Physique Numérique – Semaine 11

Rappel de la semaine 10

- **4.2 Ondes**
  - Analyse de stabilité de Von Neuman: critère CFL
  - Modes propres, fréquences propres. Excitation résonante.
  - Tsunamis. Quelle équation?

Plan de la semaine 11

- **Ondes – 2D**
- **4.3 Schrödinger**
  - Schéma semi-implicite de Crank-Nicolson
  - Observables
  - Principe d'incertitude de Heisenberg
  - Propriétés de conservation de la probabilité et de l'énergie
  - Particule libre, étalement du paquet d'onde
  - Particule dans un potentiel V(x), effet tunnel, etc…
- **Exercice 6**

Documentation

- Lecture pour la Semaine #11: Notes de cours
  - **Section 4.3. Schrödinger.**

http://moodle.epfl.ch/mod/resource/view.php?id=8220

Profondeur variable $h_0(x)$

$$u(x) = \sqrt{g h_0(x)}$$

Vitesse de propagation variable u(x)

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta h - u^2(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\delta h) = 0 \quad \text{(A)}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta h - \frac{\partial}{\partial x}\left(u^2(x)\frac{\partial}{\partial x}\delta h\right) = 0 \quad \text{(B)}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta h - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(u^2(x)\,\delta h\right) = 0 \quad \text{(C)}$$

Laquelle de ces équations est correcte?

Cela fait-il une différence sur la propagation du tsunami?

- Cette usine électrique flottante (3000 tonnes) s'est retrouvée à 6 km à l'intérieur des terres – Banda Aceh, Indonésie

Ondes en milieu inhomogène 2D: $u^2(x,y)$

(Ex.5, facultatif)

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = \nabla \cdot (u^2 \nabla f)$$

$$\frac{\partial g}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{g(x_{i+1}, y_j) - g(x_{i-1}, y_j)}{2h_x},$$

