Nom étudiant: Samuel Ogulluk
Numéro étudiant: 21501479

LU3PY126 FOAD

TP 4 Valeurs propres et vecteurs propres : Résolution de l'équation de Schrödinger par un calcul de différences finies

---

Table des matières

Introduction

Au cours de ce TP, nous nous intéresserons à l'utilisation de méthodes formelles pour résoudre des problemes de mécanique quantique.
Ainsi, nous verrons notamment les point suivants :

- ➔ Etude de trois formes de potentiels
- ➔ Résolution de l'équation de schröedinger stationnaire par méthode des éléments finis
- ➔ Etude des Energies propres et fonctions d'ondes associées à un potentiel
- ➔ Comparaison de fonctions d'ondes

Les codes présentés sont en C++ et Python pour la visualisation et sont joint à ce compte-rendu ainsi que disponibles dans le dépôt suivant : Dépôt Github

Question 1 Formes des potentiels

On commence par s'intéresser à trois potentiels tels que soit $x \in [-L/2, L/2]$:

1. Un puit de potentiel :

$$V(x) = 0$$

2. Un potentiel harmonique :

$$V(x) = \frac{m}{2}\omega^2 x^2$$

3. Un double-puit de potentiel :

$$V(x) = a(x - r_1)(x - r_2)(x - r_3)(x - r_4)$$

On a donc 2 fonctions de type (double $\mapsto$ double) pour les deux premiers potentiels.

Pour le double-puit de potentiel, on vient ajouter les coefficients en argument de la fonction.

TP4/q1q2potentiels.cpp

```
3  double V_puits(double) {
4      return 0.0;
5  }
6
7  double V_harmonique(double x) {
8      return x * x/2; // k=1, m=1 -> omega^2 = 1
9  }
10
11 double V_double(double x, double a, double r1, double
   ↪  r2, double r3, double r4) {
12     return a * (x - r1) * (x - r2) * (x - r3) * (x -
       ↪  r4);
13 }
```

Question 2 Visualisation des potentiels étudiés

On peut ainsi visualiser les potentiels obtenus à l'aide de Python et matplotlib :

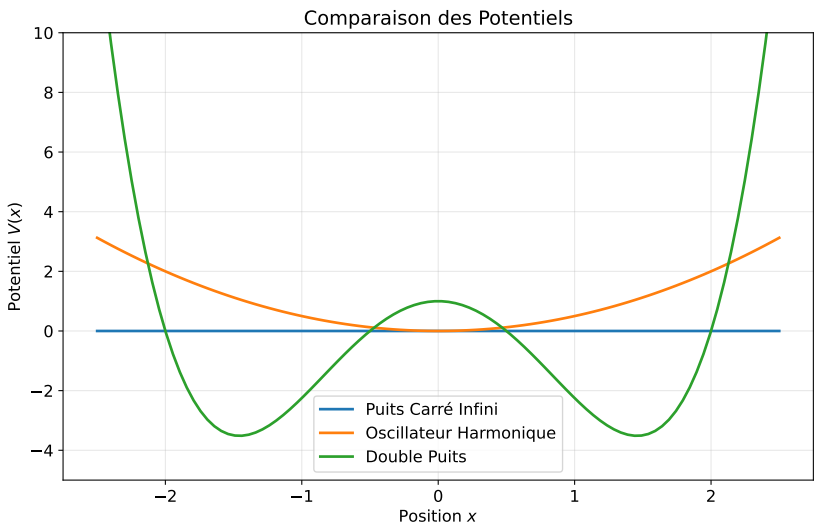


FIGURE 1 – Potentiels en fonction de x

On constate ainsi que les potentiels sont tous pairs et bien défini sur $[-L/2; L/2]$.

TP4/q1q2potentiels.cpp

```cpp
void solve_q1_q2_potentiels() {
    const int n = 100;
    const double L = 5.0;
    const double dx = L / (n - 1);

    const double a = 1.0;
    const double r1 = -2.0, r2 = -0.5, r3 = 0.5, r4 = 2.0;

    ofstream fichier("resultats/q1_q2_potentials.res");

    for (int i = 0; i < n; i++) {
        const double x = -L / 2.0 + i * dx;
        fichier << x << " "
                << V_puits(x) << " "
                << V_harmonique(x) << " "
                << V_double(x, a, r1, r2, r3, r4) << endl;
    }

    fichier.close();
    cout << "Fichier q1_q2_potentials.res généré." << endl;
}
```

Question 3 Résolution par MEF

On vient maintenant discrétiser l'équation de Schrödinger stationnaire via une MEF. On a ainsi transformé le système en une équation matricielle aux valeurs propres pour trouver numériquement les énergies et les fonctions d'onde.

Sens physique de cette transformation :

— La probabilité de trouver la particule en dehors de cet espace est nulle.

Conséquence sur le potentiel effectif :

— Ajout de murs de potentiel infinis aux bornes du domaine

— L'extension de la fonction d'onde est confinée et centrée dans l'intervalle

Question 4 Puit infini

On vient reprendre les fonctions de la question 1 et définir une fonction potentiel que l'on changera au besoin.

Question 5 Simulation

On vient maintenant créer un programme permettant de déterminer numériquement les énergies propres et fonctions d'ondes associées à un potentiel. Ainsi, le programme procède comme suit :

1. **Discrétisation et initialisation** : Définir l'intervalle $[-L/2, L/2]$ divisé en n segments de longueur δx. Initialiser les vecteurs x et V (via `VectorXd`) avec les paramètres $L = 5$ et $n = 100$.
2. **Construction de la matrice** : Instancier la matrice H de taille $n \times n$ (initialisée à zéro) et remplir les éléments diagonaux et sous-diagonaux.
3. **Diagonalisation et export** : Calculer les valeurs et vecteurs propres, puis écrire les résultats dans des fichiers dédiés.

