

Différences Finies Explicites Centrées pour la Discrétisation de l'équation de Schrödinger 1D indépendante du temps

NABADIATA MBALA Pierre

Chef de Travaux à l'Université Pédagogique Nationale

Résumé

Le présent article discrétise l'équation de Schrödinger 1D indépendante du temps à l'aide de Différences Finies Explicites dans un espace unidimensionnel discret. La discrétisation de l'équation de Schrödinger est une technique numérique permettant de résoudre l'équation dans un espace discret. Après discrétisation, l'équation de Schrödinger est écrite sous forme algébrique, c'est-à-dire un système linéaire. En utilisant ce système, l'équation peut être réécrite sous forme matricielle.

Mots-clés : *Discrétisation – Equation de Schrödinger – Différences finies explicites centrées – Système linéaire – Forme matricielle.*

Abstract

This article discretizes the time-independent 1D Schrödinger equation using Explicit Finite Differences in a discrete one-dimensional space. The discretization of the Schrödinger equation is a numerical technique that allows the equation to be solved in a discrete space. After discretization, the Schrödinger equation is written in algebraic form, that is, as a linear system. Using this system, the equation can be rewritten in matrix form.

Keywords : *Discretization – Schrödinger equation – Centered explicit finite differences – Linear system – Matrix form.*

1. Introduction

L'article montre comment faire la discrétisation de l'équation de Schrödinger 1D indépendante du temps, à l'aide de la méthode des différences finies centrées. La méthode consiste donc à approximer les dérivées des équations de la physique au moyen des développements de Taylor et se déduit directement de la définition de la dérivée.

L'approximation par différences finies centrées permettant de transformer l'équation de Schrödinger, une équation différentielle, en un système d'équations algébriques rend la résolution numérique de l'équation beaucoup plus accessible.

2. Equation de Schrödinger : un cadre fondamental

L'équation de Schrödinger est l'équation centrale de la mécanique quantique. Elle décrit l'évolution temporelle d'un système quantique. Dans sa version indépendante du temps et à une dimension, elle s'écrit :

$$-\hbar^2/2m (d^2\psi/dx^2) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

où

\hbar est la constante de Planck réduite

m , la masse de la particule

$\psi(x)$, la fonction d'onde, qui contient toute l'information sur le système

$V(x)$, l'énergie potentielle

E , l'énergie totale du système

2.1 Interprétation physique des termes

2.1.1 Fonction d'onde $\psi(x)$

a. Nature probabiliste : Le carré du module de la fonction d'onde, $|\psi(x)|^2$, représente la densité de probabilité de trouver la particule à la position x . Autrement dit, il indique la probabilité de mesurer la particule dans un intervalle infinitésimal dx autour de x .

b. Interférence : La fonction d'onde peut présenter des phénomènes d'interférence, similaires aux ondes classiques. Ces interférences sont à l'origine de nombreux effets quantiques, comme les niveaux d'énergie discrets.

c. Superposition d'états : Une particule quantique peut se trouver dans une superposition d'états, c'est-à-dire être dans plusieurs états à la fois jusqu'à la mesure.

2.1.2 Énergie cinétique $-\hbar^2/2m (d^2\psi/dx^2)$

a. Opérateur énergie cinétique : Le terme $-\hbar^2/2m (d^2\psi/dx^2)$ correspond à l'opérateur énergie cinétique.

b. Mesure de l'énergie cinétique : L'action de cet opérateur sur la fonction d'onde permet d'obtenir des informations sur la distribution de l'énergie cinétique dans le système. Plus la fonction d'onde est rapidement variable (c'est-à-dire, plus sa dérivée seconde est grande), plus l'énergie cinétique est élevée dans cette région de l'espace.

2.1.3 Énergie potentielle $V(x)\psi(x)$

a. Potentiel et énergie : Le terme $V(x)\psi(x)$ représente l'énergie potentielle de la particule à la position x . Le potentiel $V(x)$ dépend du système étudié (par exemple, potentiel coulombien pour un électron dans un atome).

b. Influence sur la forme de la fonction d'onde : La forme du potentiel $V(x)$ influence fortement la forme de la fonction d'onde et donc la probabilité de présence de la particule dans les différentes régions de l'espace.