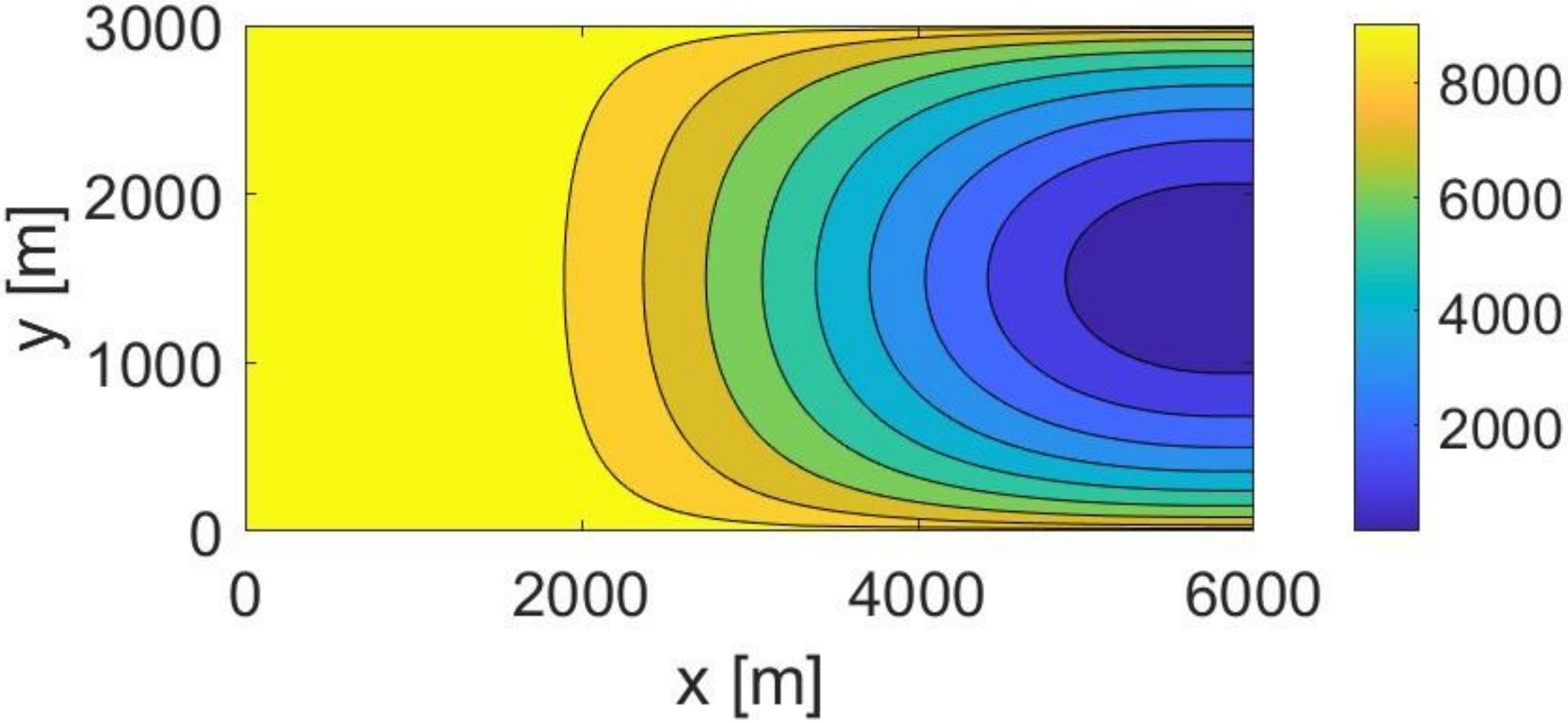
Pour $g=u^2$ ou $g=f$

$$\frac{\partial g}{\partial y}(x_i, y_j) \approx \frac{g(x_i, y_{j+1}) - g(x_i, y_{j-1})}{2h_y},$$

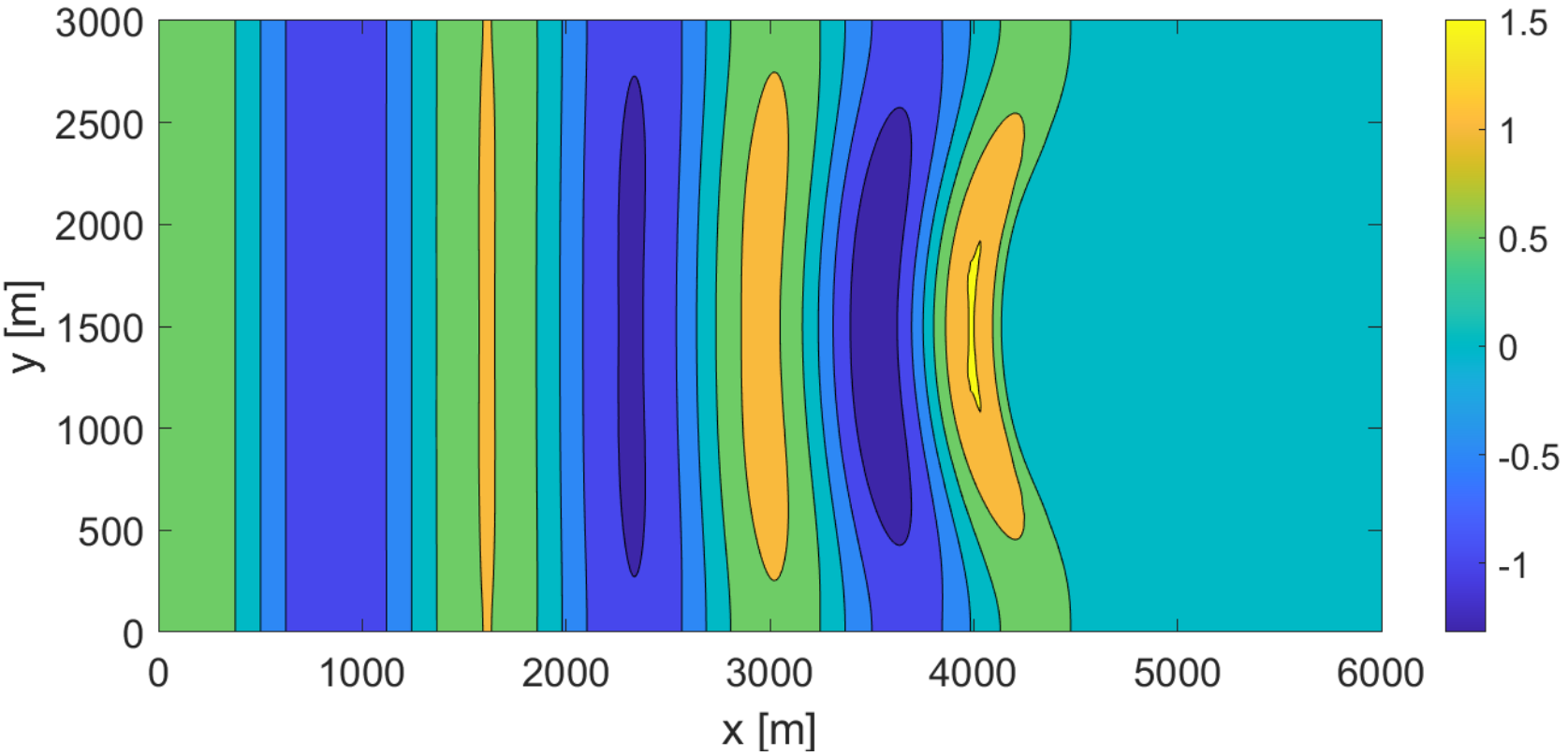
$$\frac{\partial^2 g}{\partial x^2}(x_i, y_j) \approx \frac{g(x_{i+1}, y_j) - 2g(x_i, y_j) + g(x_{i-1}, y_j)}{h_x^2} \quad (2)$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial y^2}(x_i, y_j) \approx \frac{g(x_i, y_{j+1}) - 2g(x_i, y_j) + g(x_i, y_{j-1})}{h_y^2} \quad (3)$$

