

# Physique Numérique sem. 27

- **4.3 Mécanique quantique – Eq. de Schrödinger**
  - 4.3.1 Schéma semi-implicite de Crank-Nicolson
    - Conservation de la probabilité totale (preuve)
  - 4.3.2 Particule libre. Paquet d'onde. Etalelement.
  - 4.3.3 Barrière de potentiel. Effet tunnel.
    - Que se passe-t-il lors de la détection d'une particule?
    - «Réduction» du paquet d'ondes
  - 4.3.4 Oscillateur harmonique
    - Etats cohérents ( $\rightarrow$  semi-classique)
  - 4.3.5 Etats stationnaires
    - Puits de potentiel
    - Potentiel périodique ( $\rightarrow$  physique du solide)
- **Exercice 8: 4 séances, la séance de la semaine prochaine est la dernière, et date rendu le vendredi!**

# Physique Numérique sem. 27

Evaluation approfondie des cours: jusqu'au 11 juin  
5 minutes à la fin du cours

- Aller sur la page d'accueil de Moodle (PAS sur celle du cours)
- Aller à la case «Evaluation approfondie»
- Sélectionner le cours PHYS-210\_SP23 et compléter le feedback

Retour sur l'Exercice 7: ondes, schéma explicite à 3 niveaux:  
Le schéma est **exact** dans le cas  $u^2=\text{const}$ ,  $\beta^2=1$

Pour le cas  $u^2 = \text{const}$ , le schéma explicite à 3 niveaux est exact pour  $\beta = 1$ . En effet, on connaît la solution exacte :

$$f(x, t) = F(x - ut) + G(x + ut) \quad (48)$$

pour toutes fonctions  $F(\xi)$  et  $G(\eta)$ . Pour  $\beta = 1$ , le schéma, Eq.(6), devient :

$$f_{i,n+1} = -f_{i,n-1} + (f_{i+1,n} + f_{i-1,n}) \Leftrightarrow f_{i,n+1} + f_{i,n-1} = f_{i+1,n} + f_{i-1,n} \quad (49)$$

En substituant la solution exacte, on obtient :

$$\begin{aligned} & F(x_i - ut_{n+1}) + G(x_i + ut_{n+1}) + F(x_i - ut_{n-1}) + G(x_i + ut_{n-1}) \\ = & F(x_{i+1} - ut_n) + G(x_{i+1} + ut_n) + F(x_{i-1} - ut_n) + G(x_{i-1} + ut_n) \end{aligned} \quad (50)$$

$$\begin{aligned} & F(x_i - ut_n - u\Delta t) + G(x_i + ut_n + u\Delta t) + F(x_i - ut_n + u\Delta t) + G(x_i + ut_n - u\Delta t) \\ = & F(x_i - ut_n + \Delta x) + G(x_i + ut_n + \Delta x) + F(x_i - ut_n - \Delta x) + G(x_i + ut_n - \Delta x) \end{aligned} \quad (51)$$

Avec  $\beta = 1$ , on a  $u\Delta t = \Delta x$ , et l'équation ci-dessus est bien identiquement satisfaite,  $\forall F, \forall G$ .

Une conséquence étonnante pour le cas du mode propre, section 7.2(d), est que selon le mode propre considéré, l'erreur obtenue peut être très différente selon le nombre d'intervalles en  $x$ ,  $N_{\text{inter}}$ . En effet, on a :

$$\Delta t = \frac{t_{\text{fin}}}{N_{\text{steps}}} = \frac{2\pi}{\omega_n N_{\text{steps}}} \quad (52)$$

$$\omega_n = \frac{n\pi u}{L} \Rightarrow \Delta t = \frac{2L}{nu N_{\text{steps}}} \quad (53)$$

D'autre part,

$$\Delta x = \frac{L}{N_{\text{inter}}} \quad (54)$$

Avec la définition de  $\beta$  :

$$\beta = \frac{u\Delta t}{\Delta x} = \frac{2N_{\text{inter}}}{nN_{\text{steps}}} \quad (55)$$

