Physique Numérique sem. 26

- **4.3 Mécanique quantique – Eq. de Schrödinger**
  - 4.3.1 Schéma semi-implicite de Crank-Nicolson
    - Conservation de la probabilité totale (preuve)
    - Conservation de l'énergie
  - 4.3.2 Particule libre. Paquet d'onde. Etalement.
    - Faire partir le paquet d'onde vers la gauche
  - 4.3.3 Barrière de potentiel. Effet tunnel. Résonances
    - Que se passe-t-il lors de la détection d'une particule?
    - «Réduction» du paquet d'ondes

- **Exercice 8: 4 séances, mais attention, date de rendu le vendredi de la dernière semaine**

Conservation ou non?

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

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

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!***

Conservation ou non?

Un schéma complètement explicite ne conserve pas la probabilité:

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

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

Lemme 2: $\boxed{T_{-\Delta t} \neq \left(T_{\Delta t}\right)^{-1}}$ 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**!

Conservation de l'énergie

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. Donc: **il faut que la matrice H soit hermitienne**!

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

Preuve:

$$\frac{d}{dt}\langle H\rangle(t)=\frac{d}{dt}(\psi,\mathrm{H}\psi)=\left(\frac{\partial\psi}{\partial t},H\psi\right)+\left(\psi,H\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)$$

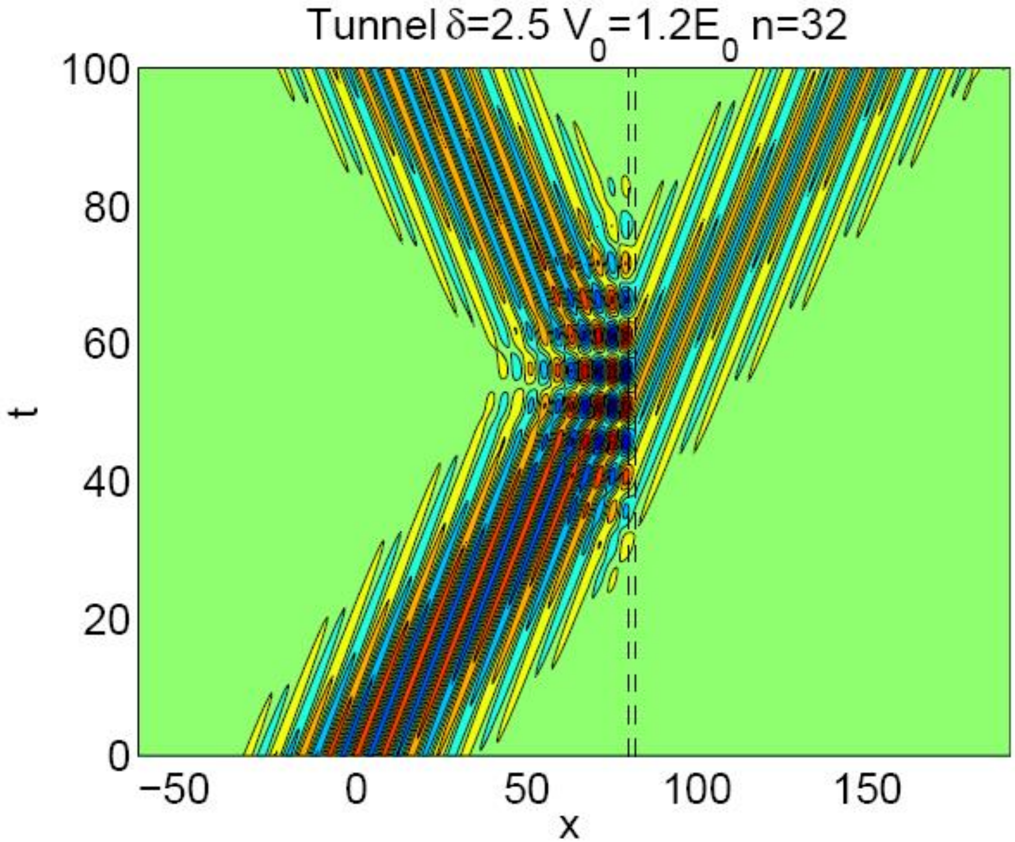
Eq. Schrödinger:

$$=\left(\frac{\partial\psi}{\partial t},i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)+\left(H\psi,\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)$$

$$=\left(\frac{\partial\psi}{\partial t},i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)+\left(i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t},\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)=0$$

