

**Université du Burundi**



**Faculté des Sciences**

**T.P. DE CALCUL INTENSIF**

# **Méthode des différences finies appliquée à l'équation de Schrödinger**

**Présenté par :**

- 👉 BASHIRAHISHIZE Aline
- 👉 KATUBAYEMWO Fridolin
- 👉 NDAYISENGA Pascal
- 👉 NDAYISHIMIYE Samuel
- 👉 NGABO Bahizire Antoine
- 👉 NIYONKURU Janvier
- 👉 RUMEGESHI Mamert

Étudiants en Master 1 Sciences Mathématiques et Physiques, 2022-2023

# Plan de l'exposé

## 1 Méthode des différences finies

- Définitions et intérêts de la méthode
- Opérateurs de différences finies
- Notation indicielle - cas 1D
- Schéma d'ordre supérieur
- Dérivée d'ordre supérieur
- Généralisation de la notation indicielle
- Résolution des équations différentielles par la méthode de différence finie

## 2 Application de la MDF à l'équation de Schrödinger

- Équation de Schrödinger 1D
- Équation de Schrödinger 2D
- Équation de Schrödinger 3D

## 3 Conclusion

# Plan de l'exposé

## 1 Méthode des différences finies

- Définitions et intérêts de la méthode
- Opérateurs de différences finies
- Notation indicielle - cas 1D
- Schéma d'ordre supérieur
- Dérivée d'ordre supérieur
- Généralisation de la notation indicielle
- Résolution des équations différentielles par la méthode de différence finie

## 2 Application de la MDF à l'équation de Schrödinger

- Équation de Schrödinger 1D
- Équation de Schrödinger 2D
- Équation de Schrödinger 3D

## 3 Conclusion

# Définitions

## Définition

La méthode des différences finies est l'une des techniques de recherche de solution approchée d'ÉDPs. Elle repose sur deux notions :

- la discrétisation des opérateurs de dérivation ou de différentiation et
- la convergence du schéma numérique ainsi obtenu

## Définition

La MDF est basée sur la technique du développement en séries de Taylor qui permet d'approximer la valeur d'une fonction en un point donné si on connaît sa valeur ainsi que toutes ses dérivées en un point voisin. Cette technique permet de développer des schémas pour remplacer les dérivées premières et secondes d'une fonction.

Une différence finie est une expression de la forme :

$$\Delta u(x) = u(x) - u'(x)$$

# Définitions

## Définition

La méthode des différences finies est l'une des techniques de recherche de solution approchée d'ÉDPs. Elle repose sur deux notions :

- la discrétisation des opérateurs de dérivation ou de différentiation et
- la convergence du schéma numérique ainsi obtenu

## Définition

La MDF est basée sur la technique du développement en séries de Taylor qui permet d'approximer la valeur d'une fonction en un point donné si on connaît sa valeur ainsi que toutes ses dérivées en un point voisin. Cette technique permet de développer des schémas pour remplacer les dérivées premières et secondes d'une fonction.

Une différence finie est une expression de la forme :

$$\Delta u(x) = u(x) - u'(x)$$

# Définitions

## Définition

La méthode des différences finies est l'une des techniques de recherche de solution approchée d'ÉDPs. Elle repose sur deux notions :

- la discrétisation des opérateurs de dérivation ou de différentiation et
- la convergence du schéma numérique ainsi obtenu

## Définition

La MDF est basée sur la technique du développement en séries de Taylor qui permet d'approximer la valeur d'une fonction en un point donné si on connaît sa valeur ainsi que toutes ses dérivées en un point voisin. Cette technique permet de développer des schémas pour remplacer les dérivées premières et secondes d'une fonction.

Une différence finie est une expression de la forme :

$$\Delta u(x) = u(x) - u'(x)$$

# Opérateurs de différences finies

Notons  $u_i = u(x_i)$ , la valeur de la fonction  $u(x)$  au point  $x_i$ .

## Opérateur de différence avant

$$\Delta u(x) = u(x+h) - u(x)$$

$$\Delta u(x_i) = u(x_{i+1}) - u(x_i)$$

$$\Delta u_i = u_{i+1} - u_i$$

## Opérateur de différence arrière

$$\nabla u(x) = u(x) - u(x-h)$$

$$\nabla u(x_i) = u(x_i) - u(x_{i-1})$$

$$\nabla u_i = u_i - u_{i-1}$$

## Opérateur de différence centrée

$$\delta u(x) = u(x+h) - u(x-h)$$

$$\delta u(x_i) = u(x_{i+1}) - u(x_{i-1})$$

$$\delta u_i = u_{i+1} - u_{i-1}$$

# Opérateurs de différences finies

Notons  $u_i = u(x_i)$ , la valeur de la fonction  $u(x)$  au point  $x_i$ .

## Opérateur de différence avant

$$\Delta u(x) = u(x + h) - u(x)$$

$$\Delta u(x_i) = u(x_{i+1}) - u(x_i)$$

$$\Delta u_i = u_{i+1} - u_i$$

## Opérateur de différence arrière

$$\nabla u(x) = u(x) - u(x - h)$$

$$\nabla u(x_i) = u(x_i) - u(x_{i-1})$$

$$\nabla u_i = u_i - u_{i-1}$$

## Opérateur de différence centrée

$$\delta u(x) = u(x + h) - u(x - h)$$

$$\delta u(x_i) = u(x_{i+1}) - u(x_{i-1})$$

$$\delta u_i = u_{i+1} - u_{i-1}$$



# Opérateurs de différences finies

Notons  $u_i = u(x_i)$ , la valeur de la fonction  $u(x)$  au point  $x_i$ .