Ainsi, si on veut  $\beta = 1$ , on doit prendre

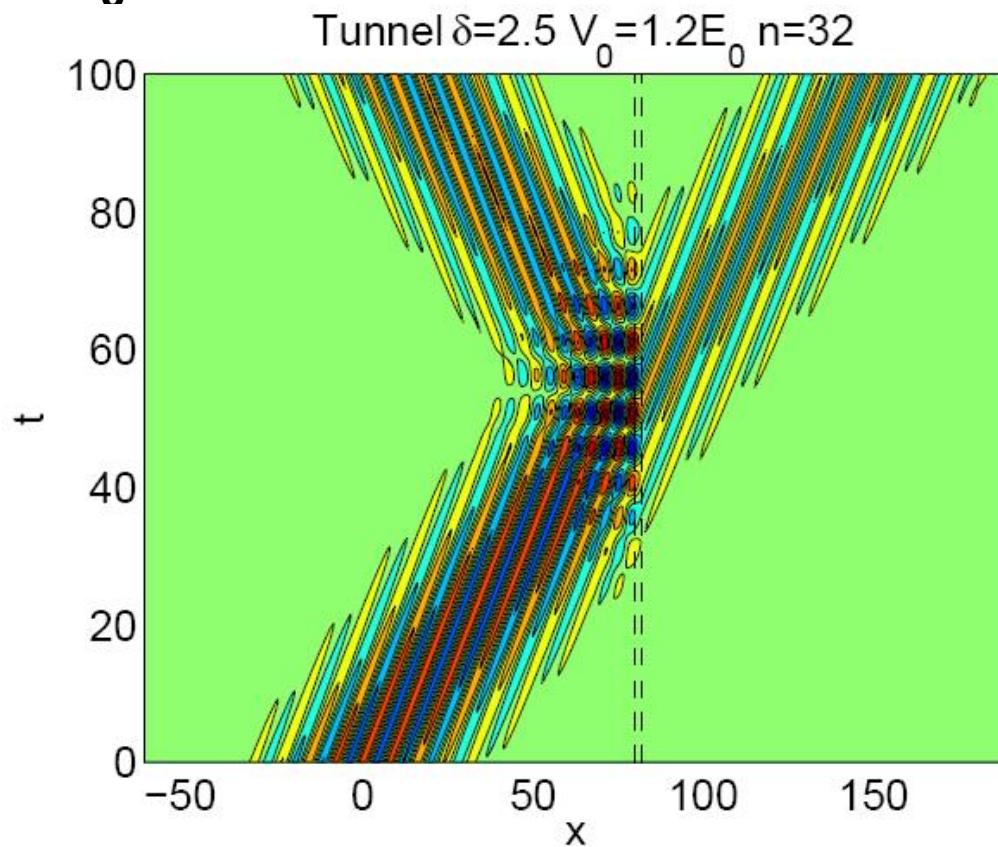
$$N_{\text{steps}} = \frac{2N_{\text{int}}}{n} \quad (56)$$

Mais  $N_{\text{steps}}$  doit être entier !

Par exemple, pour le mode  $n = 4$ ,  $N_{\text{steps}} = N_{\text{inter}}/2$ , et donc  $N_{\text{inter}}$  doit être pair. Auquel cas on peut choisir  $\beta = 1$  et le schéma est exact (i.e. seules des erreurs d'arrondi subsistent). Si on choisit  $N_{\text{inter}}$  impair,  $\beta \neq 1$  et le schéma n'est pas exact, les erreurs de troncature subsistent, et elles sont généralement bien plus grandes que les erreurs d'arrondi !

## Effet tunnel

- 4.3.3 Barrière de potentiel: effet tunnel
  - Cas  $V_0 > E$



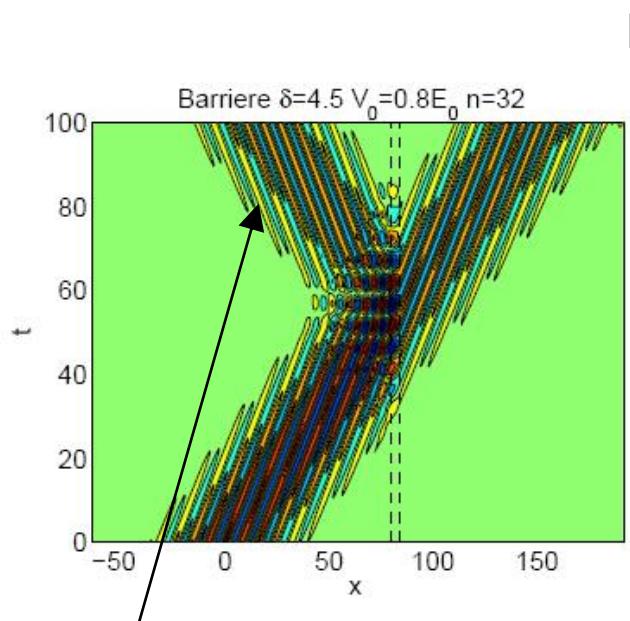
Probabilité non nulle de traverser la barrière même si  $V_0 > E$