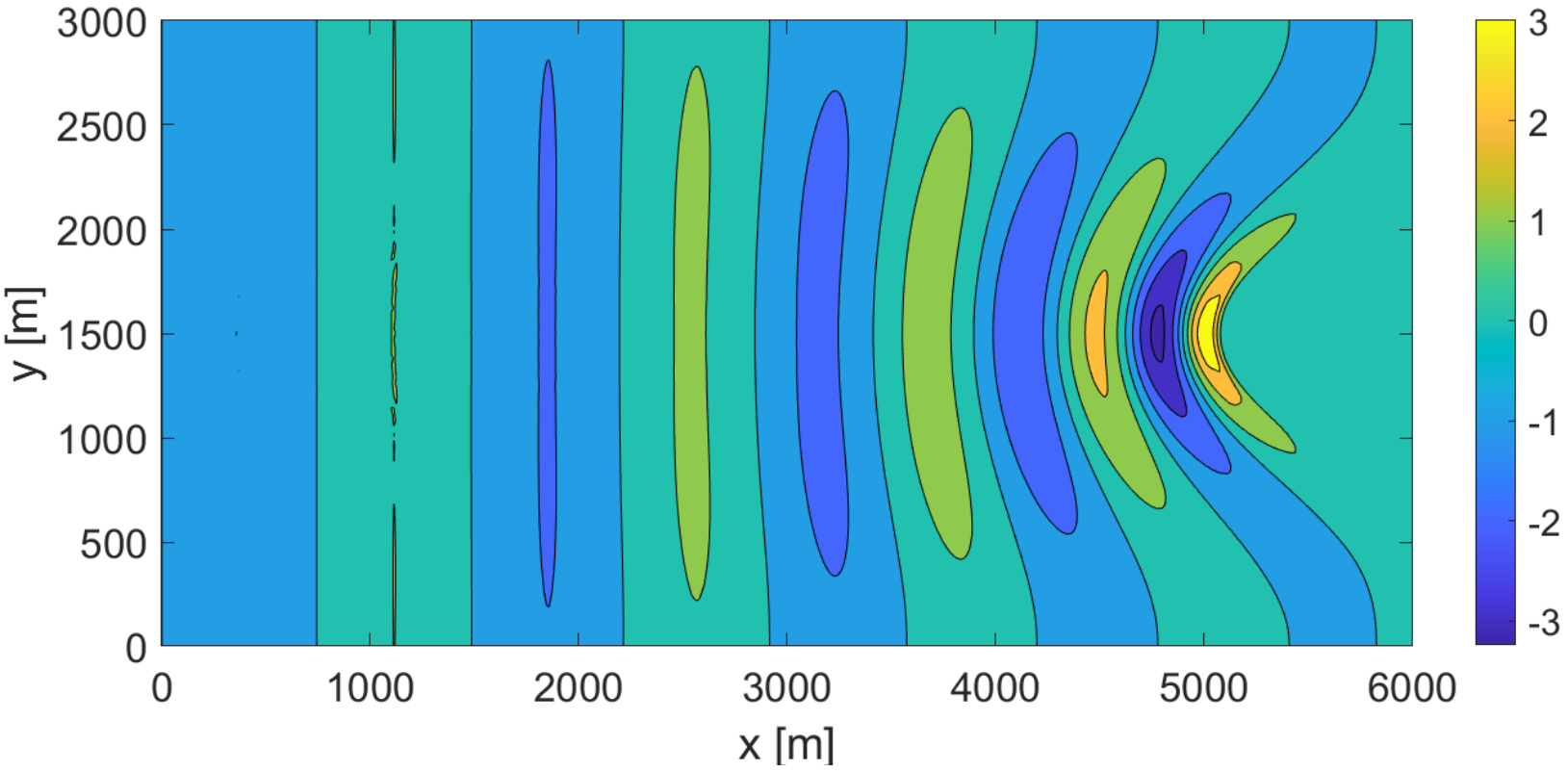
Profondeur 2D $h_0(x,y)$. Focalisation.