## Opérateur de différence avant

$$\Delta u(x) = u(x + h) - u(x)$$

$$\Delta u(x_i) = u(x_{i+1}) - u(x_i)$$

$$\Delta u_i = u_{i+1} - u_i$$

## Opérateur de différence arrière

$$\nabla u(x) = u(x) - u(x - h)$$

$$\nabla u(x_i) = u(x_i) - u(x_{i-1})$$

$$\nabla u_i = u_i - u_{i-1}$$

## Opérateur de différence centrée

$$\delta u(x) = u(x + h) - u(x - h)$$

$$\delta u(x_i) = u(x_{i+1}) - u(x_{i-1})$$

$$\delta u_i = u_{i+1} - u_{i-1}$$

# Opérateurs de différences finies

Notons  $u_i = u(x_i)$ , la valeur de la fonction  $u(x)$  au point  $x_i$ .

## Opérateur de différence avant

$$\Delta u(x) = u(x + h) - u(x)$$

$$\Delta u(x_i) = u(x_{i+1}) - u(x_i)$$

$$\Delta u_i = u_{i+1} - u_i$$

## Opérateur de différence arrière

$$\nabla u(x) = u(x) - u(x - h)$$

$$\nabla u(x_i) = u(x_i) - u(x_{i-1})$$

$$\nabla u_i = u_i - u_{i-1}$$

## Opérateur de différence centrée

$$\delta u(x) = u(x + h) - u(x - h)$$

$$\delta u(x_i) = u(x_{i+1}) - u(x_{i-1})$$

$$\delta u_i = u_{i+1} - u_{i-1}$$

# Relation avec la dérivée d'une fonction

## Opérateurs de différences finies et dérivée d'une fonction

$$\begin{aligned}
 u'(x) &= \lim_{h \rightarrow 0} \underbrace{\frac{u(x+h) - u(x)}{h}}_{\text{avant}} = \lim_{h \rightarrow 0} \underbrace{\frac{u(x) - u(x-h)}{h}}_{\text{arrière}} = \\
 &\lim_{h \rightarrow 0} \underbrace{\frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h}}_{\text{centré}} \\
 u'(x) &\approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h} = \frac{\Delta u(x)}{h} \\
 u'(x) &\approx \frac{u(x) - u(x-h)}{h} = \frac{\nabla u(x)}{h} \\
 u'(x) &\approx \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} = \frac{\delta u(x)}{2h}
 \end{aligned}$$

# Notation indicielle - cas 1D

Considérons un cas monodimensionnel où l'on souhaite déterminer une grandeur  $u(x)$  sur l'intervalle  $[0,1]$ . La recherche d'une solution discrète de la grandeur  $u$  amène à constituer un maillage de l'intervalle de définition. On considère un maillage (ou grille de calcul) composé de  $N + 1$  points  $x_i$  pour  $i = 0, \dots, N$  régulièrement espacés avec un pas  $\Delta x$ . Les points  $x_i = i\Delta x$  sont appelés les **nœuds du maillage**.

Le problème continu de départ de détermination d'une grandeur sur un ensemble de dimension infinie se ramène ainsi à la recherche de  $N$  valeurs discrètes de cette grandeur aux différents nœuds du maillage.

## Notation

On note  $u_i$  la valeur discrète de  $u(x)$  au point  $x_i$ , soit  $u_i = u(x_i)$ . De même pour la dérivée de  $u(x)$  au nœud  $x_i$ , on note  $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{x=x_i} = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = u'_i$ .

Cette notation s'utilise de façon équivalente pour toutes les dérivées d'ordre successif de la grandeur  $u$ .

# Notation indicielle - cas 1D

Considérons un cas monodimensionnel où l'on souhaite déterminer une grandeur  $u(x)$  sur l'intervalle  $[0,1]$ . La recherche d'une solution discrète de la grandeur  $u$  amène à constituer un maillage de l'intervalle de définition. On considère un maillage (ou grille de calcul) composé de  $N + 1$  points  $x_i$  pour  $i = 0, \dots, N$  régulièrement espacés avec un pas  $\Delta x$ . Les points  $x_i = i\Delta x$  sont appelés les **nœuds du maillage**.

Le problème continu de départ de détermination d'une grandeur sur un ensemble de dimension infinie se ramène ainsi à la recherche de  $N$  valeurs discrètes de cette grandeur aux différents nœuds du maillage.

## Notation

On note  $u_i$  la valeur discrète de  $u(x)$  au point  $x_i$ , soit  $u_i = u(x_i)$ . De même pour la dérivée de  $u(x)$  au nœud  $x_i$ , on note  $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{x=x_i} = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = u'_i$ .

Cette notation s'utilise de façon équivalente pour toutes les dérivées d'ordre successif de la grandeur  $u$ .

# Notation indicielle - cas 1D

Le schéma aux différences finies d'ordre 1 présenté au-dessus s'écrit, en notation indicielle :

$$u'_i = \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (1)$$

Le schéma (1) est dit *avant* ou *décentré avant* ou *upwind*.

