2TSI. DEVOIR LIBRE N°07

À rendre le 04 février 2021

Ce problème est composé de quatre parties qui ne sont pas indépendantes.

Pour tout $n \in \mathbb{N}$, $n \geqslant 2$, on pose $A_n = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ et on note I_n la matrice identité d'ordre n.

Pour toute matrice M de $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, par convention $M^0 = I_n$.

1) Préliminaires

Soit $n \in \mathbb{N}^*$. Soient A et B deux matrices de $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$. On suppose qu'il existe $P \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ inversible telle que $A = PBP^{-1}$.

a) Montrer que pour tout $k \in \mathbb{N}$, $A^k = PB^kP^{-1}$.

b) En déduire que pour tout $N \in \mathbb{N}$, pour tout $a_0, \ldots, a_N$ dans $\mathbb{R}$: $\displaystyle\sum_{k=0}^{N} a_k A^k = P\left(\sum_{k=0}^{N} a_k B^k\right) P^{-1}$.

c) Expliciter $\displaystyle\sum_{k=0}^{N} a_k B^k$ lorsque B est la matrice diagonale : $\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$.

2) Diagonalisation d'une famille de matrices 3×3

On considère, dans cette question, les matrices $A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ et $J = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$.

a) Déterminer une matrice diagonale D_3 et une matrice inversible P_3 telles que $A_3 = P_3 D_3 P_3^{-1}$.

b) On considère l'ensemble $\mathcal{F} = \left\{ M(a,b,c) = \begin{pmatrix} a & c & b \\ c & a+b & c \\ b & c & a \end{pmatrix} \mid (a,b,c) \in \mathbb{R}^3 \right\}$.

Montrer que $\mathcal{F}$ est un sous-espace vectoriel de $\mathcal{M}_3(\mathbb{R})$ et en donner une base.

c) Justifier que toute matrice $M(a,b,c)$ de $\mathcal{F}$ est diagonalisable.

d) Exprimer A_3^2 en fonction de J et de I_3.

e) Soit $M(a,b,c)$ appartenant à $\mathcal{F}$. Exprimer $M(a,b,c)$ en fonction de I_3, A_3 et A_3^2.

f) En déduire les valeurs propres et les vecteurs propres de $M(a,b,c)$.

3) Application en physique

On considère, dans cette question, la matrice $A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$.

On considère un système de 3 oscillateurs couplés, où les 4 ressorts sont identiques et de constante de raideur k. Les positions des masses m sont repérées par leurs abscisses x_1, x_2 et x_3 à partir de leur position d'origine respective O_1, O_2 et O_3, positions pour lesquelles les ressorts ne sont pas tendus. On suppose qu'on lâche les masses aux abscisses x_{1m}, x_{2m} et x_{3m} sans vitesse initiale.

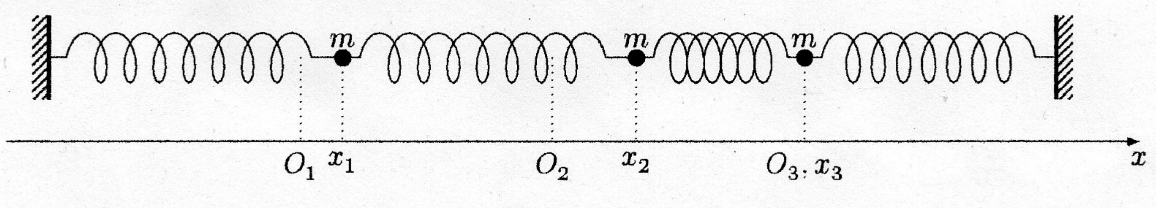

Figure 1

T.S.V.P →

On montre, en appliquant le principe fondamental de la dynamique et en posant $\omega_0^2 = k/m$ (avec $\omega_0 \in \mathbb{R}^{+*}$), que les abscisses x_1, x_2 et x_3 vérifient le système différentiel

$$(S1) : \begin{cases} x_1''(t) &= -2\omega_0^2 x_1(t) + \omega_0^2 x_2(t) \\ x_2''(t) &= \omega_0^2 x_1(t) - 2\omega_0^2 x_2(t) + \omega_0^2 x_3(t) \\ x_3''(t) &= \omega_0^2 x_2(t) - 2\omega_0^2 x_3(t) \end{cases}$$

On pose $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$.

a) Déterminer une matrice M_3 telle que $(S1)$ s'écrive $X''(t) = M_3 X(t)$.

b) Exprimer cette matrice M_3 en fonction de A_3 et de I_3.

c) En déduire une matrice D_3' diagonale et une matrice P_3' inversible telles que $M_3 = P_3' D_3' P_3'^{-1}$.

d) Résoudre alors le système $(S1)$, c'est-à-dire déterminer les expressions de x_1, x_2 et x_3 en fonction de t et des conditions initiales x_{1m}, x_{2m} et x_{3m}.

