TP - Problèmes aux valeurs propres

Approximation des modes propres de l'équation de Schrödinger unidimensionnel.

L'objectif de ce TP est d'utiliser la méthode des différences finis pour calculer les modes propres de l'équation de Schrödinger sur un domaine $\Omega =]-R, R[\subset \mathbb{R}$, $R > 0$ en présence d'un potentiel V :

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x) + V(x)u(x) = Eu(x) \quad x \in \Omega, \quad \int_\Omega |u|^2 = 1, \quad E \in \mathbb{R}. \tag{1}$$

On considère ici des conditions au bord de type Dirichlet homogène : $u(-R) = u(R) = 0$. Le potentiel V est supposé borné, mais peut être discontinu. La fonction u est appelée fonction d'onde. Son carré représente la probabilité de trouver la particule au voisinage de la position x.

Modes propres du Laplacien Supposons pour commencer que le potentiel est nul : $V = 0$. Le problème (1) est alors équivalent au calcul des fonctions et valeurs propres de l'opérateur Laplacien unidimensionnel. Ce problème a été étudié en cours et nous savons qu'il possible de déterminer exactement ces modes propres. Ceci nous permettra de comparer les valeurs numériques obtenues par la méthode des différences finies à ces valeurs analytiques.

1. Calculer les modes propres $(u_k, E_k)_{k\geq 1}$ du problème (1) avec $V = 0$. Montrer que l'on a
$$u_k(x) = \frac{1}{\sqrt{R}} \sin\left(\frac{k\pi(x+R)}{2R}\right), \quad E_k = \frac{k^2\pi^2}{4R^2}.$$
2. On approche ce problème grâce à la méthode des différences finies :
$$-\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} = Eu_i, \quad i \in \{1 : N\}, \quad u_0 = u_{N+1} = 0.$$
On pose $\mathbf{U} = [u_0, u_1, ..., u_{N+1}]$. Montrer que ce schéma se réécrit sous la forme $B\mathbf{U} = ED\mathbf{U}$ avec $B, D \in \mathbb{R}^{N+2,N+2}$ que l'on déterminera.

3. En éliminant les conditions au bord, en déduire que l'on a

$$\underbrace{\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}}_{A} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix}$$

   avec $h = \frac{2R}{N+1}$.

4. En utilisant la fonction `eig` de la librairire `numpy.linalg`, résoudre ce problème. Montrer en particulier que la méthode des différences finies approche exactement les fonctions propres u_k pour $1 \leq k \leq N$.
5. Calculer l'erreur d'approximation des valeurs propres $(E_k)_{1\leq k\leq N}$. Comparer cette erreur en fonction du terme $\frac{k}{N+1}$. En pratique, les valeurs propres $(\lambda_k)_{1\leq k\leq N}$ de la matrice A peuvent être calculées :

$$\lambda_k = \frac{4}{h^2}\sin^2\left(\frac{k\pi}{2(N+1)}\right).$$

   En déduire un critère sur N pour obtenir une approximation des M premières valeurs propres du problème continu avec un précision relative ε.

Modes propres de l'opérateur de Schrödinger On considère maintenant le problème (1) en présence d'un potentiel. Comme mentionné précédement, ce potentiel peut être discontinu. On considère dans la suite le potentiel "puit" :

$$V(x) = \begin{cases} 0 \text{ si } |x| \leq a \\ V_0 \text{ si } a \leq |x| \leq R, \end{cases}$$

avec $V_0 \geq 0$ et $0 < a < R$. En mécanique quantique, ce potentiel est une représentation simple d'une particule confinée dans une boite. Dans cette situation, on ne dispose plus d'une expression analytique des modes propres de l'opérateur de Schrödinger.

1. Modifier la matrice A sous la forme $A + A_V$ afin de prendre en compte ce potentiel.
2. Implémenter la méthode de la puissance inverse afin de donner une approximation des deux premières valeurs propres. Représenter ces valeurs propres en fonction du pas h.
3. Représenter sur le même graphique les fonctions propres de l'opérateur Laplacien et de l'opérateur de Schrödinger. Qu'observez-vous ?