Il est possible de construire un autre schéma d'ordre 1, appelé *arrière* (équation 2) :

$$u'_i = \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (2)$$

# Schéma d'ordre supérieur

Des schémas aux différences finies d'ordre supérieur peuvent être construits en manipulant des développement de Taylor au voisinage de  $x_i$ . On écrit :

$$u_{i+1} = u(x_i + \Delta x) = u_i + \Delta x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (3)$$

$$u_{i-1} = u(x_i - \Delta x) = u_i - \Delta x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (4)$$

$$(3) - (4) \text{ donne : } u_{i+1} - u_{i-1} = 2\Delta x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^3)$$

Ce qui permet d'obtenir le schéma d'ordre deux dit **centré** pour approximer la dérivée première de  $u$  :

$$\left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (5)$$

# Schéma d'ordre supérieur

Des schémas aux différences finies d'ordre supérieur peuvent être construits en manipulant des développement de Taylor au voisinage de  $x_i$ . On écrit :

$$u_{i+1} = u(x_i + \Delta x) = u_i + \Delta x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (3)$$

$$u_{i-1} = u(x_i - \Delta x) = u_i - \Delta x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (4)$$

$$(3) - (4) \text{ donne : } u_{i+1} - u_{i-1} = 2\Delta x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^3)$$

Ce qui permet d'obtenir le schéma d'ordre deux dit **centré** pour approximer la dérivée première de  $u$  :

$$\left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (5)$$



# Schéma d'ordre supérieur

Pour obtenir des ordres supérieurs, il faut utiliser plusieurs nœuds voisins de  $x_i$ . Le nombre de points nécessaire à l'écriture du schéma s'appelle le **stencil**. Par exemple, un schéma aux différences finies d'ordre 3 pour la dérivée première s'écrit :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{-u_{i+2} + 6u_{i+1} - 3u_i - 2u_{i-1}}{6\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (6)$$

# Dérivée d'ordre supérieur

Le principe est identique et repose sur les développements de Taylor au voisinage de  $x_i$ . Par exemple pour construire un schéma d'approximation de la dérivée seconde de  $u$ , on écrit :

$$u_{i+1} = u_i + \Delta x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \frac{\Delta x^3}{6} \left( \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^4) \quad (7)$$

$$u_{i-1} = u_i - \Delta x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i - \frac{\Delta x^3}{6} \left( \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^4) \quad (8)$$

En faisant la somme de (7) et (8) on aboutit à :

$$u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i = \Delta x^2 \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^4)$$

# Dérivée d'ordre supérieur

Ce qui permet d'obtenir le schéma d'**ordre deux** dit **centré** pour approximer la dérivée seconde de  $u$  :

$$u''_i = \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (9)$$

Il existe aussi une formulation **avant** et **arrière** pour la dérivée seconde, toute deux d'ordre 1 :

$$u''_i = \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (10a)$$

$$u''_i = \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{u_i - 2u_{i-1} + u_{i-2}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (10b)$$

Il est également possible de construire, par le même procédé, des schémas aux différences finies d'ordre supérieur pour les dérivées  $2^e$ ,  $3^e$ , ...

# Dérivée d'ordre supérieur

Ce qui permet d'obtenir le schéma d'**ordre deux** dit **centré** pour approximer la dérivée seconde de  $u$  :

$$u''_i = \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (9)$$

Il existe aussi une formulation **avant** et **arrière** pour la dérivée seconde, toute deux d'ordre 1 :

$$u''_i = \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (10a)$$

$$u''_i = \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{u_i - 2u_{i-1} + u_{i-2}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (10b)$$

Il est également possible de construire, par le même procédé, des schémas aux différences finies d'ordre supérieur pour les dérivées  $2^e$ ,  $3^e$ , ...

# Généralisation de la notation indicielle

Dans le cas 1D instationnaire, considérons l'évolution d'une grandeur  $u(x, t)$  en fonction de l'espace et du temps. Le domaine de définition de  $u$  est décomposé en  $N$  nœuds  $x_i$  répartis régulièrement avec un pas d'espace  $\Delta x$ . De même, le temps est décomposé en intervalle élémentaire de pas constant  $\Delta t$ . On notera  $u_i^n$  la valeur discrète de la grandeur  $u(x, t)$  au nœud  $x_i$  et au temps  $n\Delta t$ .

Dans le cas 2D, considérons une grandeur  $u(x, y)$  définie sur un certain domaine. Ce dernier est décomposé en  $N \times P$  nœuds  $(x_i, y_j)$  répartis régulièrement avec un pas d'espace  $\Delta x$  dans la direction  $x$  et  $\Delta y$  dans l'autre direction. On notera  $u_{ij}$  la valeur discrète de la grandeur  $u(x, y)$  au nœud  $(x_i, y_j)$ .

De façon similaire, dans le cas 2D instationnaire, on notera  $u_{ij}^n$  la valeur discrète de la grandeur  $u(x, y, t)$  au nœud  $x_i, y_j$  et au temps  $n\Delta t$ . Et dans le cas 3D instationnaire, on notera  $u_{ijk}^n$  la valeur discrète de la grandeur  $u(x, y, z, t)$  au nœud  $(x_i, y_j, z_k)$  et au temps  $n\Delta t$ .