Voir aussi Ex.8

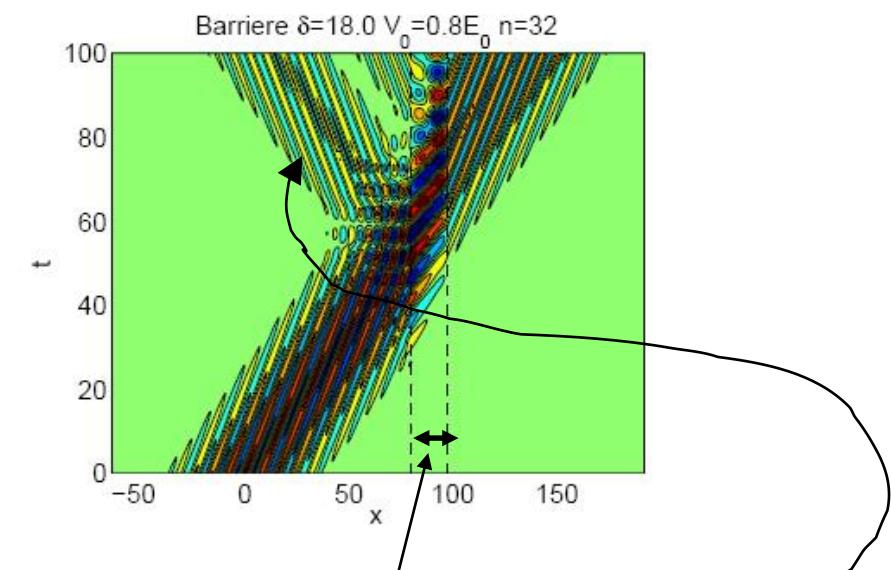
## Résonance avec l'épaisseur de la barrière

### ■ 4.3.3 Barrière de potentiel: résonances

- Cas  $V_0 < E$



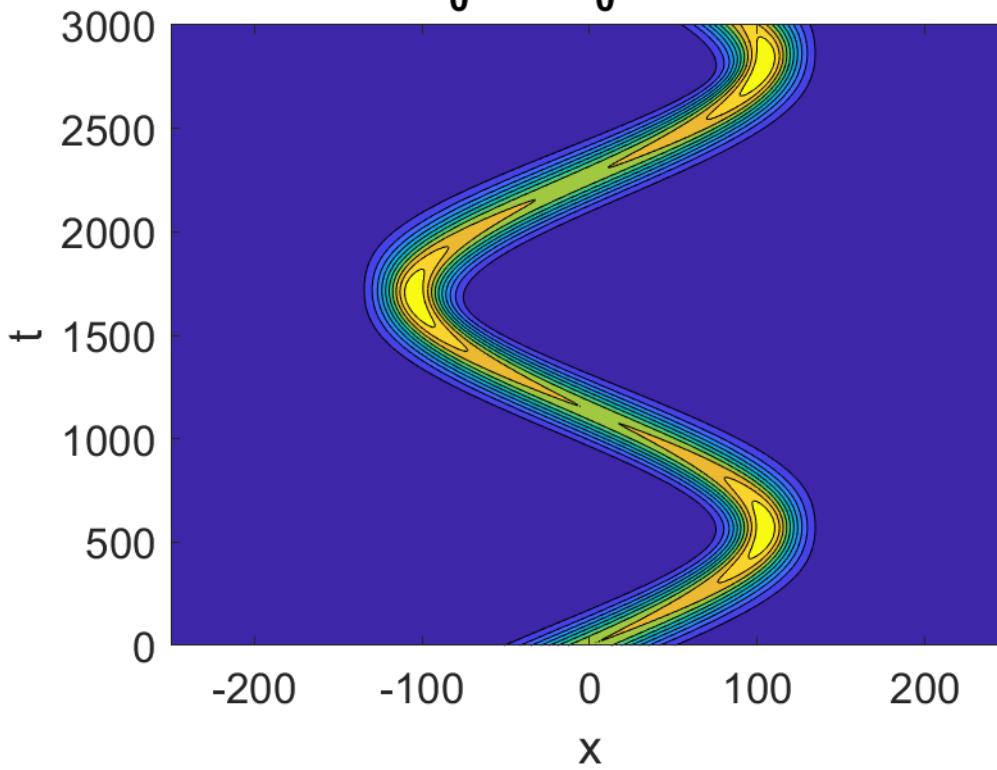
Probabilité non nulle de réflexion !