TP4/q6puits.cpp

```
3  void save_puits_results(int n, double L, const
   ↪  VectorXd& x, const VectorXd& energies, const
   ↪  MatrixXd& ondes) {
4      VectorXd energies_theo(n);
5      for (int p = 0; p < n; p++) {
6          double k = M_PI * (p + 1) / L;
7          energies_theo[p] = k * k;
8      }
9
10     std::ofstream
        ↪  f_val("resultats/q6_puits_energies.res");
11     MatrixXd E_out(n, 2);
12     E_out.col(0) = energies; E_out.col(1) =
        ↪  energies_theo;
13     f_val << E_out; f_val.close();
14
15     std::ofstream
        ↪  f_vec("resultats/q6_puits_ondes.res");
16     MatrixXd R(n, n + 1);
17     R.col(0) = x; R.block(0, 1, n, n) = ondes;
18     f_vec << R; f_vec.close();
19 }
```

TP4/q6puits.cpp

```cpp
void solve_q6_puits() {
    int n = 100; double L = 5.0;
    double dx = L / (n - 1);
    double idx2 = 1.0 / (dx * dx);

    VectorXd x(n); MatrixXd H(n, n); H.setZero();
    for (int i = 0; i < n; i++) {
        x[i] = -L / 2.0 + i * dx;
        H(i, i) = 2.0 * idx2 + V_puits(x[i]);
        if (i > 0) H(i, i - 1) = -idx2;
        if (i < n - 1) H(i, i + 1) = -idx2;
    }

    VectorXd energies; MatrixXd ondes;
    solve(H, energies, ondes);
    save_puits_results(n, L, x, energies, ondes / sqrt(dx));
}
```

Question 6 Énergies propres numériques

On simule ainsi avec $n = 100$ et $L = 5$ et sachant que dans le cas du puits de potentiel, les énergies propres ont pour expression :

$$E_p^{\text{theo}} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi(p+1)}{L}\right)^2$$

On constate ainsi que la simulation parvient très bien à décrire la dynamique des premières énergies propres, mais vois son erreur augmenter drastiquement pour les ordres plus élevés. Ceci peut s'expliquer par

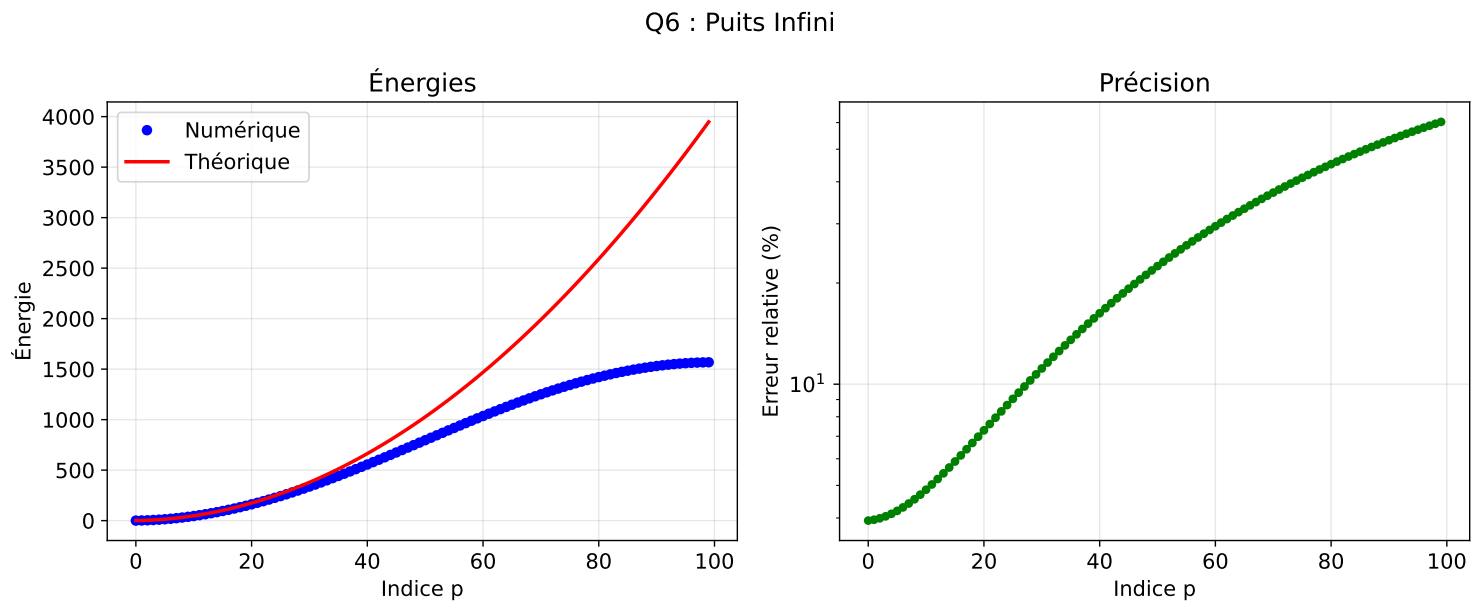


FIGURE 1 – Energies propres théoriques et prédites et précision de la simulation

Question 7 Détermination des fonctions d'ondes

On vient ensuite tracer les premières fonctions d'ondes. Pour ce faire, on commence par enregistrer les fonctions d'ondes :

TP4/q6puits.cpp

```
15      std::ofstream
        ↪  f_vec("resultats/q6_puits_ondes.res");
16      MatrixXd R(n, n + 1);
17      R.col(0) = x; R.block(0, 1, n, n) = ondes;
18      f_vec << R; f_vec.close();
```

Où, "ondes" est

TP4/q6puits.cpp

```
34      VectorXd energies; MatrixXd ondes;
35      solve(H, energies, ondes);
36      save_puits_results(n, L, x, energies, ondes /
        ↪  sqrt(dx));
```

Puis on trace à l'aide de matplotlib le résultat.