# Généralisation de la notation indicielle

Dans le cas 1D instationnaire, considérons l'évolution d'une grandeur  $u(x, t)$  en fonction de l'espace et du temps. Le domaine de définition de  $u$  est décomposé en  $N$  nœuds  $x_i$  répartis régulièrement avec un pas d'espace  $\Delta x$ . De même, le temps est décomposé en intervalle élémentaire de pas constant  $\Delta t$ . On notera  $u_i^n$  la valeur discrète de la grandeur  $u(x, t)$  au nœud  $x_i$  et au temps  $n\Delta t$ .

Dans le cas 2D, considérons une grandeur  $u(x, y)$  définie sur un certain domaine. Ce dernier est décomposé en  $N \times P$  nœuds  $(x_i, y_j)$  répartis régulièrement avec un pas d'espace  $\Delta x$  dans la direction  $x$  et  $\Delta y$  dans l'autre direction. On notera  $u_{ij}$  la valeur discrète de la grandeur  $u(x, y)$  au nœud  $(x_i, y_j)$ .

De façon similaire, dans le cas 2D instationnaire, on notera  $u_{ij}^n$  la valeur discrète de la grandeur  $u(x, y, t)$  au nœud  $x_i, y_j$  et au temps  $n\Delta t$ . Et dans le cas 3D instationnaire, on notera  $u_{ijk}^n$  la valeur discrète de la grandeur  $u(x, y, z, t)$  au nœud  $(x_i, y_j, z_k)$  et au temps  $n\Delta t$ .

# Généralisation de la notation indicielle

Dans le cas 1D instationnaire, considérons l'évolution d'une grandeur  $u(x, t)$  en fonction de l'espace et du temps. Le domaine de définition de  $u$  est décomposé en  $N$  nœuds  $x_i$  répartis régulièrement avec un pas d'espace  $\Delta x$ . De même, le temps est décomposé en intervalle élémentaire de pas constant  $\Delta t$ . On notera  $u_i^n$  la valeur discrète de la grandeur  $u(x, t)$  au nœud  $x_i$  et au temps  $n\Delta t$ .

Dans le cas 2D, considérons une grandeur  $u(x, y)$  définie sur un certain domaine. Ce dernier est décomposé en  $N \times P$  nœuds  $(x_i, y_j)$  répartis régulièrement avec un pas d'espace  $\Delta x$  dans la direction  $x$  et  $\Delta y$  dans l'autre direction. On notera  $u_{ij}$  la valeur discrète de la grandeur  $u(x, y)$  au nœud  $(x_i, y_j)$ .

De façon similaire, dans le cas 2D instationnaire, on notera  $u_{ij}^n$  la valeur discrète de la grandeur  $u(x, y, t)$  au nœud  $x_i, y_j$  et au temps  $n\Delta t$ . Et dans le cas 3D instationnaire, on notera  $u_{ijk}^n$  la valeur discrète de la grandeur  $u(x, y, z, t)$  au nœud  $(x_i, y_j, z_k)$  et au temps  $n\Delta t$ .

# Résolution des équations différentielles par la méthode de différence finie

La résolution des équations différentielles par la méthode de différence finie repose sur deux étapes :

## La discrétisation

Elle consiste au choix d'un nombre fini des points équidistants dans l'intervalle  $[a, b]$ ,  $(x_0 = a), \dots, x_1, x_2, \dots, (x_n = b)$

$$x_0 = a, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_1 + h = x_0 + 2h, \dots, x_i = x_0 + i \times h$$

Avec  $h$ , le pas.  $h = x_{i+1} - x_i$

## L'écriture de l'équation différentielle en chaque point $x_i$

En remplaçant les dérivées par leurs expressions obtenues par application de la méthode des différences finies.



# Résolution des équations différentielles par la méthode de différence finie

La résolution des équations différentielles par la méthode de différence finie repose sur deux étapes :

## La discrétisation

Elle consiste au choix d'un nombre fini des points équidistants dans l'intervalle  $[a, b]$ ,  $(x_0 = a), \dots, x_1, x_2, \dots, (x_n = b)$

$$x_0 = a, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_1 + h = x_0 + 2h, \dots, x_i = x_0 + i \times h$$

Avec  $h$ , le pas.  $h = x_{i+1} - x_i$

## L'écriture de l'équation différentielle en chaque point $x_i$

En remplaçant les dérivées par leurs expressions obtenues par application de la méthode des différences finies.

# Plan de l'exposé

- 1 **Méthode des différences finies**
  - Définitions et intérêts de la méthode
  - Opérateurs de différences finies
  - Notation indicielle - cas 1D
  - Schéma d'ordre supérieur
  - Dérivée d'ordre supérieur
  - Généralisation de la notation indicielle
  - Résolution des équations différentielles par la méthode de différence finie
- 2 **Application de la MDF à l'équation de Schrödinger**
  - Équation de Schrödinger 1D
  - Équation de Schrödinger 2D
  - Équation de Schrödinger 3D
- 3 **Conclusion**

# Équation de Schrödinger

## Mise au point

Considérons l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour une fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$  :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (11)$$

où  $H$  est l'observable associé à l'énergie totale appelé *opérateur hamiltonien*.  
Pour une particule, il s'écrit en représentation  $|\vec{r}\rangle$  :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x, y, z)$$