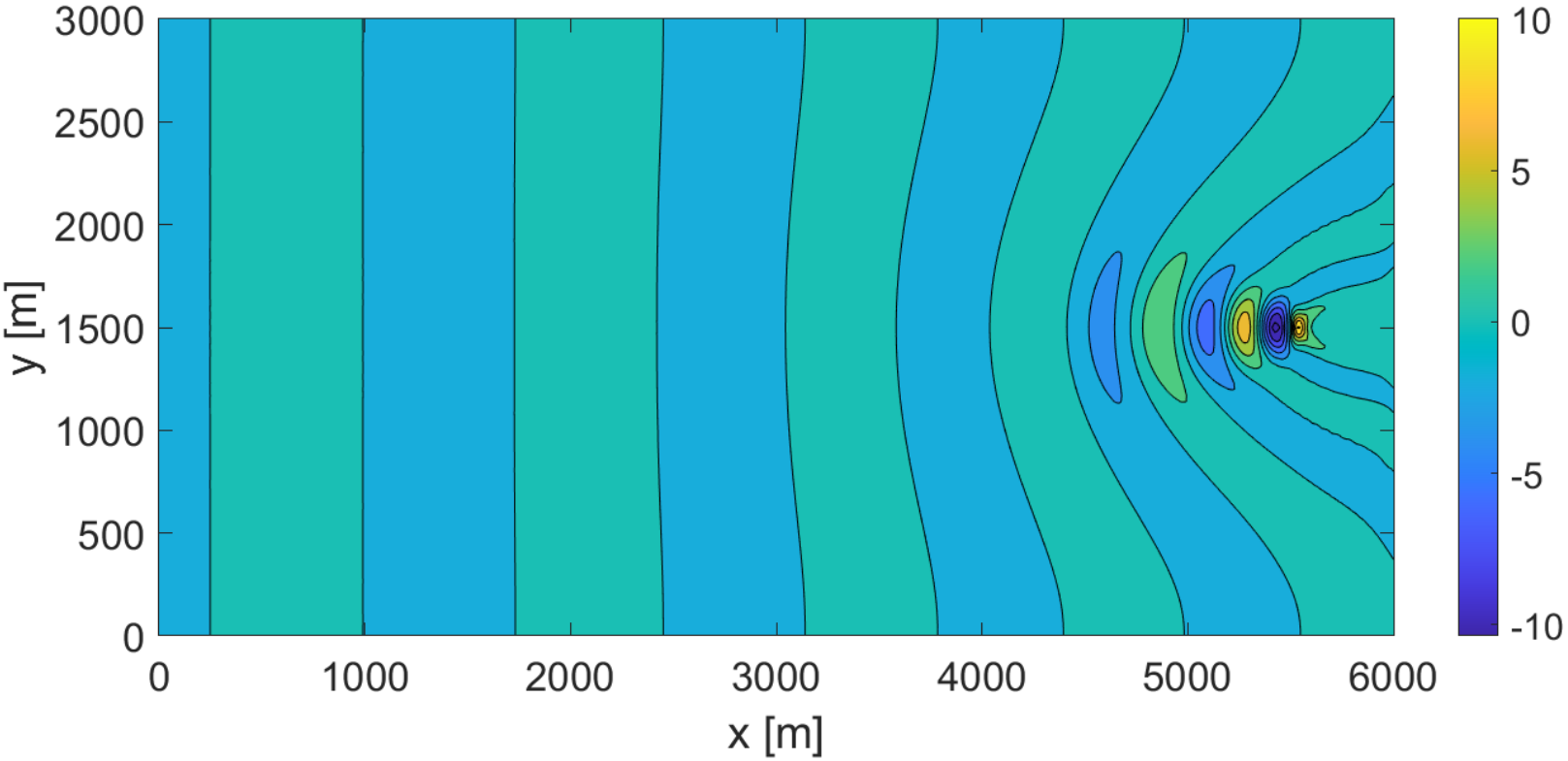
Profondeur 2D $h_0(x,y)$. Focalisation.



