

Physique Numérique – TP6

Valeurs propres et vecteurs propres

Victor Lanvin

1 Introduction

Le but de ce TP est de s'intéresser au calcul des valeurs et vecteurs propres de matrices en l'appliquant à la résolution de l'équation de Schrödinger pour divers potentiels.

Afin de tester la fiabilité et les limites de la simulation numérique, on s'intéressera dans un premier temps à des potentiels dont on connaît une solution analytique (tels qu'un puits infini, ou un potentiel harmonique simple). Ensuite, on pourra s'intéresser à des problèmes plus complexes tels qu'un double puits de potentiel.

2 Puits infini

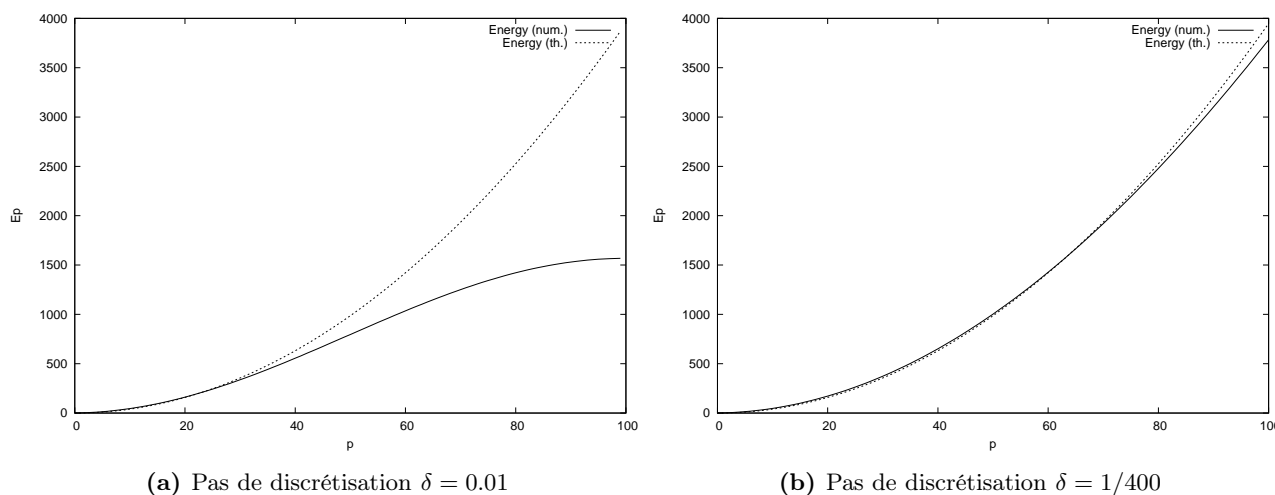


Figure 1: Energies propres du puits infini à différents pas de discrétisation

Energies. Dans cette partie, on s'intéresse à la simulation d'un puits de potentiel infini. On commence pour cela par tracer la courbe représentant les énergies propres E_p en fonction de p , que l'on compare à la courbe théorique. Ces résultats sont présentés en figure ??, pour différents pas de discrétisation.

Dans tous les cas, on remarque que la simulation peut être considérée comme fiable à basses énergies, mais se "décroche" du modèle à hautes énergies. Diminuer le pas de discrétisation permet d'augmenter la fiabilité de la simulation à plus hautes énergies. Cependant, la complexité de la simulation augmentant en n^2 , on ne peut diminuer indéfiniment le pas de discrétisation. Plus on le diminue, plus le gain est minime.

Densités. On s'intéresse maintenant aux fonctions d'ondes et aux densités de probabilité associées. On trace pour cela quelques densités (après avoir pris soin de les normaliser selon les conventions de la M.Q.), en les comparant aux densités théoriques. Ces tracés sont présentés en figure 2, pour les ordres $p \in [1; 5]$. On remarque qu'à ces énergies, la simulation est assez proche de la théorie. La simulation a tout de même tendance à s'éloigner un peu du modèle lorsque la position s'écarte de l'origine, probablement à cause d'une accumulation d'erreurs numériques.