L'équation (11) s'écrit alors

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z)\psi \quad (12)$$

# Équation de Schrödinger

## Mise au point

La résolution exacte de l'équation de Schrödinger n'est pas généralement aisée. Certains modèles simples, peuvent être résolus analytiquement :

une particule libre (potentiel nul) :  $V = 0$

un oscillateur harmonique (potentiel quadratique) :

$$V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

une particule dans un réseau unidimensionnel (potentiel périodique) :

$$V_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

# Équation de Schrödinger

## Mise au point

La résolution exacte de l'équation de Schrödinger n'est pas généralement aisée. Certains modèles simples, peuvent être résolus analytiquement :

une particule libre (potentiel nul) :  $V = 0$

un oscillateur harmonique (potentiel quadratique) :

$$V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

une particule dans un réseau unidimensionnel (potentiel périodique) :

$$V_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

# Équation de Schrödinger

## Mise au point

La résolution exacte de l'équation de Schrödinger n'est pas généralement aisée. Certains modèles simples, peuvent être résolus analytiquement :

une particule libre (potentiel nul) :  $V = 0$

un oscillateur harmonique (potentiel quadratique) :

$$V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

une particule dans un réseau unidimensionnel (potentiel périodique) :

$$V_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

# Équation de Schrödinger

## Mise au point

Dans les autres cas, il faut faire appel aux diverses techniques d'approximation : la théorie des perturbations apporte des expressions analytiques sous la forme de développements asymptotiques autour d'un problème non perturbé précisément soluble.

l'analyse numérique permet d'explorer des situations inaccessibles par la théorie de perturbation.

# Équation de Schrödinger

## Mise au point

Dans les autres cas, il faut faire appel aux diverses techniques d'approximation :  
la théorie des perturbations apporte des expressions analytiques sous la forme de développements asymptotiques autour d'un problème non perturbé précisément soluble.  
l'analyse numérique permet d'explorer des situations inaccessibles par la théorie de perturbation.



# Équation de Schrödinger 1D

L'équation de Schrödinger est donné par :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi \quad (13)$$

Considérons le cas d'une particule, l'équation (13) devient :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (14)$$

Soit  $\psi(x, t)$  une fonction de deux variables :  $t \in [t_0, t]$  et  $x \in [a, b]$ .  $\Delta x$  le pas spatial et  $\Delta t$  le pas temporel. On pose :

$$\psi_j^n = \psi(j\Delta x, n\Delta t), \quad V_j = V(j\Delta x) \quad (15)$$

où  $n$  est un entier positif ou nul représentant le temps.

# Équation de Schrödinger 1D

L'équation de Schrödinger est donné par :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi \quad (13)$$

Considérons le cas d'une particule, l'équation (13) devient :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (14)$$

Soit  $\psi(x, t)$  une fonction de deux variables :  $t \in [t_0, t]$  et  $x \in [a, b]$ .  $\Delta x$  le pas spatial et  $\Delta t$  le pas temporel. On pose :

$$\psi_j^n = \psi(j\Delta x, n\Delta t), \quad V_j = V(j\Delta x) \quad (15)$$

où  $n$  est un entier positif ou nul représentant le temps.

# Équation de Schrödinger 1D

L'équation de Schrödinger est donné par :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi \quad (13)$$

Considérons le cas d'une particule, l'équation (13) devient :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (14)$$

Soit  $\psi(x, t)$  une fonction de deux variables :  $t \in [t_0, t]$  et  $x \in [a, b]$ .  $\Delta x$  le pas spatial et  $\Delta t$  le pas temporel. On pose :

$$\psi_j^n = \psi(j\Delta x, n\Delta t), \quad V_j = V(j\Delta x) \quad (15)$$

où  $n$  est un entier positif ou nul représentant le temps.

# Équation de Schrödinger 1D

La dérivée temporelle est discrétisée de la manière suivante :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \approx \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} \quad (16)$$

La dérivée seconde par rapport à  $x$  est discrétisée par :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \approx \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (17)$$

## Discrétisation

On discrétise l'intervalle de :  $x \in [a, b]$  :

$$x_0 = a, x_1 = x_0 + \Delta x, \dots, x_j = x_0 + j\Delta x, \dots \quad \Delta x = \frac{b - a}{N}$$

On discrétise l'intervalle de :  $t \in [t_0, T]$  :

$$t_0 = 0, t_1 = x_0 + \Delta t, \dots, t_n = t_0 + n\Delta t, \dots \quad \Delta t = \frac{t - t_0}{T}$$

# Équation de Schrödinger 1D

La dérivée temporelle est discrétisée de la manière suivante :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \approx \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} \quad (16)$$

La dérivée seconde par rapport à  $x$  est discrétisée par :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \approx \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (17)$$

## Discrétisation

On discrétise l'intervalle de :  $x \in [a, b]$  :

$$x_0 = a, x_1 = x_0 + \Delta x, \dots, x_j = x_0 + j\Delta x, \dots \quad \Delta x = \frac{b - a}{N}$$

On discrétise l'intervalle de :  $t \in [t_0, t]$  :

$$t_0 = 0, t_1 = x_0 + \Delta t, \dots, t_n = t_0 + n\Delta t, \dots \quad \Delta t = \frac{t - t_0}{T}$$

# Équation de Schrödinger 1D

## Schéma explicite

$$i \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (18)$$

## Solution explicite

$$\psi_j^{n+1} = -\frac{\hbar \Delta t}{2m(\Delta x)^2 i} (\psi_{j+1}^n + \psi_{j-1}^n) + \left(1 + \frac{\hbar \Delta t}{m(\Delta x)^2 i}\right) \psi_j^n \quad (19)$$

La connaissance de  $\psi_{j+1}^n, \psi_{j-1}^n, \psi_j^n$  permet de calculer la valeur de  $\psi(x, t)$  au point  $j, n + 1$ .

