

Physique Numérique sem. 24-25

- 4.3 Mécanique quantique – Eq. de Schrödinger
 - 4.3.1 Schéma semi-implicite de Crank-Nicolson
 - 4.3.2 Particule libre. Paquet d'onde. Etalelement.
 - 4.3.3 Barrière de potentiel. Effet tunnel.
- Exercice 8: 4 séances
- ATTENTION : commencer à y travailler dès la première séance!

4.3 Mécanique Quantique - Schrödinger

■ 4.3 Schrödinger

□ Corpusculaire, ondulatoire, probabiliste $|\psi(\vec{x}, t)|^2$

Particule
libre:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

$$E = \hbar \omega$$

$$\psi(\vec{x}, t) \sim \exp(i(kx - \omega t))$$

$$\nabla \leftrightarrow ik$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \leftrightarrow -i\omega$$

Particule
dans un
potentiel
 $V(x)$:

$$\vec{p} \leftrightarrow -i\hbar \nabla$$

$$E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{x})$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi$$

$$H(\psi)$$

■ Solution Eq. Schrödinger

$$\psi(x, t) = \underbrace{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}tH\right)} \psi(x, 0)$$

- Propagateur (opérateur d'évolution temporelle)
- Propriété: unitarité (conservation de la probabilité)

■ 4.3.1 Schéma numérique semi-implicite

□ Crank-Nicolson

- Discrétisation temporelle, pas de temps uniforme Δt

$$\psi(x, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t H\right) \psi(x, t)$$

Appliquant l'opérateur $\exp\left(+\frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} H\right)$ des 2 côtés,

Et développant au 1^{er} ordre de \exp

$$\underbrace{\left(1 + \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} H\right)}_{\text{Opérateur } A. \text{ Partie implicite: il faut inverser l'opérateur}} \psi(x, t + \Delta t) = \underbrace{\left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} H\right)}_{\text{Opérateur } B. \text{ Partie explicite: il faut appliquer l'opérateur}} \psi(x, t) \quad (4.90)$$

Opérateur *A*. Partie implicite:
il faut inverser l'opérateur

Opérateur *B*. Partie explicite:
il faut appliquer l'opérateur

- **Discrétisation spatiale, maillage uniforme Δx**
- **Approximation par différences finies de l'opérateur différentiel spatial:**

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Big|_j = \frac{\psi_{j-1} - 2\psi_j + \psi_{j+1}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x^2)$$

Ainsi, l'opérateur Hamiltonien H peut s'écrire comme une matrice H . Appliquer l'opérateur H sur ψ revient à **multiplier la matrice H par le vecteur ψ** constitué des valeurs de ψ aux points de maillage x_j .

De même, les opérateurs *A* et *B* deviennent des matrices *A* et *B*.

- Schéma de Crank-Nicolson, ***semi-implicite***:

$$A \Psi|_{t+\Delta t} = B \Psi|_t$$

$$\begin{pmatrix} dA_0 & cA_0 & & & & \\ aA_0 & \dots & \dots & & & \\ \dots & \dots & cA_{N-2} & & & \\ & aA_{N-2} & dA_{N-1} & \Psi_{N-1} \end{pmatrix}_{t+\Delta t} = \begin{pmatrix} dB_0 & cB_0 & & & & \\ aB_0 & \dots & \dots & & & \\ \dots & \dots & cB_{N-2} & & & \\ & aB_{N-2} & dB_{N-1} & \Psi_{N-1} \end{pmatrix}_t \quad (4.99)$$

Implicit. $A \Psi = \dots$. Résolution d'un système algébrique linéaire

Explicit. $B \Psi$. Multiplication matrice vecteur

- Le schéma de Crank-Nicolson a les bonnes propriétés suivantes:

➤ Il conserve la probabilité totale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1, \forall t$$

➤ ... et l'énergie

$$E(t) \equiv \langle H \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) H(\psi(x, t)) dx = E(0), \forall t$$

... à la précision machine!