4.3.3 Barrière de potentiel: effet tunnel

- Dans cette série de simulations, on initialise toujours le même paquet d'onde et on change la hauteur V0 et l'épaisseur de la barrière
- Cas V_0>E



Re(ψ(x,t))

Probabilité non nulle de traverser la barrière même si V_0>E

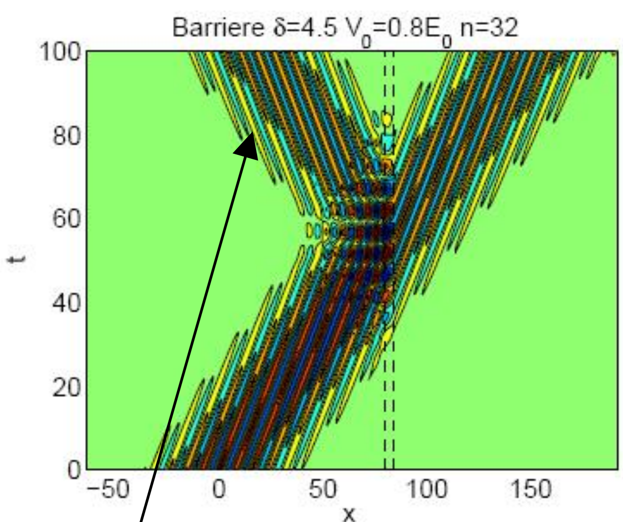
Voir aussi Ex.8

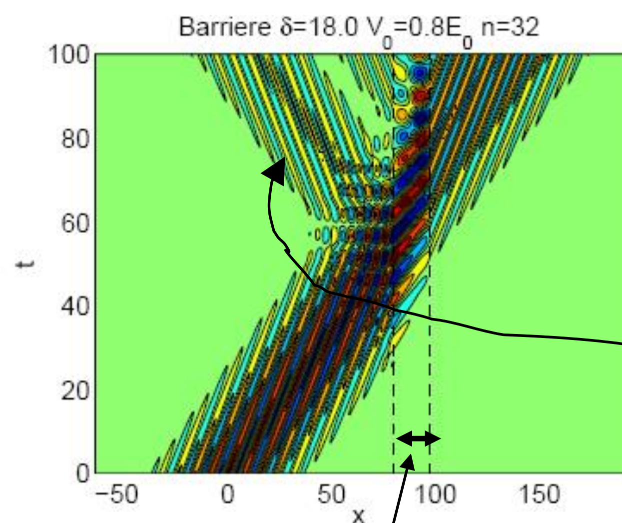
Résonance avec l'épaisseur de la barrière

4.3.3 Barrière de potentiel: résonances

- Cas $V_0<E$

Re(ψ(x,t))





Probabilité non nulle de réflexion !