# Équation de Schrödinger 1D

## Schéma explicite

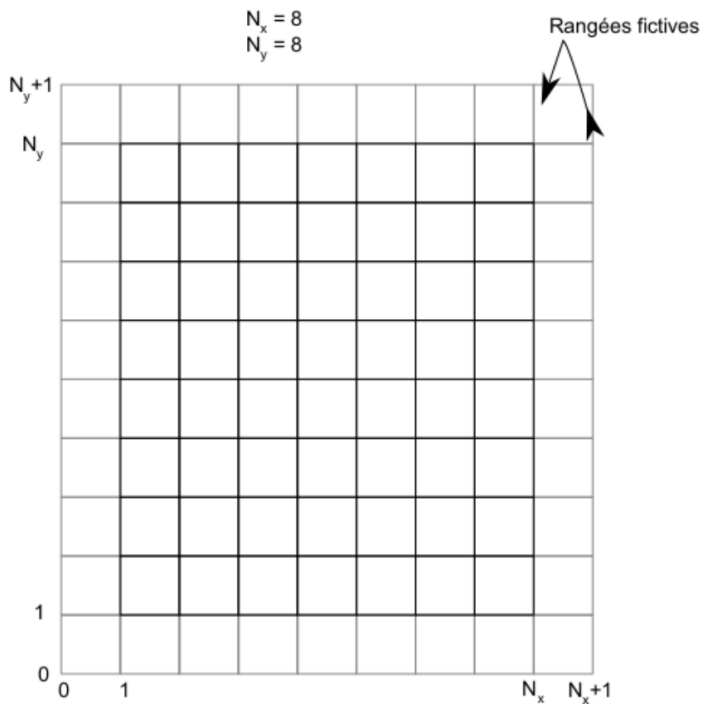
$$i \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (18)$$

## Solution explicite

$$\psi_j^{n+1} = -\frac{\hbar \Delta t}{2m(\Delta x)^2 i} (\psi_{j+1}^n + \psi_{j-1}^n) + \left(1 + \frac{\hbar \Delta t}{m(\Delta x)^2 i}\right) \psi_j^n \quad (19)$$

La connaissance de  $\psi_{j+1}^n$ ,  $\psi_{j-1}^n$ ,  $\psi_j^n$  permet de calculer la valeur de  $\psi(x, t)$  au point  $j, n + 1$ .

# Équation de Schrödinger 2D



**Figure 1** – Maillage à 2D



# Équation de Schrödinger 2D

## Équation de Schrödinger pour une particule libre

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right), \quad V(x, y) = 0 \quad (20)$$

## Discrétisation

Les nœuds du maillage (• Maillage) sont définis par :

$$x_j = j\Delta x, \quad y_k = k\Delta y \quad (21)$$

L'indice  $j$  varie de 0 à  $N_x - 1$ , l'indice  $k$  de 0 à  $N_y - 1$ . Les valeurs sont recherchées aux instants définis par :

$$t_n = n\Delta t \quad (22)$$

où  $n$  est un entier positif ou nul.

# Équation de Schrödinger 2D

## Équation de Schrödinger pour une particule libre

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right), \quad V(x, y) = 0 \quad (20)$$

## Discrétisation

Les nœuds du maillage ( [► Maillage](#) ) sont définis par :

$$x_j = j\Delta x, \quad y_k = k\Delta y \quad (21)$$

L'indice  $j$  varie de 0 à  $N_x - 1$ , l'indice  $k$  de 0 à  $N_y - 1$ . Les valeurs sont recherchées aux instants définis par :

$$t_n = n\Delta t \quad (22)$$

où  $n$  est un entier positif ou nul.

# Équation de Schrödinger 2D

## Différenciation

Soit  $\psi(x, y, t)$  la fonction d'onde de trois variables :  $x \in [a, b]$  et  $y \in [c, d]$ . Soit  $\Delta t$  le pas de temps. On pose :

$$\psi_{jk}^n = \psi(j\Delta x, k\Delta y, n\Delta t) \quad (23)$$

$$V_{jk}(j\Delta x, k\Delta y) \quad (24)$$

Dans cette notation, l'exposant  $(n)$  sert donc à représenter le temps. La dérivée temporelle est discrétisée de la manière suivante :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \approx \frac{\psi_{j,k}^{n+1} - \psi_{j,k}^n}{\Delta t} \quad (25)$$

Les dérivées secondes respectivement par rapport à  $x$  et  $y$  sont discrétisées :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \approx \frac{\psi_{j+1,k}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j-1,k}^n}{(\Delta x)^2} \quad (26)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \approx \frac{\psi_{j,k+1}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j,k-1}^n}{(\Delta y)^2} \quad (27)$$

# Équation de Schrödinger 2D

## Différenciation : cas d'une particule quelconque

$$i \frac{\psi_{j,k}^{n+1} - \psi_{j,k}^n}{\Delta t} = -\frac{\hbar}{2m} \left( \frac{\psi_{j+1,k}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j-1,k}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\psi_{j,k+1}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j,k-1}^n}{(\Delta y)^2} \right) + V_{j,k} \psi_{j,k}^n \quad (28)$$

## Schéma explicite : particule libre

$$i \frac{\psi_{j,k}^{n+1} - \psi_{j,k}^n}{\Delta t} = -\frac{\psi_{j+1,k}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j-1,k}^n}{(\Delta x)^2} - \frac{\psi_{j,k+1}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j,k-1}^n}{(\Delta y)^2} \quad (29)$$

On pose  $\frac{\hbar}{2m} = 1$ .