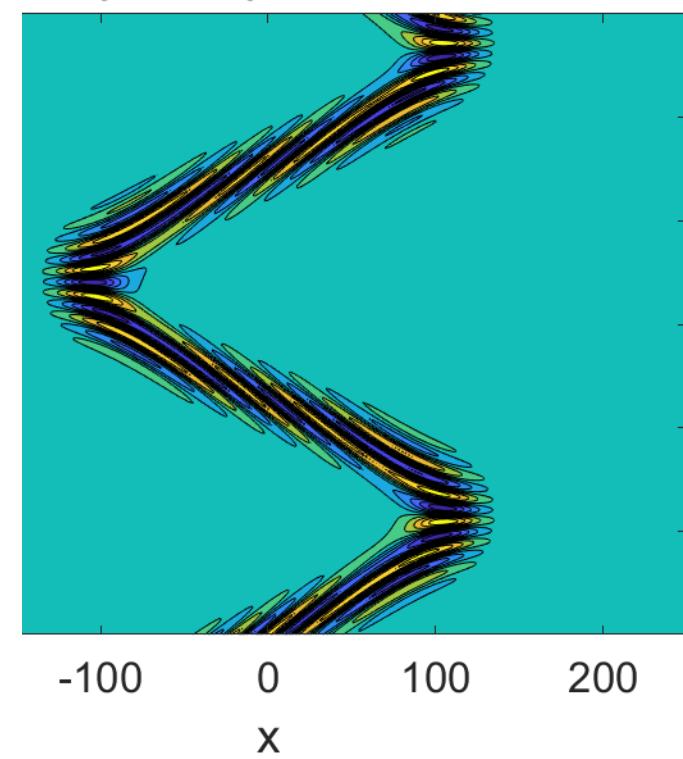
On augmente la largeur de la barrière, et la probabilité de réflexion *diminue*...  
(NB: elle est nulle pour  $\delta = n \pi/k_t$ )