On remarque que le résultat est correspond aux attendus, la fonction d'onde s'annule toujours aux extrémités et s'annule p fois entre les deux.

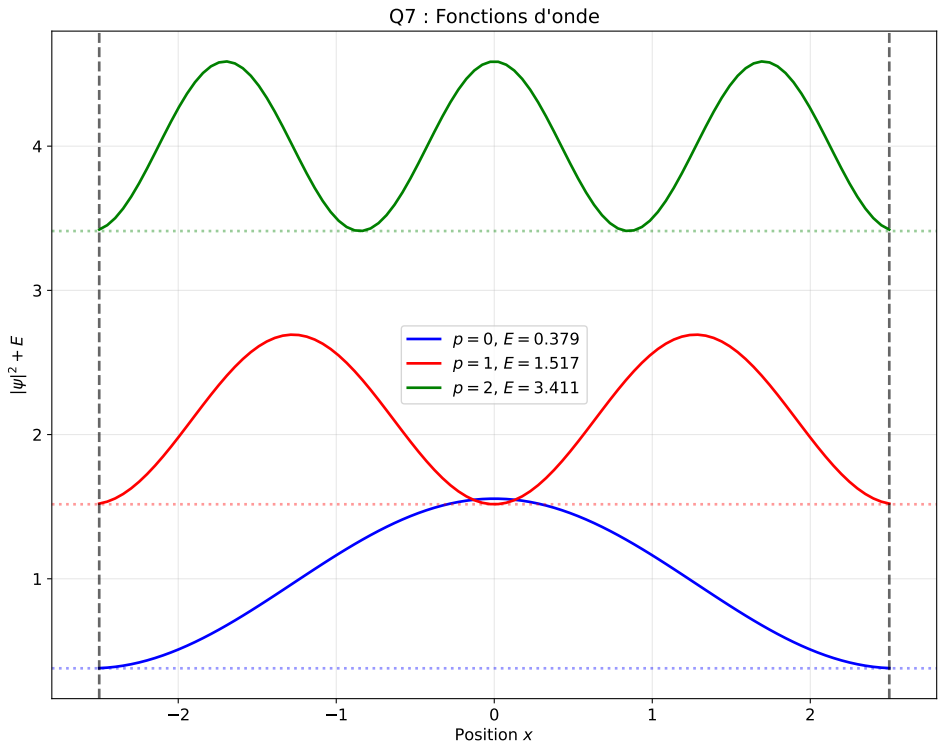


FIGURE 2 – Fonctions d'ondes associées au puit de potentiel

Question 8 Comparaison des résultats obtenus

On peut ensuite tracer une comparaison entre les fonctions d'ondes numériques et leur valeurs théoriques (dans ce rare cas où l'expression analytique est connue) :

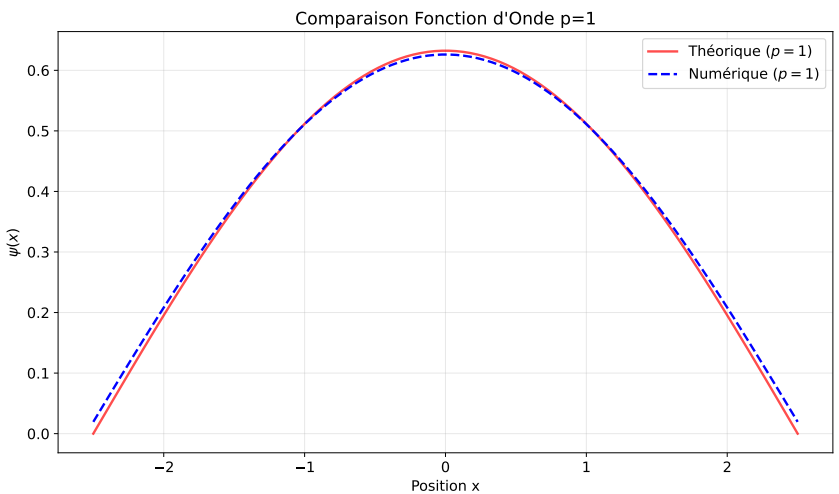


FIGURE 2 – Fonctions d'ondes pour p=1

On constate ainsi que pour p=1, les erreurs sont très faibles, la dynamique est respectée.

Cependant, pour un p plus élevé, ici p=55 on constate que la fonction d'onde théorique et numériques présentent de larges différences :

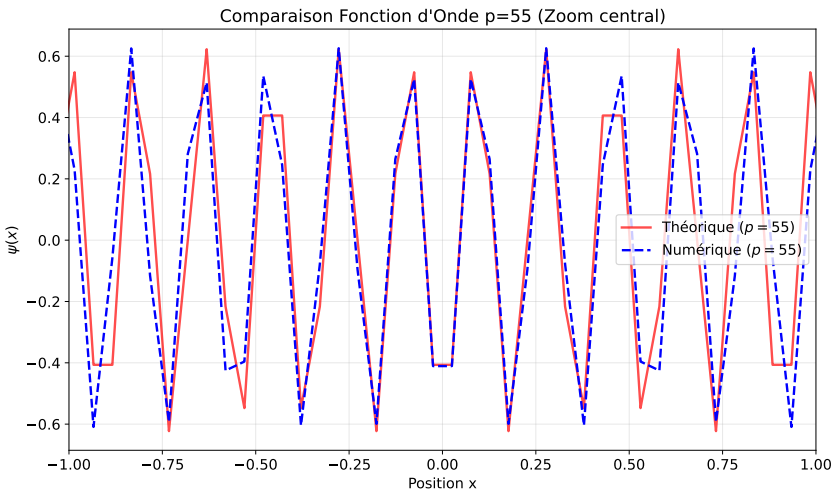


FIGURE 3 – Fonctions d'ondes pour p=55

Une des explications possible pourrait être analogique au critère de Shannon-Nyquist, ici, pour des ordres trop élevés, l'échantillonnage pourrait ne pas être suffisant.