## Solution explicite

La connaissance de  $\psi_{j+1,k}^n, \psi_{j,k+1}^n, \psi_{j-1,k}^n, \psi_{j,k-1}^n, \psi_{j,k}^n$  permet de calculer la valeur de  $\psi(x, y, t)$  aux points  $j, k, n + 1$ .

# Équation de Schrödinger 2D

## Différenciation : cas d'une particule quelconque

$$i \frac{\psi_{j,k}^{n+1} - \psi_{j,k}^n}{\Delta t} = -\frac{\hbar}{2m} \left( \frac{\psi_{j+1,k}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j-1,k}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\psi_{j,k+1}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j,k-1}^n}{(\Delta y)^2} \right) + V_{j,k} \psi_{j,k}^n \quad (28)$$

## Schéma explicite : particule libre

$$i \frac{\psi_{j,k}^{n+1} - \psi_{j,k}^n}{\Delta t} = -\frac{\psi_{j+1,k}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j-1,k}^n}{(\Delta x)^2} - \frac{\psi_{j,k+1}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j,k-1}^n}{(\Delta y)^2} \quad (29)$$

On pose  $\frac{\hbar}{2m} = 1$ .

## Solution explicite

La connaissance de  $\psi_{j+1,k}^n, \psi_{j,k+1}^n, \psi_{j-1,k}^n, \psi_{j,k-1}^n, \psi_{j,k}^n$  permet de calculer la valeur de  $\psi(x, y, t)$  aux points  $j, k, n + 1$ .

# Équation de Schrödinger 2D

## Différenciation : cas d'une particule quelconque

$$i \frac{\psi_{j,k}^{n+1} - \psi_{j,k}^n}{\Delta t} = -\frac{\hbar}{2m} \left( \frac{\psi_{j+1,k}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j-1,k}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\psi_{j,k+1}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j,k-1}^n}{(\Delta y)^2} \right) + V_{j,k} \psi_{j,k}^n \quad (28)$$

## Schéma explicite : particule libre

$$i \frac{\psi_{j,k}^{n+1} - \psi_{j,k}^n}{\Delta t} = -\frac{\psi_{j+1,k}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j-1,k}^n}{(\Delta x)^2} - \frac{\psi_{j,k+1}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j,k-1}^n}{(\Delta y)^2} \quad (29)$$

On pose  $\frac{\hbar}{2m} = 1$ .

## Solution explicite

La connaissance de  $\psi_{j+1,k}^n$ ,  $\psi_{j,k+1}^n$ ,  $\psi_{j-1,k}^n$ ,  $\psi_{j,k-1}^n$ ,  $\psi_{j,k}^n$  permet de calculer la valeur de  $\psi(x, y, t)$  aux points  $j, k, n + 1$ .

# Équation de Schrödinger 3D

## Équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \quad (30)$$

## Discrétisation

Les nœuds du maillage sont définis par :

$$x_j = j\Delta x, \quad y_k = k\Delta y, \quad z_\ell = \ell\Delta z \quad (31)$$

L'indice  $j$  varie de 0 à  $N_x - 1$ , l'indice  $k$  de 0 à  $N_y - 1$  et  $\ell$  de 0 à  $N_z - 1$ . Les valeurs des fonctions d'ondes sont recherchées aux instants définis par :

$$t_n = n\Delta t \quad (32)$$

où  $n$  est un entier positif ou nul.

# Équation de Schrödinger 3D

## Équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \quad (30)$$

## Discrétisation

Les nœuds du maillage sont définis par :

$$x_j = j\Delta x, \quad y_k = k\Delta y, \quad z_\ell = \ell\Delta z \quad (31)$$

L'indice  $j$  varie de 0 à  $N_x - 1$ , l'indice  $k$  de 0 à  $N_y - 1$  et  $\ell$  de 0 à  $N_z - 1$ . Les valeurs des fonctions d'ondes sont recherchées aux instants définis par :

$$t_n = n\Delta t \quad (32)$$

où  $n$  est un entier positif ou nul.