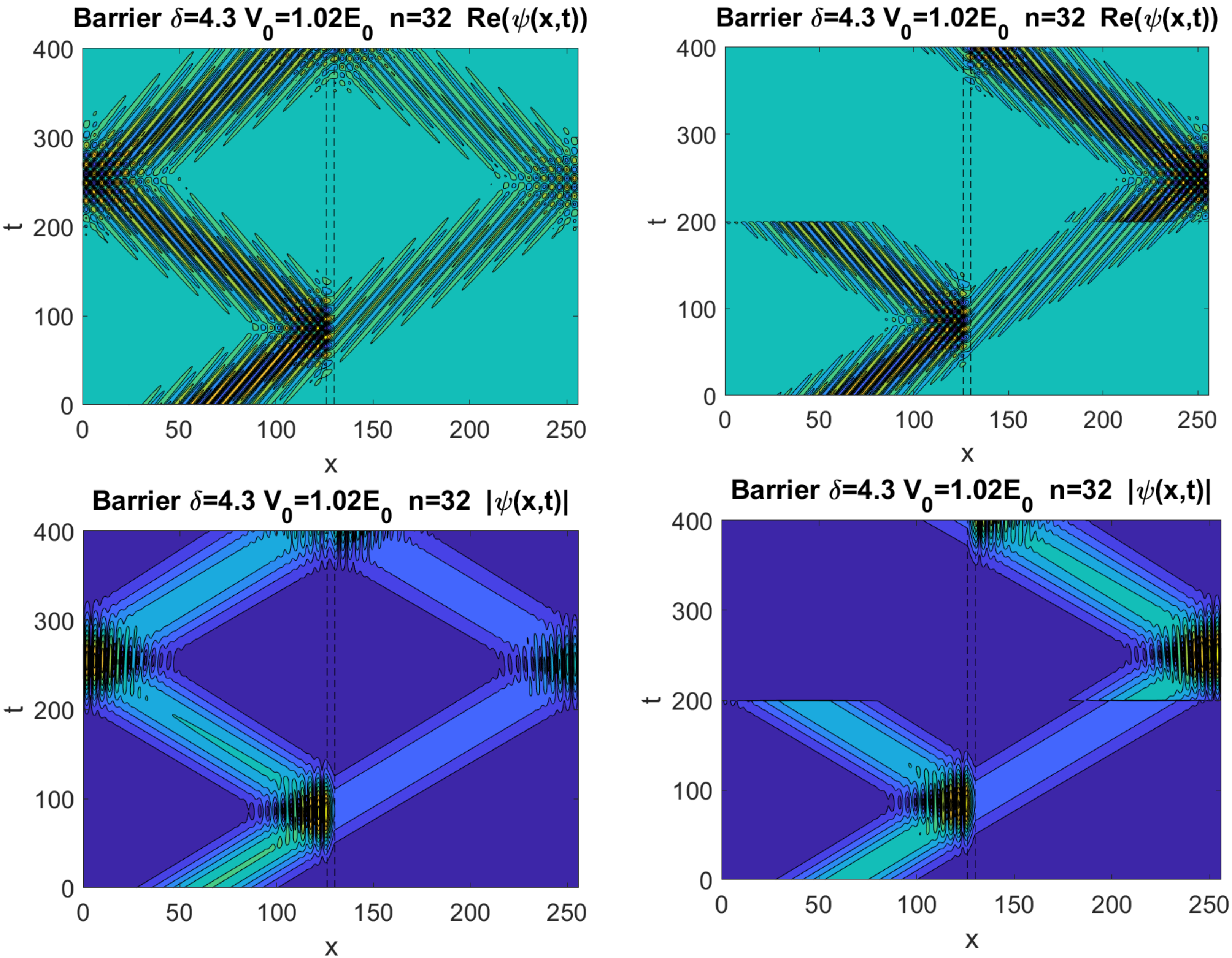
On augmente la largeur de la barrière, et la probabilité de réflexion *diminue*… (NB: elle est nulle pour $\delta = n\ \pi/k_t$)