Question 9 Energie propre d'un potentiel harmonique

On s'intéresse maintenant au potentiel harmonique, en venant reproduire les simulations précédentes. On trace donc les énergies obtenues, afin de les comparer à leur valeur théoriques :

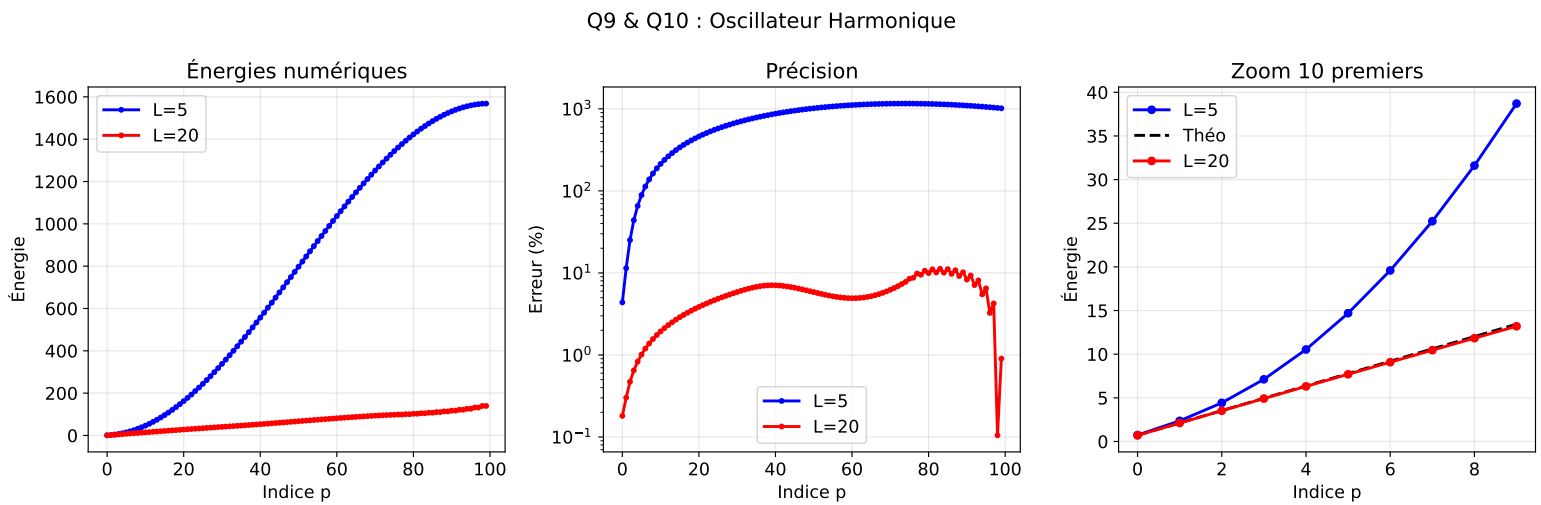


FIGURE 3 – Energies propres obtenues en fonction de l'indice p

On constate ainsi qu'encore une fois, plus p est petit, plus la simulation est correcte. Cependant, on constate que l'erreur présente un plateau, voire diminue lorsque p est très important .

TP4/q9harmonique.cpp

```cpp
void save_harm_results(double L, int n, double dx, const VectorXd& x, const VectorXd& energies, const MatrixXd& ondes) {
    VectorXd eth(n);
    double hbar_w = sqrt(2.0);
    for (int p = 0; p < n; p++) eth[p] = (p + 0.5) * hbar_w;

    string suff = "_n" + to_string(n) + "_L" + to_string((int)L);
    ofstream f_val(("resultats/q9_harm_energies" + suff + ".res").c_str());
    MatrixXd E_out(n, 2);
    E_out.col(0) = energies; E_out.col(1) = eth;
    f_val << E_out; f_val.close();

    ofstream f_vec(("resultats/q9_harm_ondes" + suff + ".res").c_str());
    MatrixXd R(n, n + 1);
    R.col(0) = x; R.block(0, 1, n, n) = ondes;
    f_vec << R; f_vec.close();

    ofstream f_pot(("resultats/q9_harm_pot" + suff + ".res").c_str());
    for(int i=0; i<n; i++) f_pot << x[i] << " " << V_harmonique(x[i]) << endl;
    f_pot.close();
}
```

TP4/q9harmonique.cpp

```cpp
void solve_harmonique_pour_L(double L, int n) {
    double dx = L / (n - 1), idx2 = 1.0 / (dx * dx);
    VectorXd x(n); MatrixXd H(n, n); H.setZero();

    for (int i = 0; i < n; i++) {
        x[i] = -L / 2.0 + i * dx;
        H(i, i) = 2.0 * idx2 + V_harmonique(x[i]);
        if (i > 0) H(i, i - 1) = -idx2;
        if (i < n - 1) H(i, i + 1) = -idx2;
    }

    VectorXd energies; MatrixXd ondes;
    solve(H, energies, ondes);
    save_harm_results(L, n, dx, x, energies, ondes / sqrt(dx));
}

void solve_q9_harmonique() {
    solve_harmonique_pour_L(5.0, 100);
    solve_harmonique_pour_L(20.0, 100);
}
```

Question 10 Etude de la convergence algorithmique

On s'intéresse ensuite à l'effet de L sur les énergies. Ainsi, on peut constater sur les figures 3 et 4, que plus L est élevé, plus la simulation parvient à décrire précisément les énergies.