2.2 Énergie totale $E\psi(x)$

a. Valeur propre de l'énergie : E est une valeur propre de l'équation de Schrödinger. Elle représente l'énergie totale du système, c'est-à-dire la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle.

b. Quantification de l'énergie : Pour certains potentiels (par exemple, le puits de potentiel infini), les valeurs possibles de E sont quantifiées, ce qui signifie qu'elles ne peuvent prendre que certaines valeurs discrètes.

En résumé, l'équation de Schrödinger établit une relation entre la fonction d'onde, qui décrit l'état quantique d'une particule, et les grandeurs physiques associées à cette particule, comme l'énergie cinétique et l'énergie potentielle. La résolution de cette équation permet de déterminer les états stationnaires d'un système quantique, c'est-à-dire les états dont l'énergie ne varie pas au cours du temps.

3. Discrétisation de l'espace

Les ordinateurs ne peuvent manipuler que des nombres finis. La discrétisation permet de transformer une équation différentielle (l'équation de Schrödinger) en un système d'équations algébriques, plus facile à résoudre numériquement.

La discrétisation de l'espace est une étape fondamentale pour la résolution numérique de l'équation de Schrödinger. Elle permet de transformer un problème continu en un problème discret, plus facile à manipuler numériquement. Le choix du *pas* de grille dx est crucial pour la précision de la solution.

Une fois l'espace discrétisé, on peut utiliser des méthodes numériques, notamment les différences finies, pour approcher la solution.

3.1 Principe – ordre de précision

On considère un intervalle spatial $[x_{min}, x_{max}]$ où l'on souhaite résoudre l'équation. On divise cet intervalle en N points équidistants. La distance entre deux points consécutifs est appelée *pas* de grille et est notée dx . Elle est calculée de la manière suivante :

$$dx = (x_{max} - x_{min}) / (N - 1)$$

Les points de discrétisation sont alors définis par :

$$x_i = x_{min} + i * dx, \quad \text{pour } i = 0, 1, \dots, N - 1$$

Plus le nombre de points N est grand, plus le pas dx est petit et meilleure est l'approximation de la solution continue.

En pratique, un compromis doit être trouvé entre la précision de la solution et le coût de calcul, qui augmente avec N .

La Méthode des Différences Finies consiste donc à approximer les dérivées des équations de la physique au moyen des développements de Taylor et se déduit directement de la définition de la dérivée.

Soit $u(x, y, z, t)$ une fonction de l'espace et du temps. Par définition de la dérivée, on a :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x, y, z, t) - u(x, y, z, t)}{\Delta x}$$

Si Δx est petit, un développement de Taylor de $u(x + \Delta x, y, z, t)$ au voisinage de x donne :

$$\begin{aligned} & u(x + \Delta x, y, z, t) \\ &= u(x, y, z, t) + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x, y, z, t) + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y, z, t) \\ &+ \frac{\Delta x^3}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x, y, z, t) + \dots \end{aligned}$$

En tronquant la série au premier ordre en Δx , on obtient :

$$\frac{u(x + \Delta x, y, z, t) - u(x, y, z, t)}{\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x}(x, y, z, t) + \mathcal{O}(\Delta x)$$

L'approximation de la dérivée $\frac{\partial u}{\partial x}(x)$ est alors d'ordre 1 indiquant que l'erreur de troncature $\mathcal{O}(\Delta x)$ tend vers zéro comme la puissance première de Δx .

3.2 Approximation par les Différences Finies

On utilise les Différences Finies pour approximer les dérivées secondes.

Ainsi, la dérivée seconde ($d^2\psi/dx^2$) au point x_i peut être approchée ou approximée par la **différence finie centrée** :

$$(d^2\psi/dx^2) \approx (\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}) / dx^2$$

Cette approximation est basée sur un développement en série de Taylor tronqué au deuxième ordre.

4. Formulation discrète de l'équation de Schrödinger

En substituant cette approximation dans l'équation de Schrödinger, c'est-à-dire

en remplaçant la dérivée seconde par son approximation dans l'équation de Schrödinger, on obtient pour chaque point x_i :

$$-\hbar^2/2m * (\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}) / dx^2 + V(x_i)\psi_i = E\psi_i$$

où (**Interprétation physique**) :

$\psi_{(i+1)}, \psi_i, \psi_{(i-1)}$: Valeurs de la fonction d'onde aux points voisins de x_i .

dx^2 : Carré de la distance entre deux points consécutifs.

