Oscillateur harmonique quantique discret

Quentin CHAULEUR, IRMAR - Rennes

Dans cet exposé on s'intéressera à une discrétisation particulière sur la droite réelle $\mathbb{R}$ de l'oscillateur harmonique quantique

$$H\psi = -\Delta\psi + (x^2 - 1)\psi$$

pour $\psi \in L^2(\mathbb{R})$. Sur une grille finie $A_h := \left[-\frac{1}{h}, \frac{1}{h}\right] \cap h\mathbb{Z}$, cet opérateur discret s'écrit

$$H_h g(a) = -\left(\frac{1}{h^2}\sqrt{(1+ah+h^2)(1-ah)}g(a+h) + \frac{1}{h^2}\sqrt{(1-ah+h^2)(1+ah)}g(a-h) - \frac{2}{h^2}g(a)\right),$$

pour tout $a \in A_h$, et $H_h g(a) = 0$ si $a \notin A_h$. Cet opérateur, introduit dans la littérature physique, notamment par N. M. Atakishiyev [1] et M. Lorente [2], est auto-adjoint sur l'espace de Hilbert $L^2(h\mathbb{Z})$ définit via la norme

$$\|g\|^2_{L^2(h\mathbb{Z})} = h \sum_{a \in h\mathbb{Z}} |g(a)|^2,$$

où $h > 0$ désigne un petit paramètre de discrétisation. On énonce alors le théorème suivant, qui étudie la convergence de cet opérateur discret et de ses fonctions propres quand $h \to 0$:

Théorème 1. *On note Π_h le projecteur de $H^1(\mathbb{R})$ dans $L^2(h\mathbb{Z})$, et $u = \Pi_h \boldsymbol{u}$ pour $\boldsymbol{u} \in H^1(\mathbb{R})$. Alors*

$$\|\Pi_h H\boldsymbol{u} - H_h u\|_{L^2(h\mathbb{Z})} \leq Ch^2$$

pour u suffisamment régulière. De plus, on suppose que $N = 2/h^2 \in 2\mathbb{N}$, alors il existe une suite orthogonale $(\varphi_{n,h})_{0 \leq n \leq N}$ de $L^2(h\mathbb{Z})$ tel que

$$H_h \varphi_{n,h} = 2n\varphi_{n,h}$$

pour tout $0 \leq n \leq N$, et pour tout $\delta > 0$,

$$\|\alpha_{n,h}\varphi_{n,h} - \Pi_h \boldsymbol{\psi_n}\|_{L^2(h\mathbb{Z})} \leq Ch^{2-\delta},$$

où $\alpha_{n,h} \sim_0 1/\sqrt{h}$ et $(\boldsymbol{\psi_n})_{n \in \mathbb{N}^*}$ désigne la base de fonction d'Hermite usuelle de $L^2(\mathbb{R})$.

Les fonctions propres $\varphi_{n,h}$, appelées *fonctions de Kravchuk*, correspondent au produit des polynômes de Kravchuk [3] et d'une loi binomiale renormalisée sur la grille A_h. On étudiera également le schéma semi-discret associé à cet opérateur

$$i\partial_t \psi + H_h \psi = 0$$

pour $\psi \in L^2(h\mathbb{Z})$, qui conserve la norme $L^2(h\mathbb{Z})$ ainsi que l'énergie discrète associée pour tout $t \geq 0$:

$$E(t) := \frac{1}{h}\sum_{a \in h\mathbb{Z}} \left(\sqrt{(1-ah+h^2)(1+ah)}\,\mathrm{Re}(\psi(a)\overline{\psi}(a-h)) - |\psi(a)|^2\right) \mathbf{1}_{-\frac{1}{h} \leq a \leq \frac{1}{h}} = E(0).$$

L'ensemble de ces résultats sera illustré par des simulations numériques.

[1] N. M. Atakishiyev, K. B. Wolf. *Fractional Fourier-Kravchuk transform.* J. Opt. Soc. Amer. A, **14(7)**, 1467–1477, 1997.

[2] M. Lorente. *Creation and annihilation operators for orthogonal polynomials of continuous and discrete variables.* vol. 9, pp. 102–111, 1999. Orthogonal polynomials : numerical and symbolic algorithms (Leganés, 1998).

[3] A. F. Nikiforov, S. K. Suslov, V. B. Uvarov. *Classical orthogonal polynomials of a discrete variable.* Springer Series in Computational Physics. Springer-Verlag, Berlin, 1991.

Contact : `quentin.chauleur@ens-rennes.fr`