## ■ 4.3.4 Oscillateur harmonique $V(x) = (1/2)m\omega_0^2x^2$

Harmo  $V_0=5.5E_0$   $n=24$   $|\psi(x,t)|$



o  $V_0=5.5E_0$   $n=24$   $\text{Re}(\psi(x,t))$



## Limite classique

### ■ Oscillateur harmonique: $\langle x \rangle$ et $\Delta x$

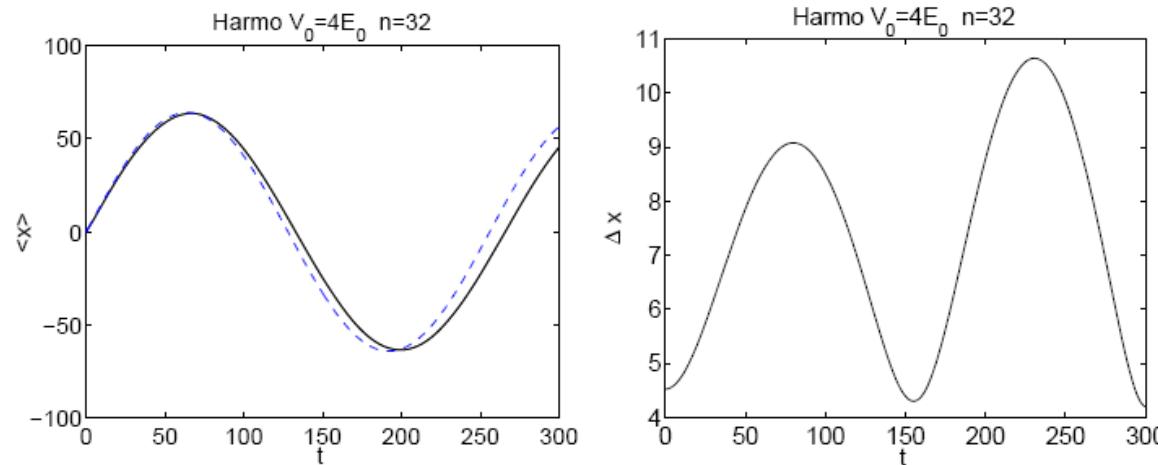


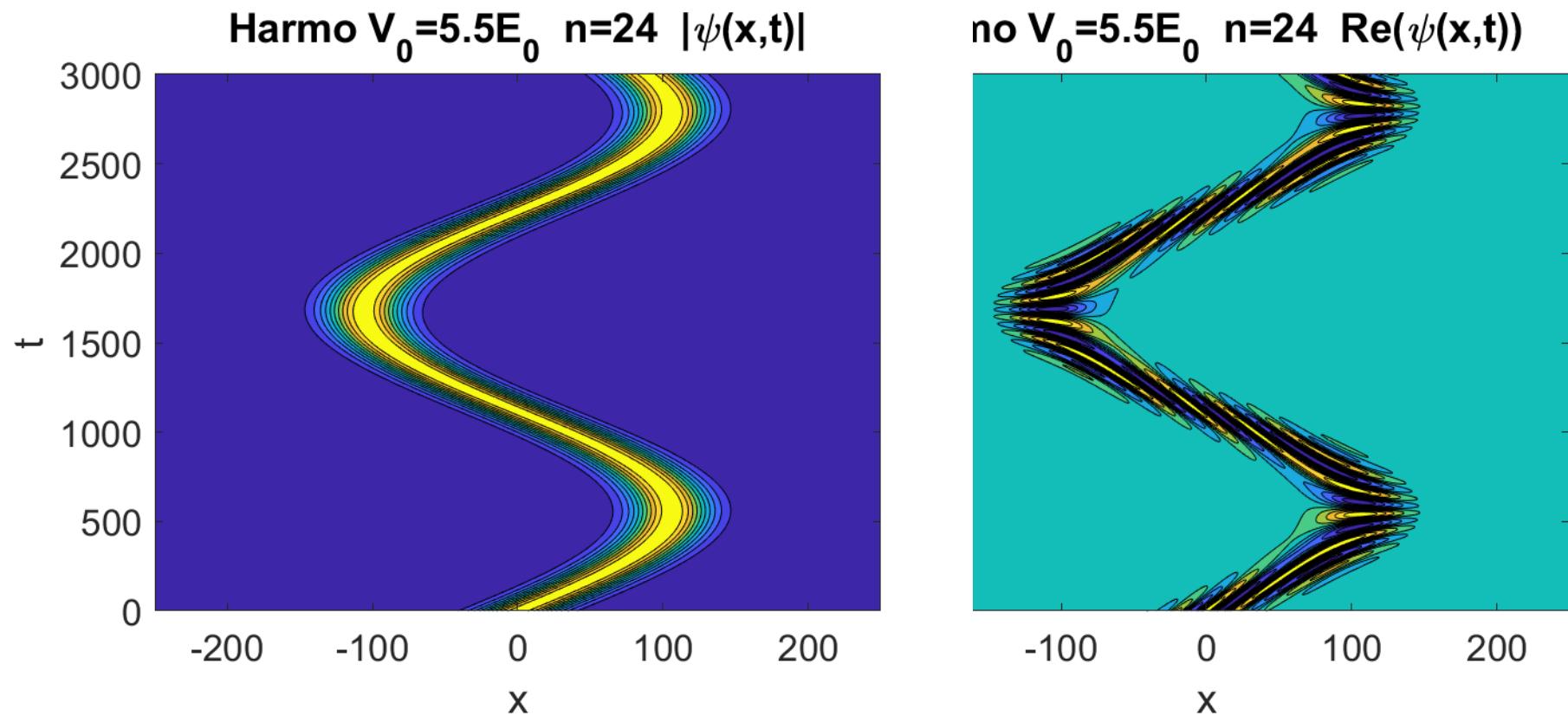
FIG. 4.22 – Particule dans un potentiel harmonique (même simulation que la FIG. 4.21).  
 A gauche : position moyenne  $\langle x \rangle(t)$ , avec en traitillés la solution de la physique classique. A droite, incertitude sur la position  $\langle \Delta x \rangle(t)$ .