# Équation de Schrödinger 3D

## Différenciation

Soit  $\psi(x, y, z, t)$  la fonction d'onde. On pose :

$$\psi_{j,k,\ell}^n = \psi(j\Delta x, k\Delta y, \ell\Delta z, n\Delta t) \quad (33)$$

$$V_{j,k,\ell}(j\Delta x, k\Delta y, \ell\Delta z) \quad (34)$$

## Différenciation con't

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \cong \frac{\psi_{j,k,\ell}^{n+1} - \psi_{j,k,\ell}^n}{\Delta t} \quad (35)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \cong \frac{\psi_{j+1,k,\ell}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j-1,k,\ell}^n}{(\Delta x)^2} \quad (36)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \cong \frac{\psi_{j,k+1,\ell}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j,k-1,\ell}^n}{(\Delta y)^2} \quad (37)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \cong \frac{\psi_{j,k,\ell+1}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j,k,\ell-1}^n}{(\Delta z)^2} \quad (38)$$

# Équation de Schrödinger 3D

## Différenciation

Soit  $\psi(x, y, z, t)$  la fonction d'onde. On pose :

$$\psi_{j,k,\ell}^n = \psi(j\Delta x, k\Delta y, \ell\Delta z, n\Delta t) \quad (33)$$

$$V_{j,k,\ell}(j\Delta x, k\Delta y, \ell\Delta z) \quad (34)$$

## Différenciation con't

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \approx \frac{\psi_{j,k,\ell}^{n+1} - \psi_{j,k,\ell}^n}{\Delta t} \quad (35)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \approx \frac{\psi_{j+1,k,\ell}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j-1,k,\ell}^n}{(\Delta x)^2} \quad (36)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \approx \frac{\psi_{j,k+1,\ell}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j,k-1,\ell}^n}{(\Delta y)^2} \quad (37)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \approx \frac{\psi_{j,k,\ell+1}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j,k,\ell-1}^n}{(\Delta z)^2} \quad (38)$$

# Équation de Schrödinger 3D

## Discrétisation et opérateur hamiltonien

$$\begin{aligned}
 H\psi_{j,k,\ell}^n = & - \frac{\psi_{j+1,k,\ell}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j-1,k,\ell}^n}{(\Delta x)^2} - \frac{\psi_{j,k+1,\ell}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j,k-1,\ell}^n}{(\Delta y)^2} \\
 & - \frac{\psi_{j,k,\ell+1}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j,k,\ell-1}^n}{(\Delta z)^2} + V_{j,k,\ell}\psi_{j,k,\ell}^n
 \end{aligned} \quad (39)$$

## Schéma explicite pour une particule libre

$$\begin{aligned}
 \frac{\psi_{j,k,\ell}^{n+1} - \psi_{j,k,\ell}^n}{\Delta t} = & - \frac{\psi_{j+1,k,\ell}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j-1,k,\ell}^n}{(\Delta x)^2} - \frac{\psi_{j,k+1,\ell}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j,k-1,\ell}^n}{(\Delta y)^2} \\
 & - \frac{\psi_{j,k,\ell+1}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j,k,\ell-1}^n}{(\Delta z)^2} \quad \text{pour} \quad \frac{\hbar}{2m} = 1
 \end{aligned} \quad (40)$$

# Équation de Schrödinger 3D

## Discrétisation et opérateur hamiltonien

$$\begin{aligned}
 H\psi_{j,k,\ell}^n = & - \frac{\psi_{j+1,k,\ell}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j-1,k,\ell}^n}{(\Delta x)^2} - \frac{\psi_{j,k+1,\ell}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j,k-1,\ell}^n}{(\Delta y)^2} \\
 & - \frac{\psi_{j,k,\ell+1}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j,k,\ell-1}^n}{(\Delta z)^2} + V_{j,k,\ell}\psi_{j,k,\ell}^n
 \end{aligned} \quad (39)$$

## Schéma explicite pour une particule libre

$$\begin{aligned}
 \frac{\psi_{j,k,\ell}^{n+1} - \psi_{j,k,\ell}^n}{\Delta t} = & - \frac{\psi_{j+1,k,\ell}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j-1,k,\ell}^n}{(\Delta x)^2} - \frac{\psi_{j,k+1,\ell}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j,k-1,\ell}^n}{(\Delta y)^2} \\
 & - \frac{\psi_{j,k,\ell+1}^n - 2\psi_{j,k,\ell}^n + \psi_{j,k,\ell-1}^n}{(\Delta z)^2} \quad \text{pour} \quad \frac{\hbar}{2m} = 1
 \end{aligned} \quad (40)$$

# Plan de l'exposé

- 1 **Méthode des différences finies**
  - Définitions et intérêts de la méthode
  - Opérateurs de différences finies
  - Notation indicielle - cas 1D
  - Schéma d'ordre supérieur
  - Dérivée d'ordre supérieur
  - Généralisation de la notation indicielle
  - Résolution des équations différentielles par la méthode de différence finie
- 2 **Application de la MDF à l'équation de Schrödinger**
  - Équation de Schrödinger 1D
  - Équation de Schrödinger 2D
  - Équation de Schrödinger 3D
- 3 **Conclusion**

# Conclusion

Le présent travail s'est articulé sur la méthode des différences finies appliquée à la résolution de l'équation de Schrödinger respectivement à une, deux et trois dimensions. Celle-ci à consister à déterminer les fonctions d'onde sur un domaine précis et non les différents niveaux d'énergies.

Pour y arriver nous avons procédé par la :

- ➔ discrétisation des opérateurs de différentiation en utilisant l'opérateur de différence centrée ;
- ➔ substitution des différents opérateurs dans l'équation de Schrödinger pour une particule libre ;
- ➔ mise en œuvre du schéma explicite permettant de calculer la valeur de la fonction d'onde aux points de maillage fixés.