➤ **Preuve: au tableau**

Physique Numérique I-II semaines 24-25

- Schéma de Crank-Nicolson, *semi-implicite*:

$$A \Psi|_{t+\Delta t} = B \Psi|_t$$

- Conditions aux limites, cas d'un puits de potentiel infini dans $[x_L, x_R]$:

$$\psi(x_L, t) = 0, \psi(x_R, t) = 0, \forall t$$

$$\begin{pmatrix} \cancel{dA_0} & \cancel{cA_0} & 0 \\ \cancel{aA_0} & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \cancel{cA_{N-2}} \\ aA_{N-2} & \cancel{dA_{N-1}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}_{t+\Delta t} = \begin{pmatrix} \cancel{dB_0} & \cancel{cB_0} & 0 \\ \cancel{aB_0} & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \cancel{cB_{N-2}} \\ aB_{N-2} & \cancel{dB_{N-1}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}_t \quad (4.99)$$

0 1 0 1 0

Les éléments des matrices et des vecteurs «...» sont inchangés.

Le système «...» est en fait équivalent à celui résultant de la discréttisation sur le domaine $[x_L + \Delta x, x_R - \Delta x]$, dans lequel on aurait “oublié” d’appliquer les conditions aux limites.

Autrement dit, si vous «oubliez» d’appliquer les conditions aux limites sur le système (4.99), c’est comme si vous aviez en fait résolu le problème sur le domaine $[x_L - \Delta x, x_R + \Delta x]$ **avec** ses conditions aux limites.

■ Les observables de la mécanique quantique

Produit scalaire: $(\eta, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \eta^*(x, t)\psi(x, t) dx$

Opérateur adjoint: Ω^* , tel que $(\Omega\eta, \psi) = (\eta, \Omega^*\psi), \forall \eta, \forall \psi$

Opérateur hermitien: $\Omega^* = \Omega$

Opérateur unitaire: $\Omega^*\Omega = 1$

Observable: décrit par un opérateur hermitien (= auto-adjoint)

Par exemple: $1, \vec{x}, \vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}, H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$ sont des observables

Propriété: toutes les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont réelles

■ Interprétation probabiliste, moyennes et écart-types

$$\langle x \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx \quad \langle p \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right) dx$$

$$\langle x^2 \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) x^2 \psi(x, t) dx \quad \langle p^2 \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \right) dx$$

$$(\Delta x)^2(t) = \langle x^2 \rangle(t) - \langle x \rangle^2(t) \quad (\Delta p)^2(t) = \langle p^2 \rangle(t) - \langle p \rangle^2(t)$$

$$E(t) \equiv \langle H \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) H(\psi(x, t)) dx$$

■ Propriétés

$$\langle p^2 \rangle(t) = \int \psi^*(x, t) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \right) dx$$

Probabilité totale conservée: $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx = 1, \forall t$

Valeur moyenne de l'énergie conservée: $E(t) = E(0), \forall t$

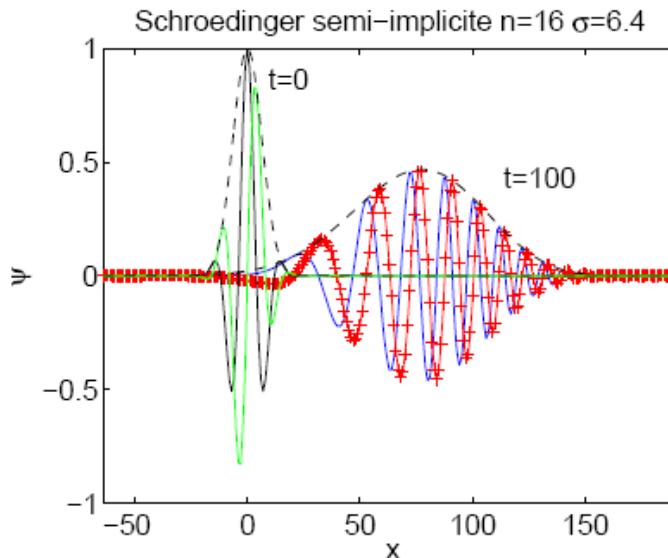
- Paquet d'onde Gaussien: on initialise l'état de la particule par une onde plane dont l'amplitude est modulée par une fonction Gaussienne

$$\psi(x, 0) = Ce^{ik_0 x} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}$$

- Simulons la particule libre ($V=0$)