Profondeur 2D $h_0(x,y)$. Focalisation.

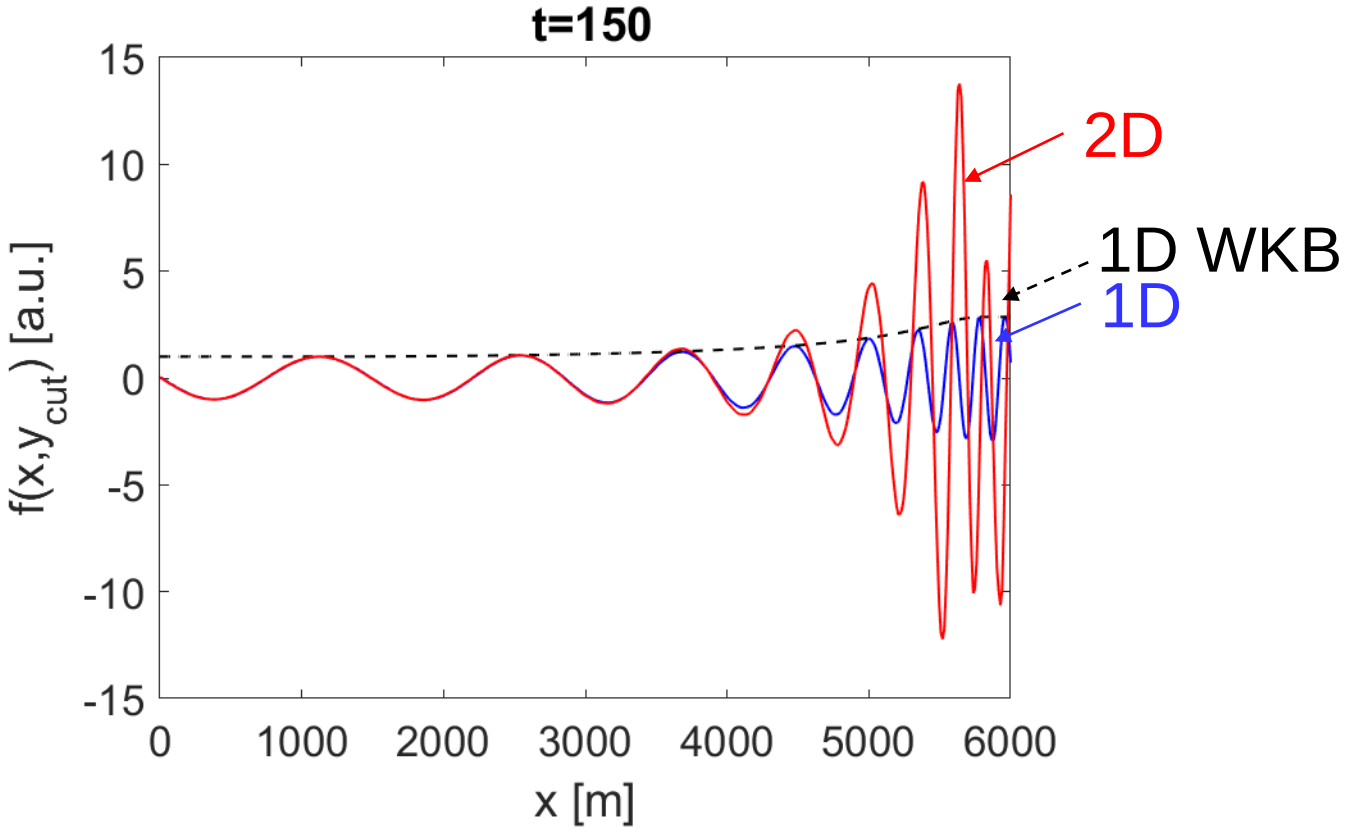


Profondeur 2D $h_0(x,y)$. Focalisation.



Nous avons en fait une lentille gravitationnelle convergente…

Profondeur 2D $h_0(x,y)$. Focalisation.



…et le haut-fond ne nous protège pas, bien au contraire!

4.3 Mécanique Quantique - Schrödinger

- **4.3 Schrödinger**
  - **Corpusculaire, ondulatoire, probabiliste** $|\psi(\vec{x},t)|^2$

Particule libre:

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

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

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

Particule dans un potentiel V(x):

$$\vec{p} \leftrightarrow -i\hbar\nabla$$
$$E \leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{x}) \rightarrow i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi$$

$H(\psi)$

- **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 1er ordre de exp

$$\left(1+\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}H\right)\psi(x,t+\Delta t)=\left(1-\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}H\right)\psi(x,t) \qquad (4.90)$$

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:**

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

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

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

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

Explicite. $B\,\Psi$. Multiplication matrice vecteur

- Le schéma de Crank-Nicolson a les bonnes propriétés suivantes:
  - Il conserve la probabilité totale

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

  - … et l'énergie

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

  … à la précision machine!
  - ***Preuve: au tableau***

- 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 $[x_L,x_R]$:

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

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

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

Le système «…» est en fait équivalent à celui résultant de la discrétisation 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

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

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

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

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

- Propriétés

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

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

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

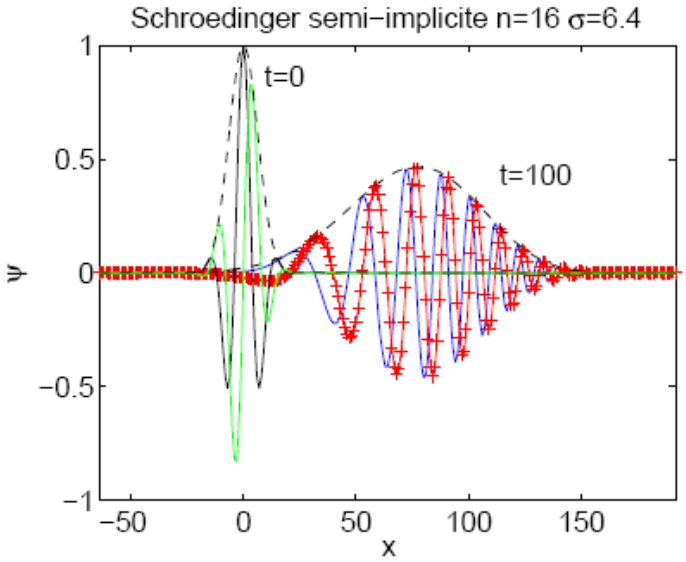
- Paquet d'onde Gaussien: on initialise l'état de la particule par une onde plane dont l'amplitude est modulée par une fonction Gaussienne