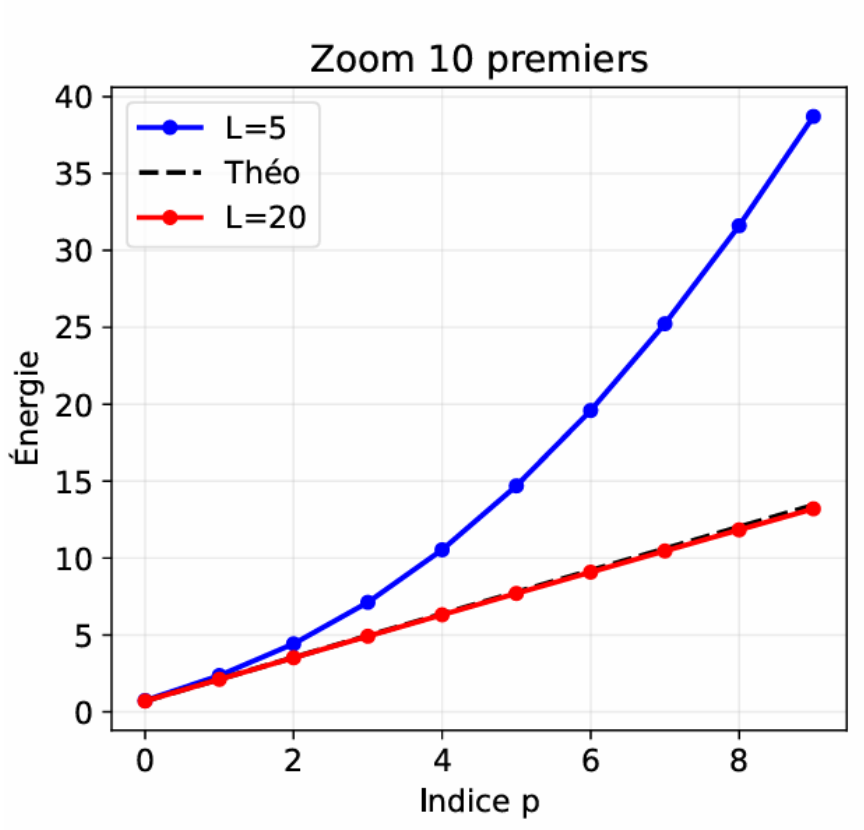


FIGURE 4 – Énergies en fonction de p

Question 11 Potentiel harmonique et fonction d'onde

On vient maintenant s'intéresser au lien entre potentiel, ordre d'excitation et fonction d'onde. On constate ainsi les points suivants :

— La largeur augmente avec p car les points de rebroussement classiques, où $V(x) = E_p$, s'éloignent de l'origine à mesure que l'énergie augmente.

— Pour $p = 0$, la densité est maximale au centre, alors que pour p élevé, la particule passe plus de temps près des parois du potentiel, se rapprochant du comportement classique.

— La fonction d'onde au carré ne s'annule pas aux limites du potentiel mais décroît exponentiellement. La probabilité de présence dans la zone classiquement interdite n'est donc pas nulle, c'est l'effet tunnel .

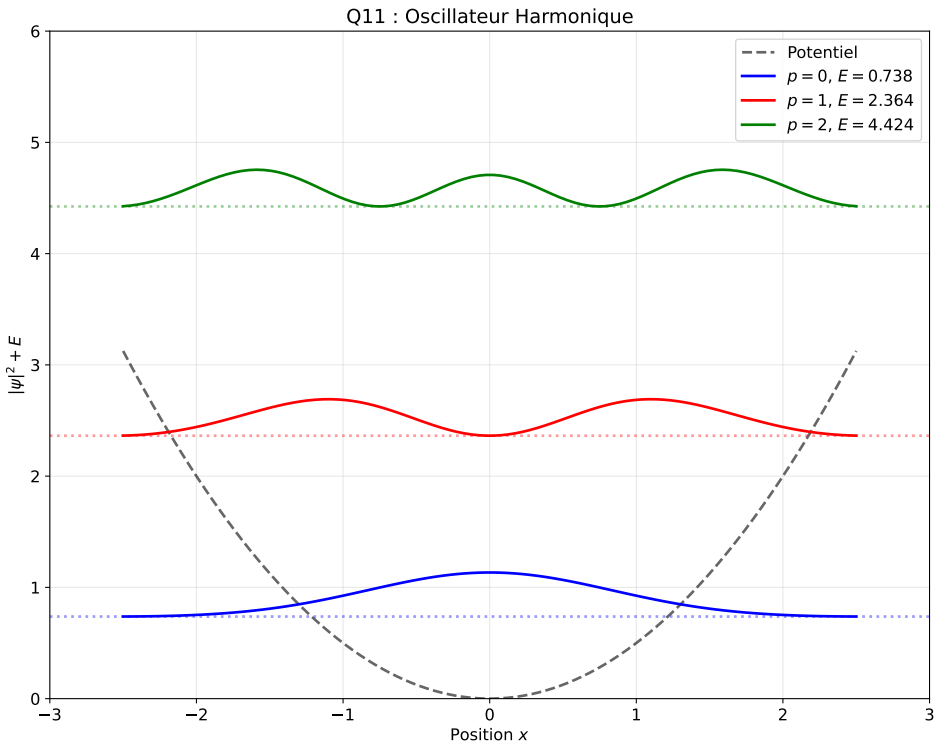


FIGURE 5 – Potentiel harmonique et fonctions d'ondes

Question 12 Energie propres associées au double puit

On s'intéresse maintenant à un double-puit de potentiel :

$$V(x) = (x+2)(x+0.5)(x-0.5)(x-2)$$

Un tel potentiel peut modéliser une particule entre deux positions d'équilibre stables.

- Inversion de NH_3, transfert de protons (ADN) et qubits supraconducteurs.
- Les niveaux E_0 (symétrique) et E_1 (antisymétrique) forment un doublet serré, illustrant la levée de dégénérescence par effet tunnel.
- Analogue aux orbitales liantes/antiliantes, avec une délocalisation de la particule sur les deux puits malgré la barrière.