■ Exemples

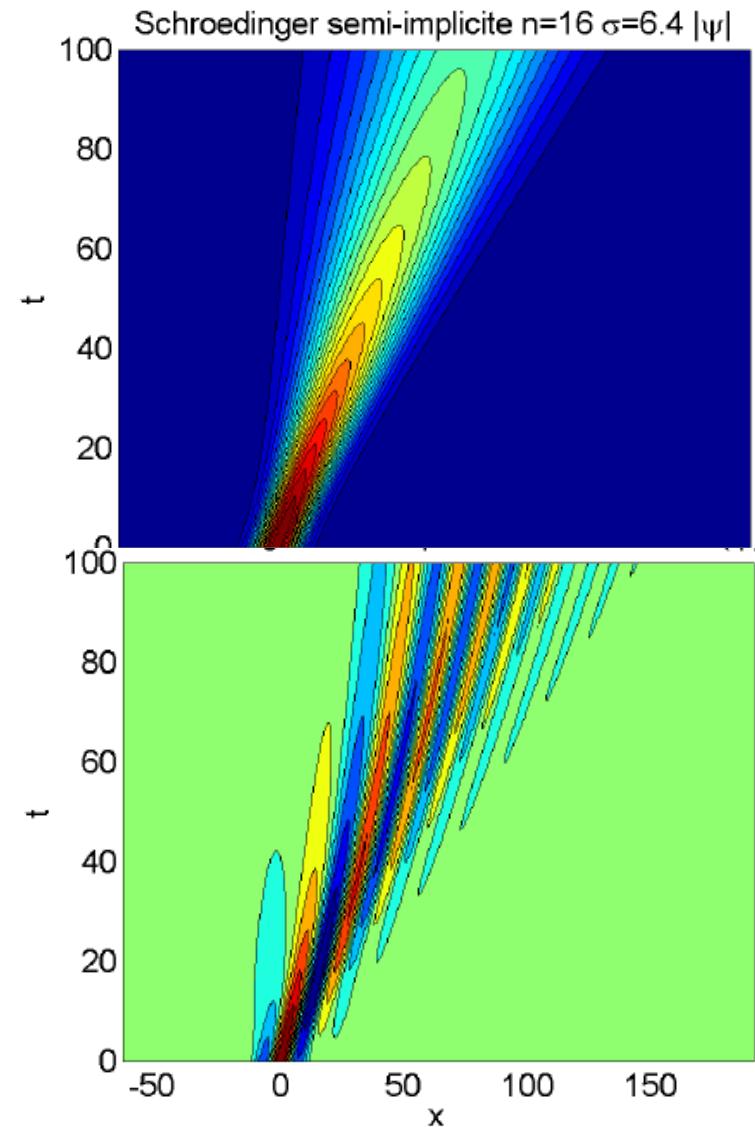
□ 4.3.2 Particule libre



Etalement du paquet d'onde.

Effet de la **dispersion**, **pas de diffusion!**

(Etalement n'est **pas** $\sim \sqrt{t}$)



■ Quiz

Comment faire partir le paquet d'onde vers la gauche (onde rétrograde) ?

On remarque que l'Eq. de Schrödinger est du premier ordre en dérivée temporelle ($\frac{\partial \psi}{\partial t}$), et non du 2^e ordre comme les ondes classiques (d'Alembert), ($\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}$)

Il n'y a donc qu' **une** seule condition initiale à imposer :
 $\psi(x, 0)$ connu $\Rightarrow \psi(x, t)$ connu $\forall t$

