère une particule quantique soumise à un potentiel quartique. L'équation de Schrödinger stationnaire est

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{3}\alpha\, x^4\right)\varphi(x)=E\,\varphi(x)\,. \tag{1}$$

1/ Pour simplifier, on pourra poser $E=\hbar^2\lambda/(2m)$. Quelle est la dimension de λ ? Et de la constante de couplage α ? Par un argument d'analyse dimensionnelle, déduire l'énergie fondamentale E_0 (à un facteur d'ordre 1 près).

2/ Comme on ne sait pas résoudre l'équation différentielle simplement, on cherche la fonction d'onde de l'état fondamental sous la forme d'un « ansatz » (une fonction d'essai)

$$\varphi(x)=C\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\omega\, x^2}\,, \tag{2}$$

dépendant d'un paramètre ω que nous allons déterminer. Exprimer la constante de normalisation C en fonction de ω.

3/ Justifier que l'énergie cinétique moyenne est donnée par

$$\langle E_c\rangle_\varphi=\int \mathrm{d}x\,\frac{\hbar^2}{2m}\left|\frac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x}\right|^2\,. \tag{3}$$

Calculer explicitement $\langle E_c\rangle_\varphi$ pour la fonction d'onde (2) (en fonction de ω et $\hbar^2/(2m)$).

4/ Calculer l'énergie potentielle moyenne $\langle E_p\rangle_\varphi$. Interpréter physiquement la dépendance de $\langle E_c\rangle_\varphi$ et $\langle E_p\rangle_\varphi$ en fonction de ω (penser à l'inégalité de Heisenberg).

5/ Principe variationnel.– On admet que la « meilleure » valeur du paramètre ω (i.e. celle pour laquelle la fonction test est la plus proche de la solution de l'équation différentielle), est celle qui minimise $E_\varphi(\omega)=\langle E_c\rangle_\varphi+\langle E_p\rangle_\varphi$. Déduire la valeur optimale de ω, notée ω_*, puis l'énergie associée $E_0^{\mathrm{var}}=E_\varphi(\omega_*)$. Comparer avec l'énergie fondamentale obtenue numériquement

$$E_0\simeq 0.7352 \qquad \text{pour } \hbar=2m=\alpha=1\,. \tag{4}$$

6/ FACULTATIF.– Adapter l'analyse précédente à l'étude de l'énergie du premier état excité. Comparer au résultat numérique $E_1\simeq 2.6345$ pour $\hbar=2m=\alpha=1$. Quelle complication apparaît à partir du deuxième état excité ?

Annexe : on donne les intégrales

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\,x^{2n}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}x^2}}{\sqrt{2\pi}}=(2n-1)!!=(2n-1)\times(2n-3)\times 5\times 3\times 1 \tag{5}$$