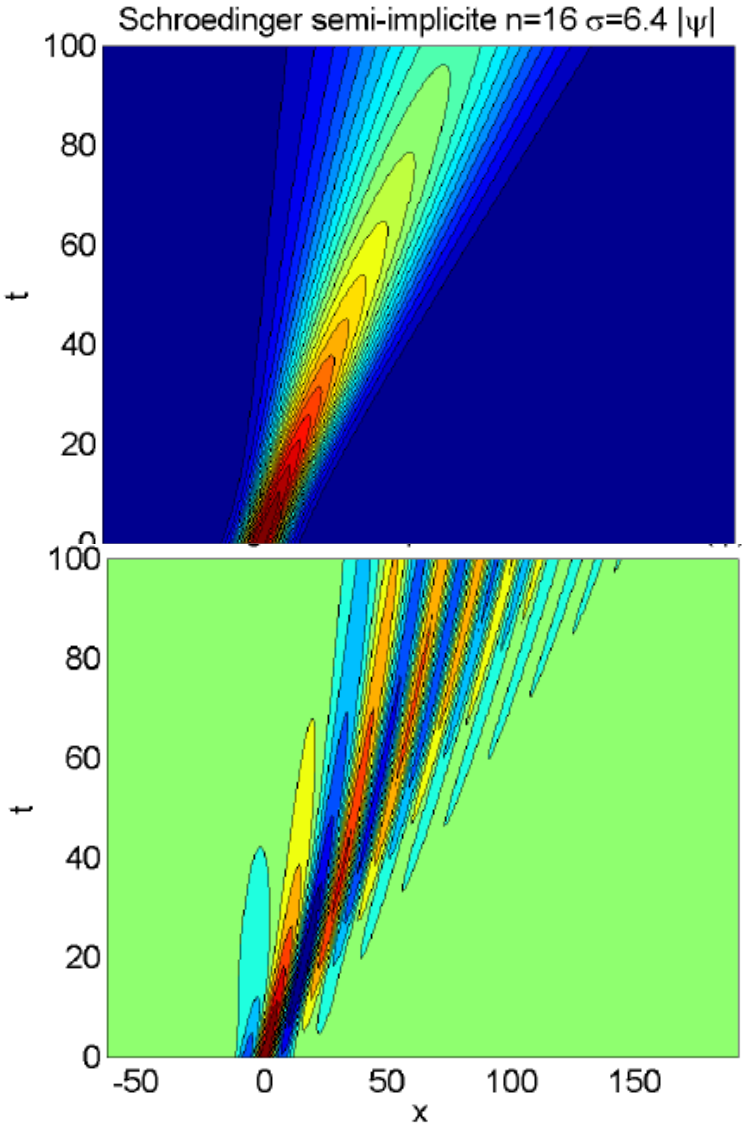
$$\psi(x,0) = Ce^{ik_0 x} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}$$

- 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 2e 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*** $\psi(x,-\Delta t)$