### ■ Particule classique d'énergie

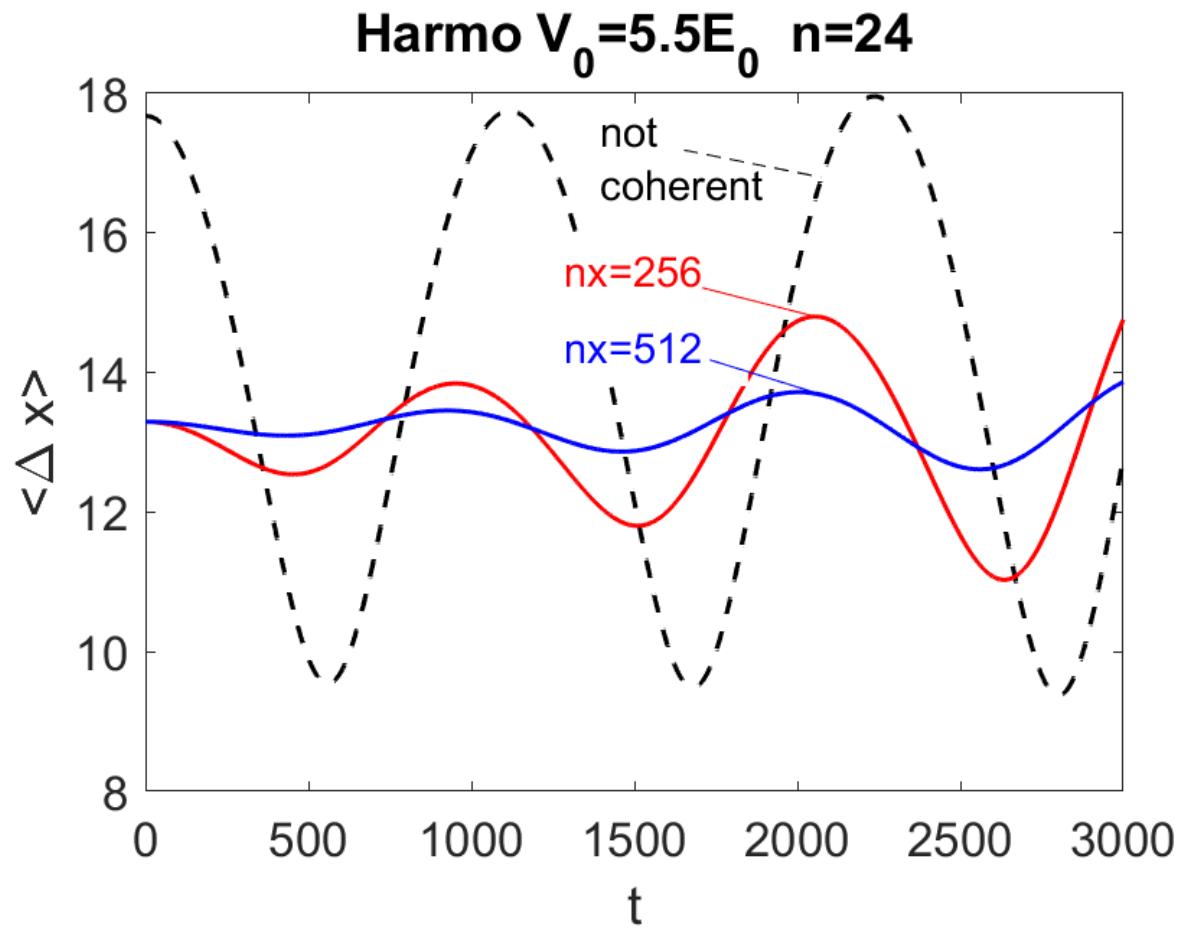
$$E = \langle H \rangle = \langle p^2/2m + V(x) \rangle$$

- Etats dits «quasi-classiques», tels que leur incertitude  $\Delta x$  est constante au cours du temps. Il s'agit de paquets d'ondes gaussiens avec  $\Delta x = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}$

# Etats cohérents ou semi - classiques



# Etats cohérents ou semi - classiques



- 4.3.5 Etats d'énergie bien déterminée:

$$\psi(\vec{x}, t) = \Psi(\vec{x}) \exp(-i\omega t) \quad \omega = E / \hbar$$

- Eq. de Schrödinger stationnaire

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi = E \psi \quad H(\psi) = E \psi$$

Les énergies possibles de la particule sont les valeurs propres de l'Hamiltonien.  
Les fonctions propres correspondantes sont appelées états propres.

