

Bureau d'études

Résolution numérique du problème posé

CY TECH – PréING2



2021 – 2022

Reformulation de l'équation

Résolution de \mathcal{E}

Méthode de tir

Fonction de tir

Méthodes numériques

Remarques supplémentaires

Équation de SCHRÖDINGER dans un puits

$$\begin{cases} \forall x \in [0, L], \frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + (E - V(x)) \cdot \varphi(x) = 0 \\ \varphi(0) = \varphi(L) = 0 \end{cases} \quad (\mathcal{S})$$

Problème

- ▶ Pour toute valeur de E , $\varphi = 0$ est solution de (\mathcal{S}) .
- ▶ Numériquement, la solution nulle vient naturellement.
Donc une solution non nulle est difficile à trouver.

⇒ **Nécessité d'introduire la condition de normalisation**

$$\int_0^L \varphi(x)^2 dx = 1$$

Reformulation de l'équation

Équation étudiée

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall x \in [0, L], \frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + (E - V(x)) \cdot \varphi(x) = 0 \\ \varphi(0) = \varphi(L) = 0 \\ \int_0^L \varphi(x)^2 dx = 1 \end{array} \right. \quad (\mathcal{I}_N)$$

Formulation souhaitée avec $Y \in \mathcal{C}^1([0, L], \mathbb{R}^3)$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \forall x \in [0, L], Y'(x) = f(x, Y(x)) \\ Y_i(0) = y_i^0 & \text{pour certains indices } i \\ Y_j(L) = y_j^f & \text{pour certains indices } j \end{array} \right. \quad (\mathcal{E})$$

Étape 1 : équation différentielle

On pose $\varphi_1 = \varphi'$.

$$\text{Alors } \forall x \in [0, L], \begin{cases} \varphi'(x) = \varphi_1(x) \\ \varphi_1'(x) = \varphi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \cdot \varphi(x) \end{cases}$$

Étape 2 : condition de normalisation

$$\begin{aligned} \text{On note } N: [0, L] &\rightarrow \mathbb{R} \\ x &\mapsto \int_0^x \varphi(\ell)^2 d\ell \end{aligned}$$

Alors :

- ▶ $\forall x \in [0, L], N'(x) = \varphi(x)^2$
- ▶ $N(0) = 0$
- ▶ $N(L) = 1$

Étape 3 : combinaison des étapes précédentes

$$\begin{cases} \varphi'(x) = \varphi_1(x) \\ \varphi_1'(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \cdot \varphi(x) \\ N'(x) = \varphi(x)^2 \\ \varphi(0) = 0 \text{ et } \varphi(L) = 0 \\ N(0) = 0 \text{ et } N(L) = 1 \end{cases} \quad (\mathcal{E})$$

Étape 4 : construction de Y et f

$$\forall x \in [0, L], Y(x) = \begin{pmatrix} \varphi(x) \\ \varphi_1(x) \\ N(x) \end{pmatrix} \text{ et } f: \left(x, \begin{pmatrix} \varphi \\ \varphi_1 \\ N \end{pmatrix} \right) \mapsto \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \cdot \varphi \\ \varphi^2 \end{pmatrix}$$

Résolution de \mathcal{E}

Problème « aux deux bouts »

$$\begin{cases} \forall x \in [0, L], Y'(x) = f(x, Y(x)) \\ Y_1(0) = 0 \text{ et } Y_1(L) = 0 \\ Y_3(0) = 0 \text{ et } Y_3(L) = 1 \end{cases} \quad (\mathcal{E})$$

Pas de condition pour $Y_2(0)$ et $Y_2(L)$

Problème à valeur initiale

$$\begin{cases} \forall x \in [0, L], Y'(x) = f(x, Y(x)) \\ Y_1(0) = 0 \\ Y_2(0) = z \\ Y_3(0) = 0 \end{cases} \quad (\mathcal{E}_z)$$

Quelle valeur de z permet d'obtenir $Y_1(L) = 0$ et $Y_3(L) = 1$?

Méthode « de tir » ?

- ▶ Inspiré de la balistique
- ▶ $Y_2(0) \equiv$ angle de tir
- ▶ $(Y_1(L), Y_3(L)) = (0, 1) \equiv$ cible à atteindre

Inconnue(s) et équations

- ▶ Deux équations : $Y_1(L) = 0$ et $Y_3(L) = 1$
- ▶ Une inconnue : $z...$ *« Il en manque une ! »*
- ▶ L'autre inconnue est E :
 - ▶ seules certaines valeurs de E admettent une solution...
 - ▶ ...donc on cherche aussi cette quantité.