Le terme $(\psi_{(i+1)} - 2\psi_i + \psi_{(i-1)}) / dx^2$ représente la courbure de la fonction d'onde au point x_i .

Cette équation nous permet de calculer la valeur de la fonction d'onde au point suivant $(i+1)$ en fonction des valeurs aux points précédents $(i$ et $i-1)$.

Cette approximation revient à remplacer l'équation différentielle (équation de Schrödinger) par une équation aux différences finies. Chaque point de la grille spatiale est couplé à ses voisins immédiats. La valeur de la fonction d'onde en un point est influencée par les valeurs de ses voisins et par le potentiel local.

L'on remarquera que cette méthode est dite **explicite (schéma explicite d'Euler)** car la valeur de $\psi_{(i+1)}$ est calculée directement à partir des valeurs connues aux itérations précédentes. Il existe d'autres méthodes, comme la méthode **implicite (schéma implicite d'Euler)**, qui peuvent présenter des avantages en termes de stabilité numérique (Il est important de choisir une valeur de dx suffisamment petite pour assurer la convergence de la méthode).

L'approximation par différences finies centrées permet de transformer l'équation de Schrödinger, une équation différentielle, en un système d'équations algébriques. Cela rend la résolution numérique de l'équation beaucoup plus accessible.

5. Système linéaire

Cette équation peut être réécrite sous forme matricielle en utilisant un système linéaire et ce système pour N points de grille est :

$$H\psi = E\psi$$

où $\psi = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N)^T$ est le vecteur des valeurs discrètes de ψ et H est la matrice tridiagonale de Hamiltonien, qui est une matrice de différence seconde D de taille $N \times N$ définie par :

$$D = (1/dx^2) * \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \dots & 0 \\ \dots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Cette matrice est tridiagonale, ce qui signifie qu'elle a des éléments non nuls uniquement sur la diagonale principale, la sous-diagonale et la sur-diagonale

Ainsi, le système d'équations aux différences finies peut s'écrire sous forme matricielle :

$$D\psi \approx (d^2\psi/dx^2)$$

Ce qui s'interprète que chaque ligne de cette équation correspond à l'approximation de la dérivée seconde en un point particulier de la grille. La matrice D capture la structure locale de l'approximation par différences finies, reliant la valeur de la fonction en un point à ses valeurs aux points voisins.

En appliquant cette matrice à l'équation de Schrödinger discrète, on obtient :

$$(-\hbar^2/2m) D\psi + V\psi = E\psi$$

où V est une matrice diagonale contenant les valeurs du potentiel aux différents points de la grille.

Le vecteur ψ contenant les valeurs de la fonction aux points de discrétisation, et b le vecteur contenant les termes de droite $(1/dx^2 * \psi_i)$, on peut écrire l'équation matricielle :

$$A\psi = b$$

La formulation matricielle est concise car elle permet d'écrire un système d'équations complexes de manière compacte. Elle se généralise facilement à des problèmes multidimensionnels et à des équations différentielles d'ordre supérieur. Autre avantage, de nombreux algorithmes efficaces existent pour résoudre des systèmes d'équations linéaires.

En conclusion, la formulation matricielle offre un cadre rigoureux et puissant pour analyser et résoudre numériquement les équations aux

différences finies issues de la discrétisation d'équations différentielles, comme l'équation de Schrödinger. Elle permet de mobiliser les outils de l'algèbre linéaire pour obtenir des solutions numériques précises et efficaces.

Il est clair que les conditions aux limites vont modifier légèrement la première et la dernière ligne de la matrice A . Par exemple, pour des conditions aux limites de Dirichlet ($\psi(0) = \psi(L) = 0$), la première et la dernière ligne de A seront entièrement nulles, sauf le premier et le dernier élément qui vaudront 1.

Cette formulation matricielle est un outil fondamental pour la résolution numérique des équations différentielles ordinaires, et en particulier de l'équation de Schrödinger. Elle peut aussi être appliquée, par exemple en mécanique quantique, pour le calcul des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde d'atomes, de molécules et de solides ; en physique des matériaux, pour la simulation de la diffusion de particules, l'étude de propriétés électroniques des nanomatériaux, et en traitement de signal, pour le filtrage numérique, l'analyse des données.