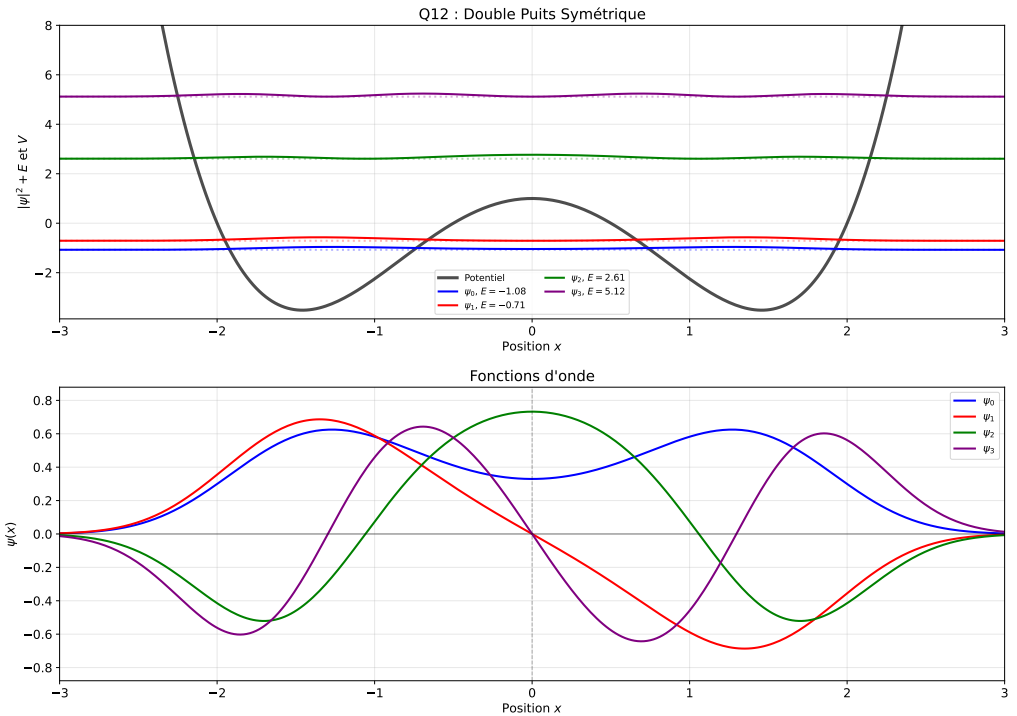


FIGURE 6 – Double-puit de de potentiel et fonctions d'ondes associées

TP4/q12doublepuits.cpp

```cpp
void save_double_results(const VectorXd& x, const VectorXd& energies, const MatrixXd& ondes, string label, double a, double r1, double r2, double r3, double r4) {
    string suff = "_" + label;
    ofstream f_e(("resultats/q12_double_energies" + suff + ".res").c_str());
    f_e << energies; f_e.close();

    ofstream f_o(("resultats/q12_double_ondes" + suff + ".res").c_str());
    MatrixXd R(x.size(), x.size() + 1);
    R.col(0) = x; R.block(0, 1, x.size(), x.size()) = ondes;
    f_o << R; f_o.close();

    ofstream f_p(("resultats/q12_double_pot" + suff + ".res").c_str());
    for(int i=0; i<x.size(); i++) f_p << x[i] << " " << V_double(x[i], a, r1, r2, r3, r4) << endl;
    f_p.close();
}
```

TP4/q12doublepuits.cpp

```cpp
void solve_double_puits_config(int n, double L, double a, double r1, double r2, double r3, double r4, string label) {
    double dx = L / (n - 1), idx2 = 1.0 / (dx * dx);
    VectorXd x(n); MatrixXd H(n, n); H.setZero();

    for (int i = 0; i < n; i++) {
        x[i] = -L / 2.0 + i * dx;
        H(i, i) = 2.0 * idx2 + V_double(x[i], a, r1, r2, r3, r4);
        if (i > 0) H(i, i - 1) = -idx2;
        if (i < n - 1) H(i, i + 1) = -idx2;
    }

    VectorXd energies; MatrixXd ondes;
    solve(H, energies, ondes);
    save_double_results(x, energies, ondes / sqrt(dx), label, a, r1, r2, r3, r4);
}

void solve_q12_double_puits() {
    int n = 1000; double L = 20.0;
    solve_double_puits_config(n, L, 1.0, -2.0, -0.5, 0.5, 2.0, "q12_sym");
    solve_double_puits_config(n, L, 400.0, -2.0, -0.5, 0.5, 2.0, "q13_deep");
    solve_double_puits_config(n, L, 1.0, -2.0, -0.5, 0.0, 2.0, "q14_asym");
}
```

Question 13 Double puit symétrique profond

L'augmentation du paramètre a modifie radicalement le comportement du système :

- Les énergies E_0, E_1 et E_2, E_3 apparaissent désormais par paires quasi dégénérées. La barrière est si haute que l'effet tunnel est fortement réduit.
- Les fonctions d'onde sont beaucoup plus étroites et confinées au fond des puits. Elles se comportent localement comme des oscillateurs harmoniques indépendants.
- Les valeurs d'énergie sont nettement plus basses (très négatives) et l'écart entre les doublets est plus grand que dans le cas $a = 1$.