4) Application en chimie

On considère, dans cette question, la matrice $A_4 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$.

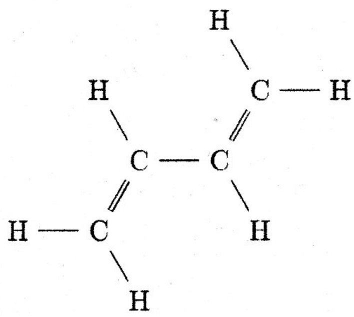

Figure 2 trans-butadiène

Dans le modèle quantique de l'atome, on ne considère plus que les électrons d'un atome sont en orbite circulaire autour du noyau, mais occupent de manière probabiliste certaines régions de l'espace autour du noyau. Une orbitale atomique correspond à une région de l'espace dans laquelle on a 95% de chance de trouver un électron considéré. Pour une molécule, constituée de plusieurs atomes, on parle d'orbitale moléculaire. En 1930, Hückel publie une méthode permettant de déterminer des orbitales moléculaires qui conduit à diagonaliser des matrices tridiagonales. Par exemple, si on s'intéresse à la construction des orbitales moléculaires du trans-butadiène (figure 2), les orbitales moléculaires, notées π, sont des combinaisons linéaires d'orbitales atomiques, notées respectivement p_1, p_2, p_3 et p_4 des atomes de carbone, elles s'écrivent sous la forme $\pi = C_1p_1 + C_2p_2 + C_3p_3 + C_4p_4$.

On est alors amené à déterminer les valeurs de ε, pour lesquelles il existe C_1, C_2, C_3 et C_4 réels non tous nuls, solutions du système

$$(S2) : \begin{cases} \alpha C_1 + \beta C_2 &= \varepsilon C_1 \\ \beta C_1 + \alpha C_2 + \beta C_3 &= \varepsilon C_2 \\ \beta C_2 + \alpha C_3 + \beta C_4 &= \varepsilon C_3 \\ \beta C_3 + \alpha C_4 &= \varepsilon C_4 \end{cases}$$

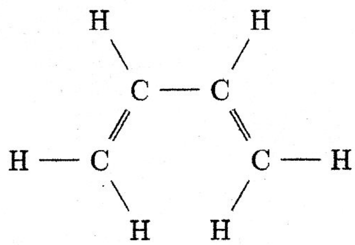

Figure 3 cis-butadiène

Les différentes valeurs de ε que l'on va trouver correspondent aux énergies des différentes orbitales moléculaires possibles. α et β sont des constantes données, indépendantes des atomes de carbone considérés. La constante α correspond à une énergie propre à l'atome de carbone. La constante β correspond à une énergie d'interaction entre deux atomes de carbone voisins.

a) À la recherche des valeurs propres et vecteurs propres de quelle matrice correspond la recherche des ε, pour lesquelles il existe C_1, C_2, C_3 et C_4 non tous nuls, solutions de $(S2)$?

On note M_4 cette matrice.

b) Exprimer M_4 en fonction de I_4 et de A_4.

c) On admet que si on pose $\varphi = \dfrac{1+\sqrt{5}}{2}$, $D_4 = \begin{pmatrix} \varphi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-\varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varphi - 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\varphi \end{pmatrix}$ et $P_4 = \begin{pmatrix} \varphi - 1 & \varphi & \varphi & \varphi - 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ \varphi - 1 & \varphi & -\varphi & 1 - \varphi \end{pmatrix}$,

alors P_4 est inversible et on a $D_4 = P_4^{-1} A_4 P_4$.

Déterminer, en fonction de φ, une matrice D_4' diagonale et une matrice P_4' inversible telle que $D_4' = P_4'^{-1} M_4 P_4'$. En déduire les différentes valeurs de ε possibles et, pour chaque valeur de ε, les valeurs de C_1, C_2, C_3 et C_4 correspondantes.

d) On s'intéresse maintenant aux orbitales moléculaires de la molécule de cis-butadiène (cf figure 3). On souhaite appliquer à cette molécule la même méthode que précédemment, mais sans négliger l'énergie d'interaction entre le premier et le dernier atome de carbone. Quels coefficients de M_4 doit-on modifier ? On ne demande pas de calcul.