Pour trouver les valeurs propres de H et les vecteurs propres ψ , on est conduit à résoudre ce système linéaire. Les valeurs propres correspondent aux énergies quantiques et les vecteurs propres représentent les fonctions d'onde discrètes.

Voici un exemple de code en Python utilisant NumPy pour résoudre le système linéaire :

6. Implémentation Python

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def schrodinger_fd(m, hbar, potential, x_min, x_max,
n_points):
    """
    Approximation de l'équation de Schrödinger 1D
    indépendante du temps par différences finies
    explicites.

    Args:
        m (float): Masse de la particule.
        hbar (float): Constante de Planck réduite.
        potential (fonction): Fonction définissant le
potentiel V(x).
        x_min (float): Borne minimale du domaine.
        x_max (float): Borne maximale du domaine.
```



```

    n_points (int): Nombre de points de discrétisation.

Returns:
    tuple: (x, psi, E)
        * x (np.ndarray): Coordonnées spatiales
discrétisées.
        * psi (np.ndarray): Fonction d'onde approchée.
        * E (float): Energie calculée.
"""

# Constantes
dx = (x_max - x_min) / (n_points - 1)
a = hbar**2 / (2 * m * dx**2)

# Grille de points
x = np.linspace(x_min, x_max, n_points)

# Conditions aux limites (ici, fixées à 0 aux
extrémités)
psi = np.zeros(n_points)
psi[0] = 0.0
psi[-1] = 0.0

# Energie (valeur initiale arbitraire)
E = 1.0

# Itérations pour trouver la fonction d'onde
for i in range(1, n_points - 1):
    psi_new = 2.0 * (1.0 - a * potential(x[i])) *
psi[i] - psi[i-1]
    psi[i] = psi_new

# Calcul de l'énergie à partir de la fonction d'onde
dpsi_dx = (psi[2:] - psi[:-2]) / (2.0 * dx)
E = np.sum(-a * dpsi_dx**2 + potential(x[1:-1]) *
psi[1:-1]) * dx

return x, psi, E

# Paramètres d'exemple
m = 1.0 # Masse (unité arbitraire)
hbar = 1.0 # Constante de Planck réduite (unité
arbitraire)
potential = lambda x: 0.5 * x**2 # Potentiel
harmonique

# Paramètres de discrétisation
x_min = -5.0
x_max = 5.0
n_points = 200

# Résolution de l'équation de Schrödinger
x, psi, E = schrodinger_fd(m, hbar, potential, x_min,
x_max, n_points)

```

```
# Affichage des résultats
plt.plot(x, psi, label="Fonction d'onde")
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("Ψ(x)")
plt.title("Approximation de la fonction d'onde par
différences finies explicites")
plt.legend()
plt.show()

print("Energie calculée:", E)
```

Conclusion

Les Différences Finies sont une approche efficace pour discrétiser et résoudre l'équation de Schrödinger dans un espace unidimensionnel. En adaptant cette méthode, on peut étudier diverses configurations de potentiel et obtenir des informations précieuses sur les états quantiques d'un système.

REFERENCES

- [1]. Basdevant J.L., Dalibard J., 2012, *Mécanique quantique*, Ed. de l'école polytechnique.
- [2]. Bédard R., 2003, *Equations aux dérivées partielles*, l'Université du Québec à Montréal.
- [3]. Cohen-Tannoudji C., Diu B., Laloë, 1980, *Mécanique quantique*, Hermann, Paris.
- [4]. David C. et Gosselet P., 2015, *Equations aux dérivées partielles*, ours et exercices corrigés, 2^{ème} édition, Dunod, 5 rue Laromiguière, 75005 Paris.
- [5]. Dubois F., 2009, *Introduction aux Différences finies et aux Eléments finis*, édition de juin 2009.
- [6]. Goncalvès da Silva E., 2011, *Méthodes et Analyse numériques*, Engereering school, Institut Polytechnique de Grenoble, pp99.
- [7]. Lucquin B., 2004, *Equations aux dérivées partielles et leurs approximations*, Ellipse.
- [8]. Mehri Allaoua, 2018-2019, *Méthodes des différences finies pour les équations aux dérivées partielles*, Niveau Master 1, Univ. Du 08 Mai 1945, Guelma
- [9]. Tordeux S. et Péron V., 2020-2021, *Analyse numérique, La méthode des différences finies*, Master 1 MMS, Univ. De Pau.