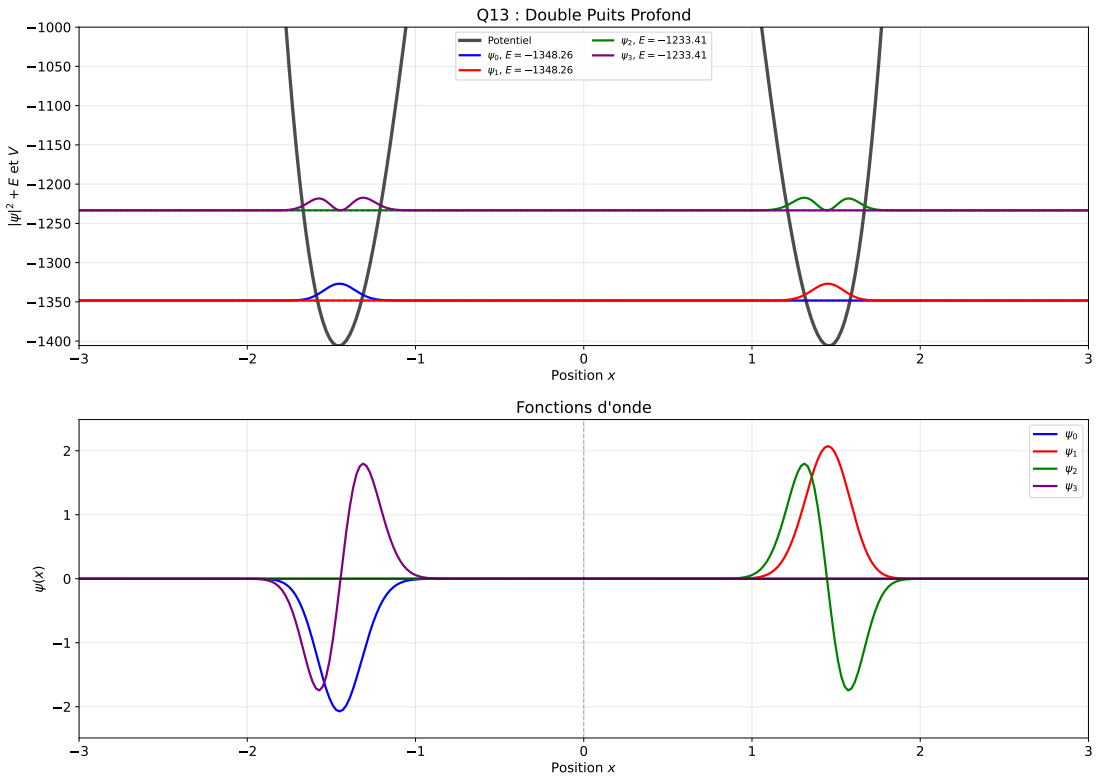


FIGURE 7 – Puis de potentiel profond et fonctions d'ondes associées

Question 14 Double puit symétrique dissymétrique

En déplaçant la racine r_3 à 0, on obtient un double puits dissymétrique. L'observation des résultats montre les points suivants :

- Les fonctions d'onde ne présentent plus de symétrie par rapport à l'origine. La parité n'est plus un bon nombre quantique pour ce système.
- Les états de plus basse énergie se concentrent dans le puits le plus bas. On observe une transition d'un état délocalisé (cas symétrique) vers un état plus localisé.
- L'écart entre E_0 et E_1 augmente significativement. La structure en doublets serrés disparaît car les puits ne sont plus résonnants entre eux.

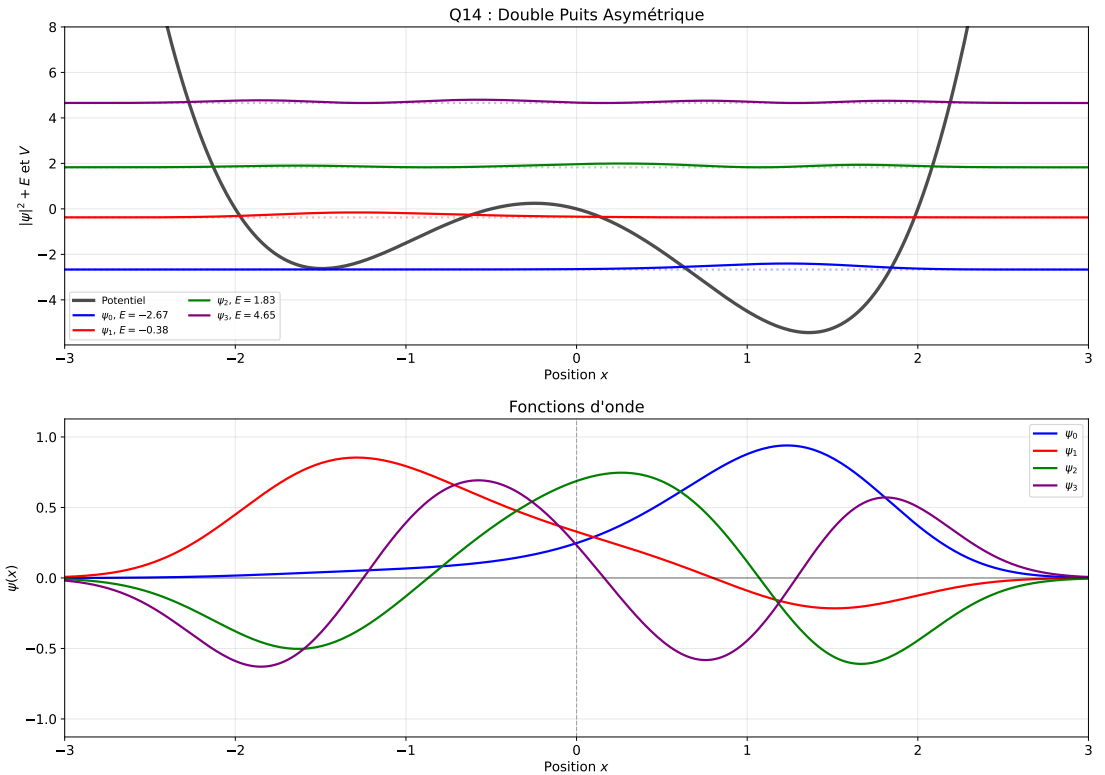


FIGURE 8 – fonctions d'ondes pour un puit dissymétrique

Conclusion

- Energie :