Détection de particule

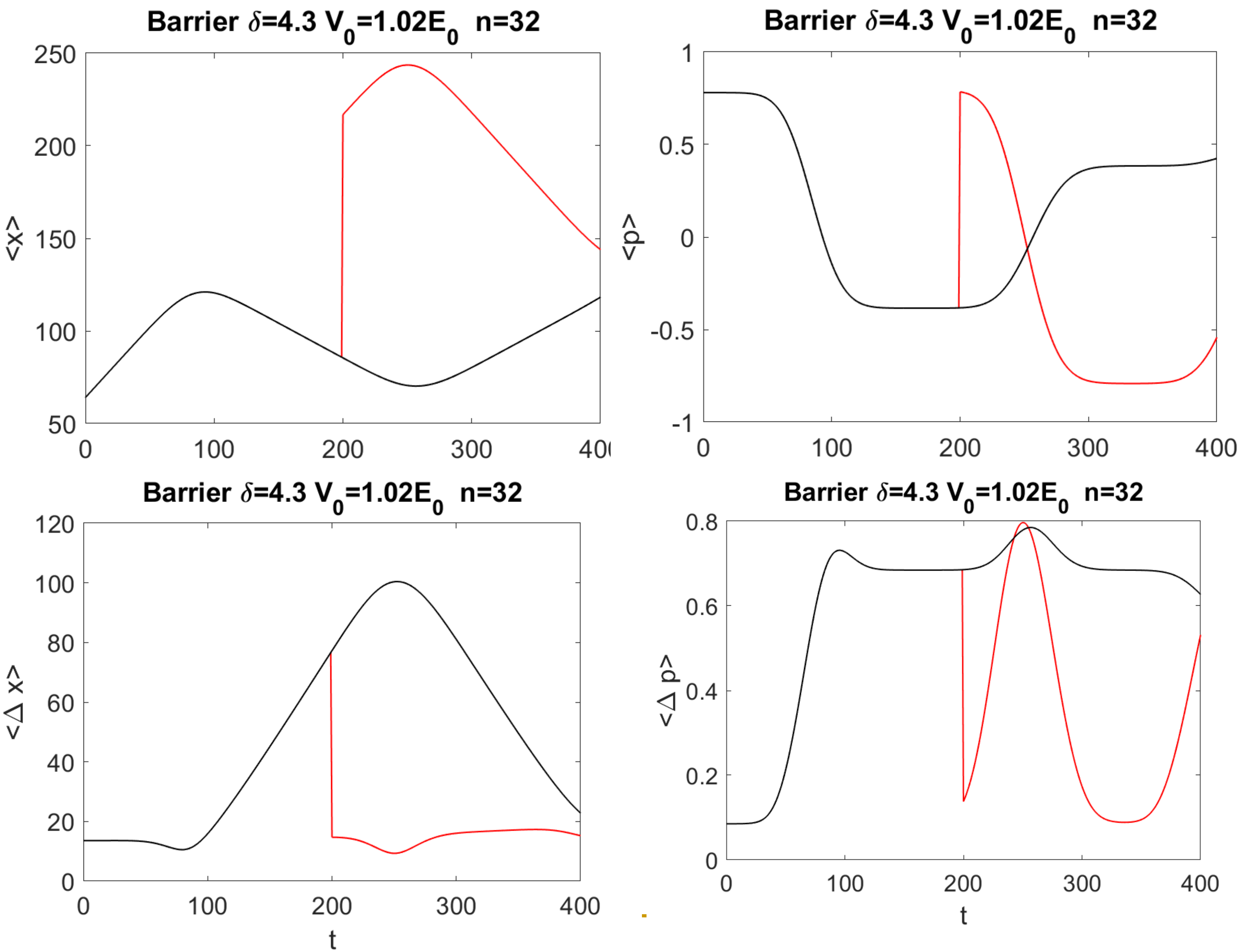
- Que se passe-t-il si le détecteur détecte une particule («tac»)?
- Que devient la fonction d'onde?
- La détection conserve-t-elle l'énergie?
- Que puis-je dire si le détecteur ne détecte pas la particule?
- Est-elle à gauche ou à droite?

- ***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 ?***
- Simulations montrées au cours.
- Complément facultatif Ex.8

Détection ou non …



Détection ou non …



Détection ou non …