On peut aussi essayer de tracer la densité de probabilité (et la comparer au modèle) à hautes énergies. Un tel tracé est présenté en figure 3. On remarque immédiatement que la simulation et le modèle sont en total

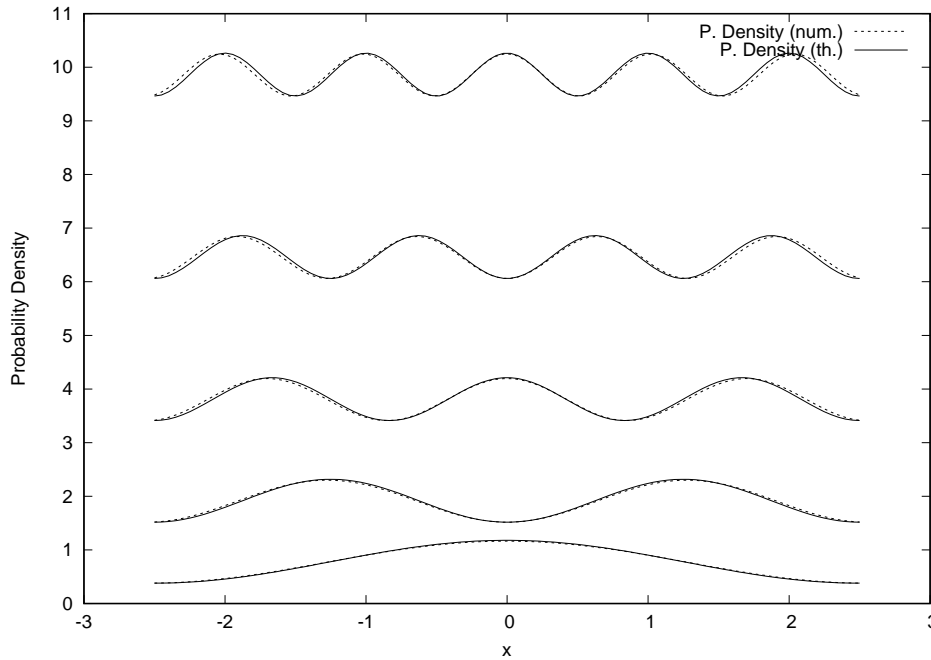


Figure 2: Densité de probabilité pour le puits infini pour différents ordres $p \in [1; 5]$

désaccord, ce qui était attendu au vu du paragraphe précédent. En revanche, on remarque de plus un phénomène de battements ainsi qu'un aplatissement des sinusoïdes. Ceci est en fait dû à un problème d'échantillonnage lors du tracé des courbes (*y compris* pour la courbe théorique), ce qui rend le modèle d'autant plus dur à analyser aux hautes énergies.

3 Potentiel Harmonique

Energies. On réalise dans cette section la même analyse sur un potentiel harmonique. On a tout d'abord tracé en figure 4 la courbe représentant les énergies propres E_p en fonction de p . On remarque immédiatement que la simulation semble ne pas du tout s'accorder avec la théorie, même à basses énergies. De plus, la courbe numérique semble très proche de la courbe du potentiel en puits infini. Pire, diminuer le pas de discrétisation ne semble avoir aucune influence sur la correction de la simulation.

Cela s'explique par le fait que le potentiel harmonique est en fait tronqué. On a en effet considéré le potentiel harmonique sur $[-L/2; L/2]$, et infini en dehors. Si L est trop faible, ou si l'énergie est trop élevée, ce potentiel est assimilable à un puits infini, ce qui explique les résultats obtenus.

Une solution pour palier à ce problème est donc d'augmenter la valeur de L . Cependant, cela implique de devoir augmenter aussi la valeur de n afin de garder une simulation précise. Encore une fois, on ne peut donc pas simuler précisément (et dans un temps raisonnable) les très hautes énergies. Un tracé de l'évolution de l'énergie propre E_p en fonction de p pour L plus élevée est réalisé en figure 5. On remarque, comme prévu, que si n est trop faible alors des artefacts dus à la discrétisation apparaissent. En revanche, si on augmente n , alors la courbe expérimentale est en accord avec la courbe théorique pour des énergies faibles ($p < 40$).