Dans le schéma numérique, on n'initialise **pas** $\psi(x, -\Delta t)$

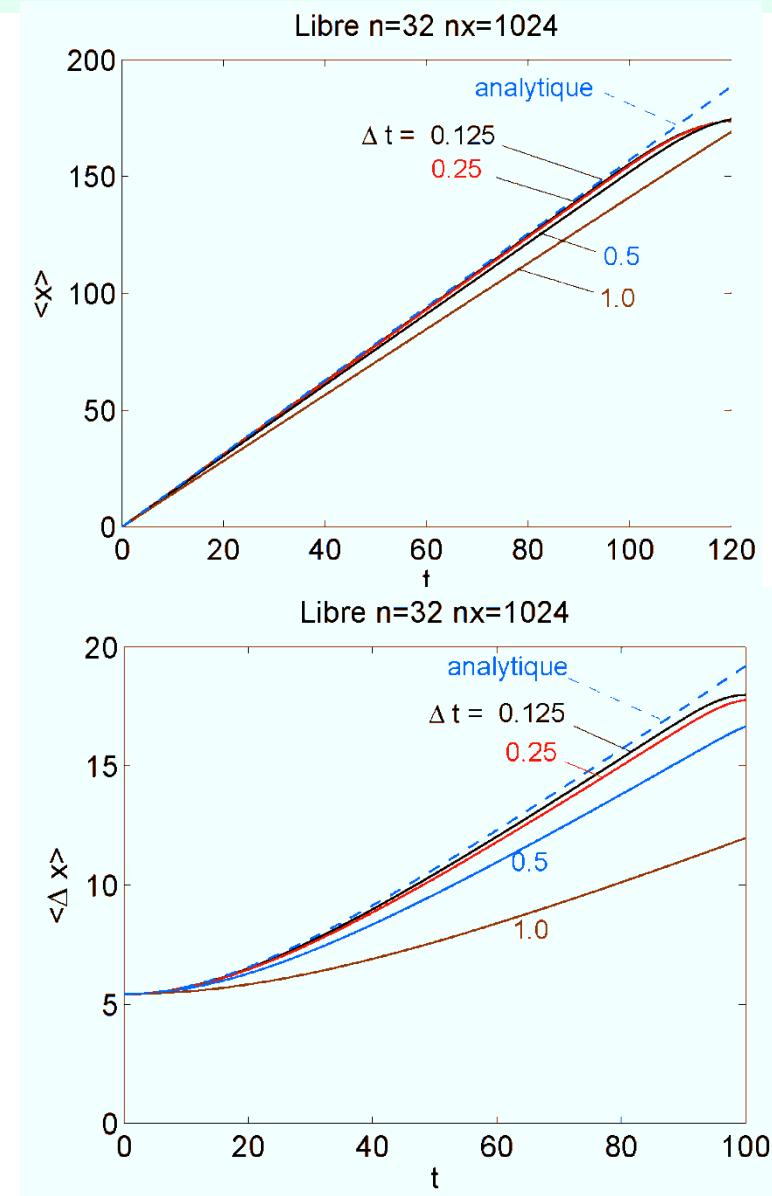
■ Propagation

$$\langle x \rangle(t) = \int \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx$$

$$\langle x \rangle(t) = \langle x \rangle(0) + \frac{\hbar k_0}{m} t$$

■ Etalelement

$$\langle \Delta x \rangle(t) = \langle \Delta x \rangle(0) \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \sigma^2}}$$



■ Principe d'incertitude de Heisenberg

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \hbar / 2$$

- Peut se comprendre à l'aide de la transformée de Fourier
 - Des démonstrations seront présentées au cours
 - Preuve mathématique formelle:
 - <https://www.brown.edu/academics/applied-mathematics/sites/brown.edu.academics.applied-mathematics/files/uploads/26%20Heisenbergsinequality.pdf>

- Principe d'incertitude de Heisenberg et transformées de Fourier

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}(k, t) e^{ikx} dk \quad \hat{\psi}(k, t) \text{ est la T.F. en } x \text{ de } \psi(x, t)$$

N.B.: On peut ensuite faire la T.F en t de $\hat{\psi}(k, t)$. Cependant, dans la suite, nous omettrons la dépendance en t .

- Theorem (Fourier-Heisenberg): $(\Delta x)(\Delta k) \geq 1/2$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} ik\hat{\psi} e^{ikx} dk \quad ik\hat{\psi} \text{ est la T.F. en } x \text{ de } \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

On définit l'opérateur $k = -i \frac{\partial}{\partial x}$ et $(\Delta k)^2(t) = \langle k^2 \rangle(t) - \langle k \rangle^2(t)$

- Quantique On a $p = \hbar k$, donc : $(\Delta x)(\Delta p) \geq \hbar / 2$

Le schéma de Crank-Nicolson conserve la probabilité: $(\psi, \psi) = \text{const}$