- Discrétisation  $x_j, j = 1..N \quad \Psi_j = \Psi(x_j)$

$$\sum_j H_{ij} \Psi_j = E \Psi_i$$

Les énergies possibles de la particule sont approximées par les valeurs propres de la matrice  $H$  résultant de la discrétisation de l'Hamiltonien.  
Les états propres sont approximés par les vecteurs propres de  $H$ .  $\rightarrow \{\Psi_{(n)}, E_n\}$

- A quoi servent les modes et fonctions propres? – A résoudre Schroedinger! 
$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{x}) \exp(-iE_n t / \hbar)$$
- D'où une autre méthode, dite *spectrale*, de résolution de Schroedinger:
  - Matrice  $H \rightarrow$  calcul des valeurs et vecteurs propres  $\{\Psi_{(n)}, E_n\}$
  - Calcul des  $c_n = \int \Psi_n^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}, 0) dx$
  - La solution numérique est:
$$\psi(x_i, t_j) = \sum_n c_n \Psi_n(x_i) \exp(-iE_n t / \hbar)$$
- Voir aussi <http://falstad.com/qm1d/>

## ■ Particule dans un puits de potentiel de profondeur finie

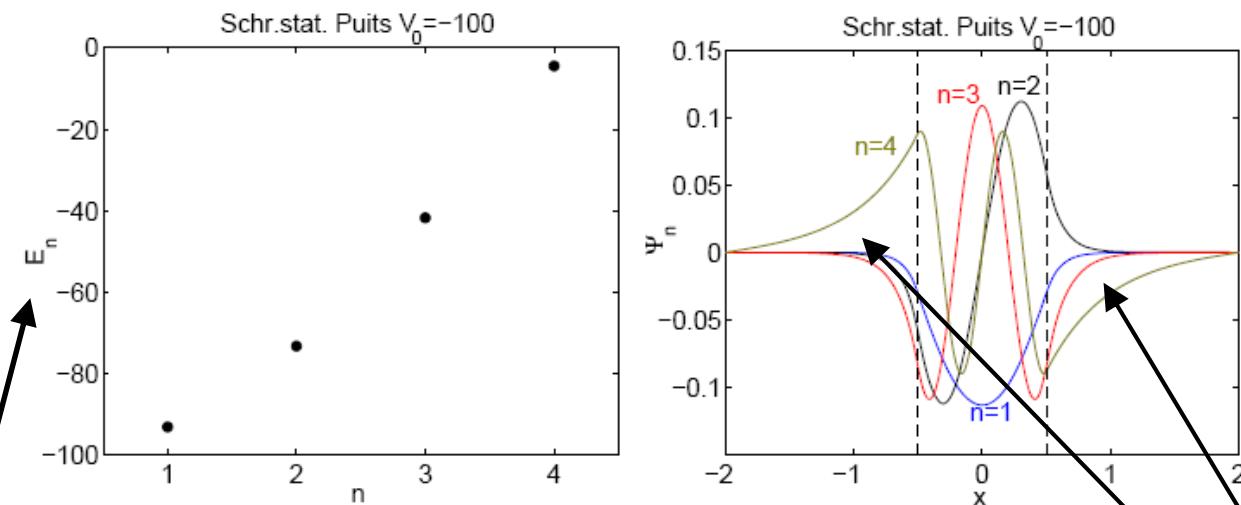


FIG. 4.25 – Spectre des énergies propres (à gauche) et les 4 premiers états propres (à droite) pour une particule confinée dans un puits de potentiel de profondeur finie,  $V_0 = -100$ , entre  $x = -0.5$  et  $x = +0.5$  (lignes traitillées).

Seul un nombre fini de valeurs négatives de l'énergie est possible

La particule a une probabilité de présence non nulle en dehors du puits