CY Tech
Projet numérique

Justification de l'algorithme

Yanis KASSOU, Gweltaz COLLIN et Valérie ROUX

Juin 2025

On cherche une solution particulière de :

$$\psi(x,t) = \phi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

En injectant dans l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\left(-\frac{iE}{\hbar}\right)\phi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = H\phi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$\Rightarrow E\phi(x) = H\phi(x)$$

$$\Rightarrow E\phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi}{dx^2} + V(x)\phi(x)$$

$\phi(x)$ est vecteur propre donc un état propre de l'énergie, et E est valeur propre (l'énergie associée).

H opérateur ou matrice

On pose le développement de Taylor autour de x_i :

$$\phi(x_i + dx) = \phi(x_i) + dx\,\phi'(x_i) + \frac{dx^2}{2}\phi''(x_i)$$

$$\phi(x_i - dx) = \phi(x_i) - dx\,\phi'(x_i) + \frac{dx^2}{2}\phi''(x_i)$$

Somme des deux :

$$\phi(x_i + dx) + \phi(x_i - dx) = 2\phi(x_i) + dx^2\phi''(x_i)$$

$$\phi''(x_i) = \frac{\phi(x_i + dx) - 2\phi(x_i) + \phi(x_i - dx)}{dx^2}$$

On approxime $\frac{d^2\phi}{dx^2}$ par $\frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{dx^2}$

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

On obtient :

$$E\phi(x) = -\frac{\hbar}{2m} \cdot \frac{\phi(x_i + dx) - 2\phi(x_i) + \phi(x_i - dx)}{dx^2} + V(x)\phi(x)$$

$$\Rightarrow -E\phi(x_i) = -\frac{\hbar^2}{2mdx^2}\phi(x_{i+1}) + (\frac{\hbar^2}{mdx^2} + V_i)\phi(x_i) - \frac{\hbar^2}{2mdx^2}\phi(x_{i-1})$$

Matrice diagonale principale

$$H_{ii} = \frac{\hbar^2}{mdx^2} + V(x_i)$$

Matrice diagonale inférieure et supérieure

$$H_{i,i\pm1} = -\frac{\hbar^2}{2mdx^2}$$

Remarque : dans le code Python, on a mis $\hbar$ et m égal à 1 pour simplifier.