Preuve:

$$\underbrace{\left(1 + \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} H\right)}_{\text{Opérateur } A.} \psi(x, t + \Delta t) = \underbrace{\left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} H\right)}_{\text{Opérateur } B.} \psi(x, t) \quad (4.90)$$

soit $\alpha = \frac{\Delta t}{2\hbar} H$ H hermitien $\Rightarrow \alpha$ hermitien $\Rightarrow B = A^* \Rightarrow$

$$\boxed{\psi_{t+\Delta t} = A^{-1} A^* \psi_t} \quad \text{soit } T_{\Delta t} = A^{-1} A^* \quad \boxed{\psi_{t+\Delta t} = T_{\Delta t} \psi_t}$$

Lemme 1: $\boxed{T_{-\Delta t} = T_{\Delta t}^*}$ (preuves au tableau)

Lemme 2: $\boxed{T_{-\Delta t} = (T_{\Delta t})^{-1}}$ Exprime la **réversibilité** du schéma

Le schéma de Crank-Nicolson conserve la probabilité: $(\psi, \psi) = \text{const}$

$$\text{Lemmes 1 et 2} \Rightarrow (T_{\Delta t})^{-1} = T_{\Delta t}^* \Leftrightarrow \boxed{T_{\Delta t} T_{\Delta t}^* = 1}$$

L'opérateur d'évolution temporelle est **unitaire**

Cette propriété implique directement la conservation de la probabilité. En effet:

$$(\psi_{t+\Delta t}, \psi_{t+\Delta t}) = (T_{\Delta t} \psi_t, T_{\Delta t} \psi_t) = (\psi_t, T_{\Delta t}^* T_{\Delta t} \psi_t) = (\psi_t, \psi_t)$$

Un schéma complètement implicite ne conserve pas la probabilité:

$$\boxed{\psi_{t+\Delta t} = (1 + 2i\alpha)^{-1} \psi_t}$$

Lemme 1: $\boxed{T_{-\Delta t} = T_{\Delta t}^*}$ OK!

Lemme 2: $\boxed{T_{-\Delta t} \neq (T_{\Delta t})^{-1}}$ Le schéma implicite n'est **PAS réversible!**

Un schéma complètement explicite ne conserve pas la probabilité:

$$\psi_{t+\Delta t} = (1 - 2i\alpha) \psi_t$$

Lemme 1:

$$T_{-\Delta t} = T_{\Delta t}^*$$

OK!

Lemme 2:

$$T_{-\Delta t} \neq (T_{\Delta t})^{-1}$$

Le schéma explicite n'est **PAS réversible!**

Le schéma Crank-Nicolson est **semi-implicite**, ou «**centré**» au milieu de l'intervalle temporel. Cette propriété est ici liée à la propriété de conservation. De façon générale, les schémas «centrés» sont préférables. Les différences finies gagnent en ordre de convergence.

La propriété de conservation de la probabilité s'appuie essentiellement sur la propriété que l'Hamiltonien H est hermitien. Il est donc essentiel que la discrétisation spatiale de l'Hamiltonien préserve cette propriété, i.e. **il faut que la matrice H soit hermitienne!**

La propriété de conservation de l'énergie, en mécanique quantique, devient la conservation de l'espérance mathématique de l'hamiltonien. Elle s'appuie essentiellement sur la propriété que l'Hamiltonien H est hermitien. Il est donc essentiel que la discrétisation spatiale de l'Hamiltonien préserve cette propriété. Une fois de plus: **il faut que la matrice H soit hermitienne!**

$$\langle H \rangle(t) = \text{const}$$

Preuve:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle H \rangle(t) &= \frac{d}{dt} (\psi, H\psi) = \left(\frac{\partial \psi}{\partial t}, H\psi \right) + \left(\psi, H \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \\
 \text{Eq. Schrödinger:} \quad &= \left(\frac{\partial \psi}{\partial t}, i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + \left(H\psi, \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \\
 &= \left(\frac{\partial \psi}{\partial t}, i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + \left(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = 0
 \end{aligned}$$

Détection de particule

- Que se passe-t-il si le détecteur détecte une particule («tac»)?
- Que devient la fonction d'onde?
- La détection conserve-t-elle l'énergie?
- ***Cela fait-il une différence sur l'évolution ultérieure ($t > t_{tac}$) de la particule si on l'a détectée en $t = t_{tac}$, par rapport au cas où on ne l'a pas détectée ?***
- Complément facultatif Ex.8