title

Remi

2025

0.1 Comment résoudre problème de valeurs propres avec Galerkin.

Soit H, l'opérateur Hamiltonien, on veut résoudre l'équation de Schrödinger.

$$H\psi = E\psi$$

Soit ϕ_i, les fonctions test et de base (orthonormale, ~complete). On cherche une solution ψ_N de la forme

$$\psi_N = \sum_{n=0}^{N} c_n \phi_n$$

On souhaite minimiser l'équation résiduelle

$$R(x) = H\psi_N - E\psi_N$$

Le développement spectral de l'équation résiduelle

$$R = \sum_{n=0}^{N} r_n \phi_n$$

Par orthogonalité, on obtient

$$r_n = (\phi_n, R)$$

En utilisant la méthode de Galerkin, on imposant $r_n = 0, \quad n = 0, \ldots, N$, on peut simplifier

$$(\phi_i, H\phi_j - E\phi_j)(a_i) = (0)$$

Cela donne une équation homogène. On cherche les solutions non-triviales afin de calculer les niveaux d'énergie (valeurs propres). En posant,

$$A_{ij} = (\phi_i, H\phi_j - E\phi_j)$$

on cherche E tel que

$$\det(A) = 0$$

0.2 Théorie équation de Schrödinger en 1D

L'équation de Schrödinger en 1 dimension

$$H\psi = E\psi$$

où H est le Hamiltonien défini avec un potentiel $V(x)$ comme

$$H = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

On étudie dans notre cas, on étudie l'oscillateur harmonique quantique, ainsi

$$H = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2$$

Les états propres, à paramètre près sont

$$E_n = n + \frac{1}{2}$$

0.2.1 Fonctions propres

Les fonctions propres sont les fonctions d'Hermite généralisés.

$$\psi_n(x) = \frac{e^{x^2/2}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x)$$

Travaillons avec une légère modification comme fonction de base

$$\varphi_n(x) = \frac{e^{-(\beta x)^2/2}}{\sqrt{\beta 2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\beta x)$$

On peut exploiter la propriété des polynômes d'Hermite

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n H_m e^{-x^2} \, dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm}$$

Ainsi,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n \varphi_m \, dx = \delta_{nm}$$

0.2.2 Calcul analytique

Effet du hamiltonien On veut calculer

$$\begin{aligned}(\varphi_i, H\varphi_j - E\varphi_j) &= (\varphi_i, H\varphi_j) - (\varphi_i, E\varphi_j) \\ &= (\varphi_i, H\varphi_j) - E\delta_{ij}\end{aligned}$$

Commençons par les dérivées de φ_i. On pose $N_i = \frac{1}{\sqrt{\beta^i_2 i! \sqrt{\pi}}}$ et $z = \beta x$

$$\begin{aligned}(N_i e^{-(z)^2} H_i(z))' &= N_i(-\beta z e^{-z^2/2} H_i(z) + \beta e^{-z^2/2} H_i'(z)) \\ &= N_i \beta e^{-z^2/2}(H_i'(z) - zH_i(z)) \\ \left[N_i e^{-z^2} H_i(z)\right]'' &= \beta^2 N_i e^{z^2/2}[H_i''(z) 2z H_i'(z) + (z^2 1) H_i(z)]\end{aligned}$$

Avec l'identité

$$H_n''(z) = 2zH_n'(z) - 2nH_n(z)$$

On abouti à

$$\varphi_i'' = \beta^2 N_i e^{-z^2/2}(z^2 - 2i - 1)H_i(z)$$

$$\varphi_i'' = \beta^2(\beta^2 x^2 - 2i - 1)\varphi_i$$

On a

$$\begin{aligned}H\varphi_j &= -\frac{1}{2}\frac{d^2\varphi_j}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2\varphi_j \\ &= -\frac{1}{2}\beta^2((\beta^2 - 1)x^2 - 2j - 1)\varphi_j \\ &= \frac{1}{2}((1 - \beta^4)x^2 + \beta^2(1 + 2j))\varphi_j\end{aligned}$$

Calcul de l'intégrale Le calcul analytique du Hamiltonien permet de calculer analytiquement les intégrales de la méthode de Galerkin. On exploite l'orthonormalité des fonctions de bases. Cependant, on doit travailler un peu pour le terme multiplié par x^2.

Identité On a

$$xH_n(x) + \frac{1}{2}H_{n+1}(x) + nH_{n-1}(x)$$

On peut aussi l'appliquer aux fonctions d'Hermite ($\beta = 1$) pour aboutir à

$$x\psi_n(x) = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x)$$

Comme les fonctions d'Hermite généralisées peuvent s'écrire comme $\varphi_n^\beta(x) = \frac{1}{\sqrt{\beta}}\psi(\beta x)$ On a

$$\begin{aligned}(\varphi_i, H\varphi_j) &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i H\varphi_j \, dx \\ &= \frac{1}{2}(1 - \beta^4)\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i\varphi_j x^2 \, dx + \frac{1}{2}\beta^2(1 + 2j)\delta_{ij}\end{aligned}$$