Description algorithmique

1. Paramètres en entrée de S

$$\begin{pmatrix} E \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E \\ Y_2(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E \\ \phi'(0) \end{pmatrix}$$

2. Résoudre $(\mathcal{E}_z) \Rightarrow$ solution Y sur $[0, L]$
3. Résultat de la fonction S

$$S\begin{pmatrix} E \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y_1(L) \\ Y_3(L) - 1 \end{pmatrix}$$

Important

Si $S\begin{pmatrix} E \\ z \end{pmatrix} = 0$:

- ▶ la solution Y de (\mathcal{E}_z) vérifie $Y_1(L) = 0$ et $Y_3(L) = 1$;
- ▶ Y est donc une solution de (\mathcal{E}) .

Méthodes numériques

De quoi a-t-on besoin ?

Résoudre $S(E, z) = 0$

- ▶ Résolution d'un système d'équations non-linéaires
- ▶ Dériver S par rapport à E ou z ... 🤪
⇒ *Utiliser une méthode ne nécessitant pas la dérivée*

Méthode retenue : **méthode hybride de POWELL**

Calcul de S

- ▶ Résolution numérique d'une équation différentielle ordinaire
- ▶ Importance de la précision du calcul de S et donc de la résolution de (\mathcal{E}_z)
⇒ *Importance du choix de la méthode de résolution*

Méthode retenue : **RKF45**

Résoudre $S(E, z) = 0$

Précision $\varepsilon \equiv$ valeur de S en-dessous de laquelle on considère qu'une solution est trouvée

Résoudre (\mathcal{E}_z)

Précision $\varepsilon_S \equiv$ erreur maximale permise sur la valeur de $Y(L)$
 \Rightarrow erreur maximale commise sur la valeur de S

Conséquence

- ▶ **La précision demandée sur le calcul de S doit être plus petite que celle sur la recherche de son zéro : $\varepsilon_S \leq \varepsilon$**
- ▶ Dans la pratique, on conseille $\varepsilon_S \leq 10^{-2}\varepsilon$.
(Exemple : $\varepsilon_S = 10^{-8}$ et $\varepsilon = 10^{-6}$)

Présentation des méthodes numériques utilisées

Remarques supplémentaires

Rappel : cas $V(x) = 0, \forall x \in [0, L]$

Résolution théorique possible

- ⇒ Solution connue pour chaque niveau n d'énergie
- ⇒ Valeurs correspondantes (E_n, z_n) connues

Résolution de $S(E, z) = 0$

Utiliser les valeurs (E_n, z_n) comme initialisation

- ▶ Résolution numérique dans le cas $V = 0$
 - ⇒ une seule itération doit suffire
 - ⇒ *Validation expérimentale (mais partielle) du code*
- ▶ Résolution numérique dans les autres cas de potentiel
 - ▶ *Faire varier n pour obtenir des solutions associés à différents niveaux d'énergie*

Rappel : cas $V(x) = 0, \forall x \in [0, L]$

Résolution théorique possible

⇒ Solution de (\mathcal{E}_z) connue pour tout couple (E, z)

Calcul de S

- Résolution numérique dans le cas $V = 0$

Comparer avec les solutions théoriques

⇒ *Validation expérimentale (mais partielle) du code*

- Résolution numérique dans les autres cas de potentiel

Discontinuité finie des potentiels

⇒ Solution φ de classe \mathcal{C}^1

⇒ φ et φ' continues (ainsi que N)

⇒ Y continue

⇒ Résoudre l'équation différentielle sur chaque morceau \mathcal{C}^1
en partant de la valeur finale du morceau précédent

Ordre de grandeur des valeurs numériques

(en unités du Système International)

- ▶ $L : 10^{-9} \text{ m (nm)}$
- ▶ $E : 10^{-19} \text{ J (eV)}$
- ▶ $m : 10^{-30} \text{ kg (masse d'un électron)}$
- ▶ $\hbar \simeq 1,05 \times 10^{-34} \text{ Js}$

**Il est numériquement préférable de manipuler
des quantités dont l'ordre de grandeur est
proche de 1.**

Pourquoi?

```
printf("%e\n", (1.0 + 1.0e-16) - 1.0 ) ;  
printf("%e\n", (1.0e16 + 1.0 ) - 1.0e16) ;
```

→ 0.000000e+00 !!!

Faire les calculs dans d'autres unités plus adaptées

- ▶ L : nm
- ▶ E : eV
- ▶ temps : choix arbitraire
(on étudie ici un phénomène *stationnaire*)
- ▶ m : en fonction des unités utilisées pour L , E et le temps
⇒ *choisir l'unité de temps afin que la masse d'un électron ait un ordre de grandeur proche de 1*

Attention !

- ▶ Lors des calculs, il faut aussi convertir \hbar !
- ▶ Dans le rapport, il pourra être nécessaire de revenir dans les unités SI.