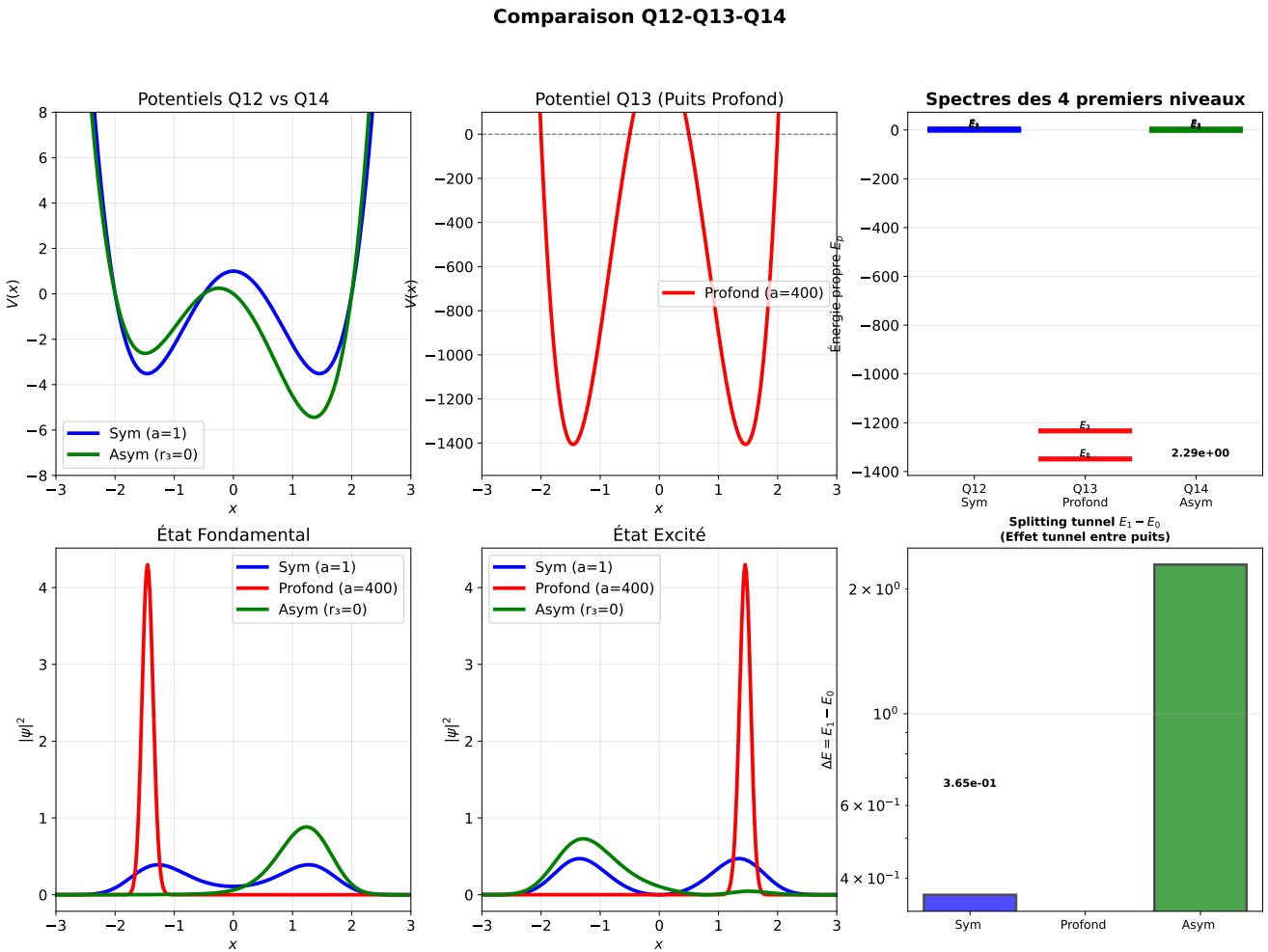
  E_{PP} est très bas tandis que E_{sym} et E_{assym} se situent près de 0.

- Localisation :

  V_{assym} concentre la particule dans le puits le plus profond, Pour V_{sym} la présence est partagée sur les deux puits.

- Effet tunnel :

  $\Delta E = E_1 - E_0$ maximale pour le système asymétrique $Q14$ et quasi nul pour le puit profond.



Annexe

TP4/tp4.cpp

```cpp
#include "tp4.hpp"

void solve(MatrixXd &z, VectorXd &d, MatrixXd &v){
    SelfAdjointEigenSolver<MatrixXd> eigensolver(z);
    if (eigensolver.info() != Success){
        cout << "ERROR in SelfAdjointEigenSolver" << endl;
        abort();
    }
    d = eigensolver.eigenvalues();
    v = eigensolver.eigenvectors();
}

int main() {
    std::cout << "Lancement des simulations" << std::endl;
    solve_q1_q2_potentiels();
    solve_q6_puits();
    solve_q9_harmonique();
    solve_q12_double_puits();

    std::cout << "Terminé" << std::endl;
    return 0;
}
```

TP4/tp4.hpp

```cpp
#ifndef TP4_HPP
#define TP4_HPP

#include <iostream>
#include <fstream>
#include <vector>
#include <cmath>
#include <string>
#include ".eigen-5.0.0/Eigen/Dense"

using namespace std;
using namespace Eigen;

// Fonction de résolution des valeurs propres
void solve(MatrixXd &z, VectorXd &d, MatrixXd &v);

// Potentiels
double V_puits(double x);
double V_harmonique(double x);
double V_double(double x, double a, double r1, double r2, double r3, double r4);

// Fonctions de résolution par question
void solve_q1_q2_potentiels();
void solve_q6_puits();
void solve_q9_harmonique();
void solve_q12_double_puits();
```

Le fichier visualisation.py est disponible dans le dépôt indiqué plus haut (d'une longueur de 300 lignes, il prendrait trop de place en annexe de ce TP).