Densités. On trace de nouveau la densité de probabilité pour quelques énergies faibles en fonction de la position. Les tracés sont présentés en figure 6. On remarque que, comme le tracé des énergies propres le laissait sous entendre, la densité de probabilité pour L faible se rapproche fortement de la densité de probabilité pour un puits infini (figure 6a), et s'éloigne de la courbe théorique. En revanche, à L et n plus élevés, les courbes numériques sont très proches des courbes théoriques (figure 6b).

4 Double puits

On a tracé les deux premières densités de probabilité pour le double puits Φ_1 et Φ_2 en figure 7. On remarque que à faible potentiel V_0 la courbe est symétrique : le double puits n'a apparemment aucune influence sur la

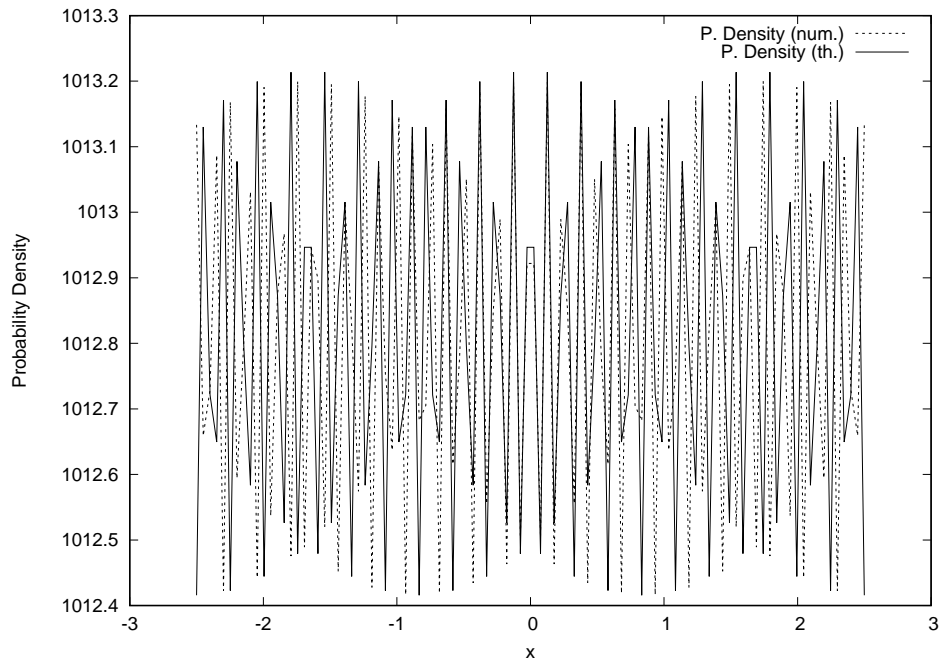
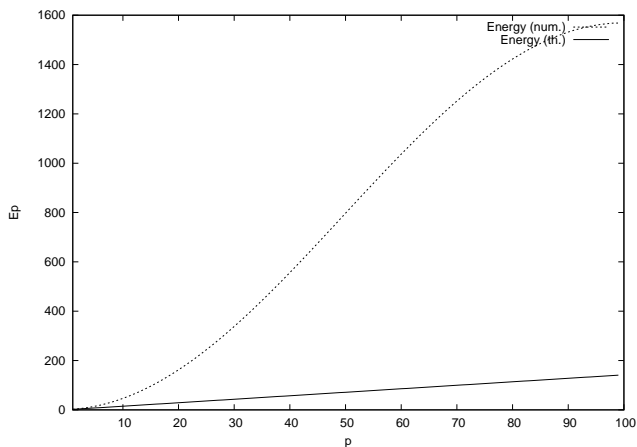


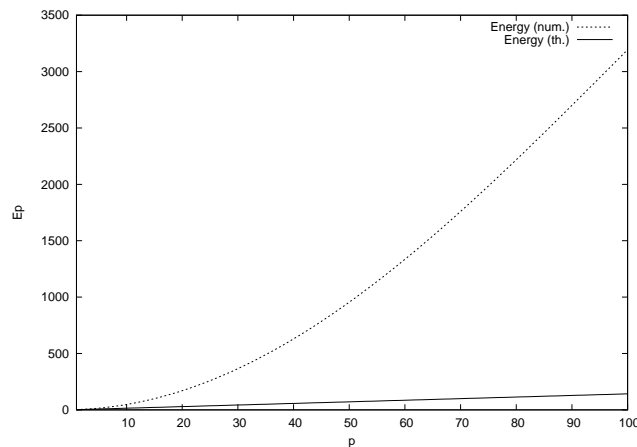
Figure 3: Densité de probabilité pour le puits infini à haute énergie $p = 100$

particule, et le potentiel paraît harmonique.

Lorsqu'on augmente V_0 , le double puits apparaît. En particulier, la particule se trouve bloquée dans un puits et ne peut pas passer (à énergie faible) dans l'autre puits.

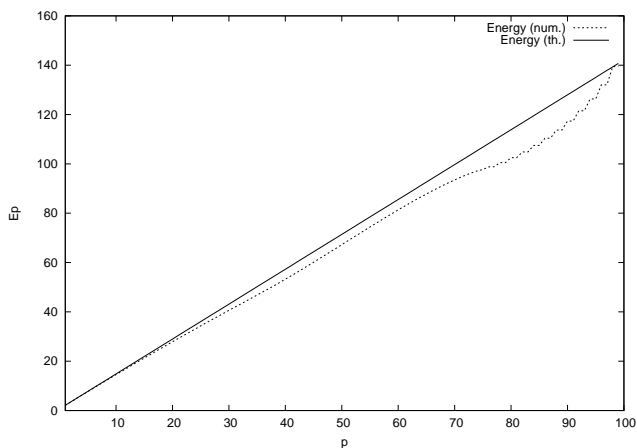


(a) Pas de discrétisation $\delta = 1/100$

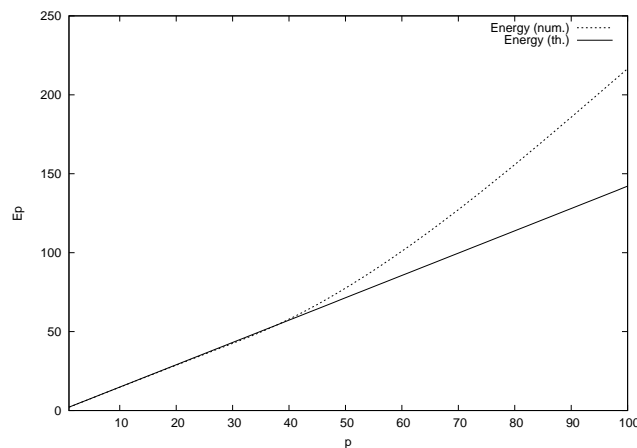


(b) Pas de discrétisation $\delta = 1/200$

Figure 4: Energies propres du potentiel harmonique à différents pas de discrétisation

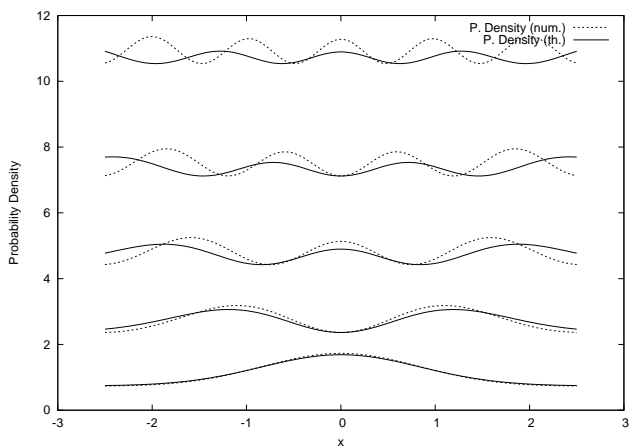


(a) Pas de discrétisation $\delta = 1/100$, $L = 20$

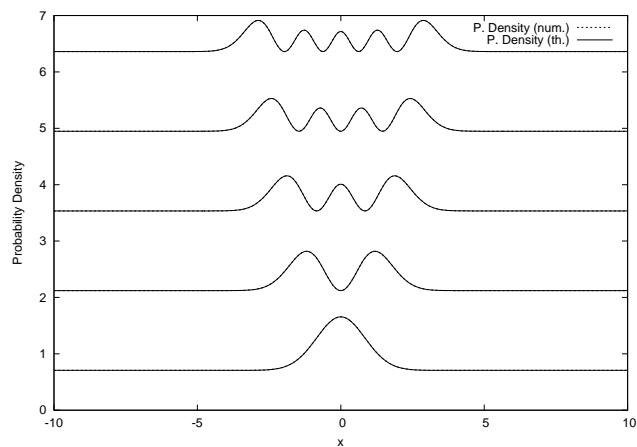


(b) Pas de discrétisation $\delta = 1/200$, $L = 20$

Figure 5: Energies propres du potentiel harmonique à différents pas de discrétisation, et $L = 20$

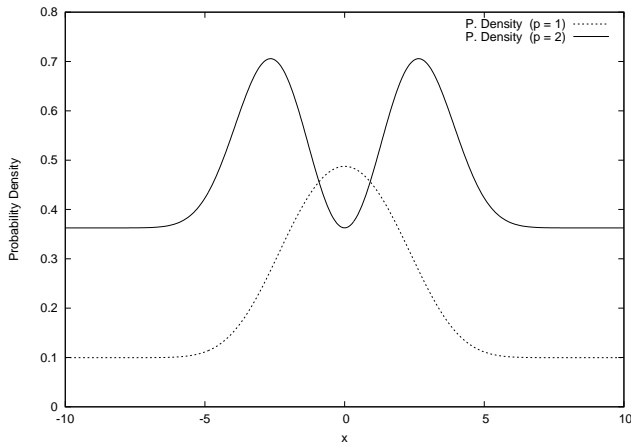


(a) Pas de discrétisation $\delta = 1/100$, $L = 5$

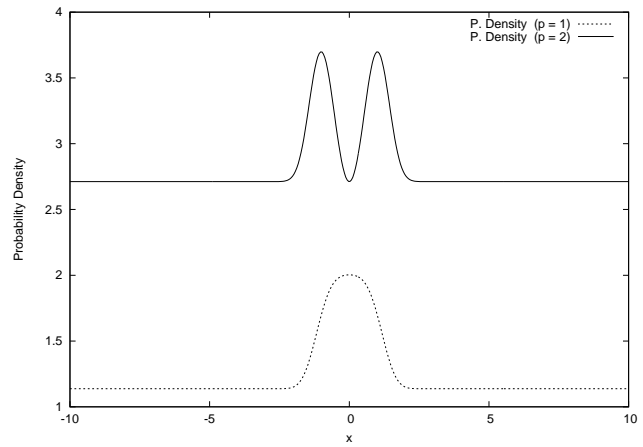


(b) Pas de discrétisation $\delta = 1/200$, $L = 20$

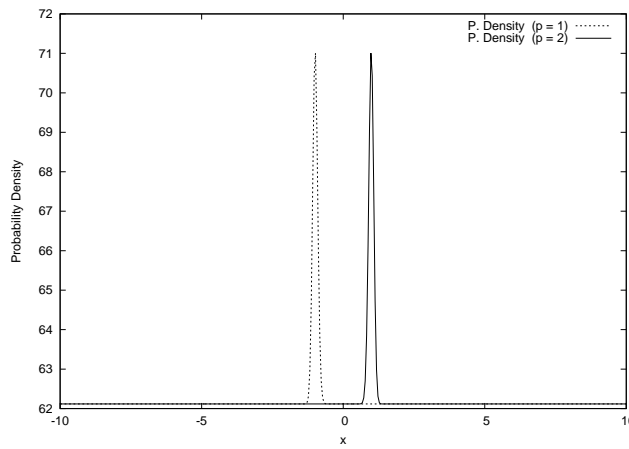
Figure 6: Densités de probabilité pour le potentiel harmonique



(a) $V_0 = 10^{-3}$



(b) $V_0 = 1$



(c) $V_0 = 10^3$

Figure 7: Densités de probabilité pour le double puits à différentes valeurs V_0