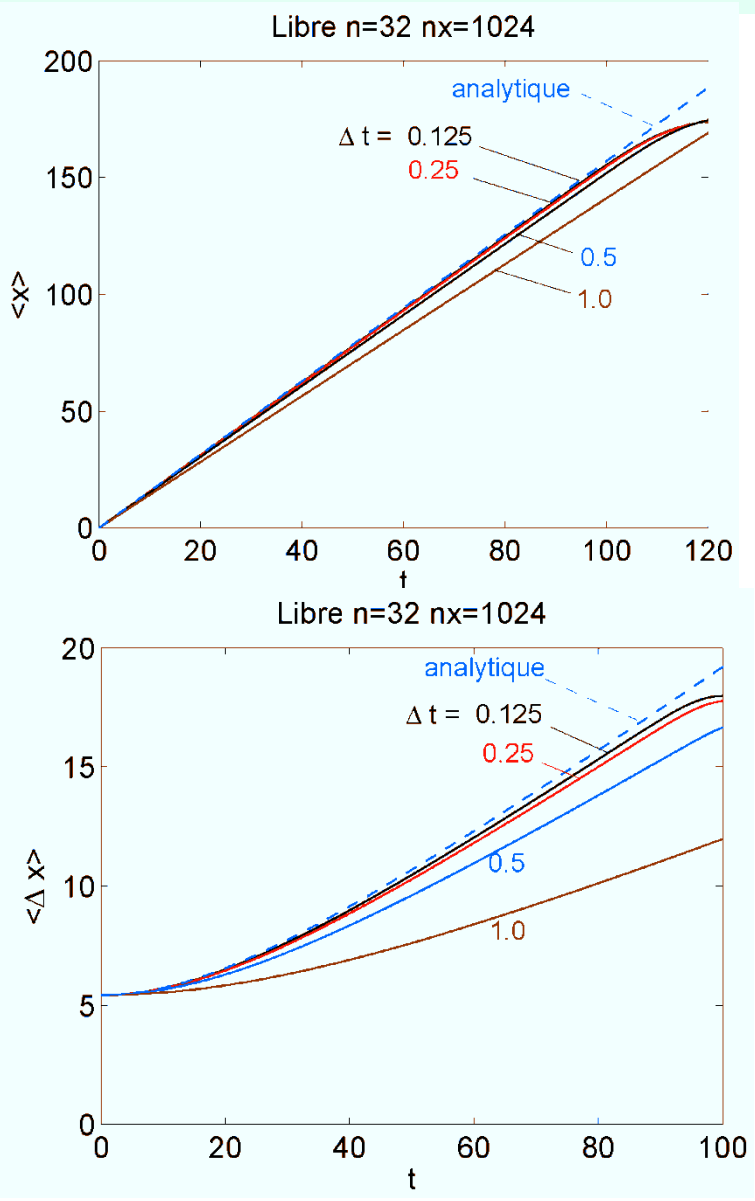
- **Propagation**

$$< x > (t) = \int \psi^{*}(x,t)\, x \psi(x,t)\, dx$$

$$< x > (t) = < x > (0) + \frac{\hbar k_0}{m} t$$

- **Etalement**

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



- **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://brilliant.org/wiki/heisenberg-uncertainty-principle/

- Principe d'incertitude de Heisenberg et transformées de Fourier

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

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): $(\Delta x)(\Delta k) \geq 1/2$

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

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

Conservation de la probabilité: semi-implicite

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

Preuve:

$$\boxed{\left(1+\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}H\right)\psi(x,t+\Delta t)=\left(1-\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}H\right)\psi(x,t)} \qquad (4.90)$$

Opérateur *A*. Opérateur *B*.

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

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

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

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

Conservation de la probabilité: semi-implicite et implicite

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

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

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

Schéma explicite

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: $T_{-\Delta t} \neq \left(T_{\Delta t}\right)^{-1}$ 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. Une fois de plus: **il faut que la matrice H soit hermitienne**!

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

Preuve:

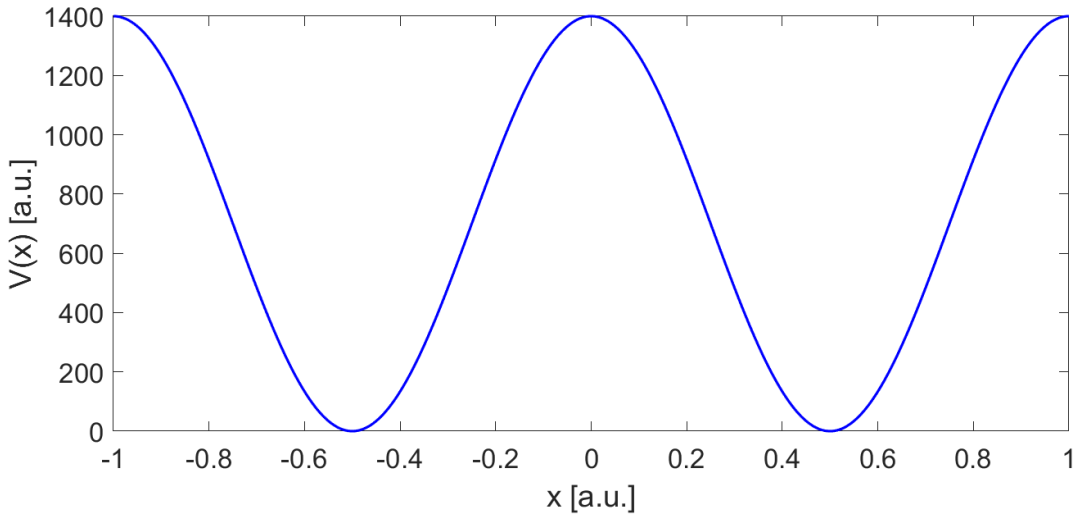
$$\frac{d}{dt}\langle H \rangle(t) = \frac{d}{dt}(\psi, \mathrm{H}\psi) = \left(\frac{\partial \psi}{\partial \mathrm{t}}, H\psi\right) + \left(\psi, H\frac{\partial \psi}{\partial \mathrm{t}}\right)$$

Eq. Schrödinger:

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

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

Exercice 6



- 2 sessions: 15, 22 mai
- Délai de rendu

  ~~mardi 26 mai~~ → mercredi 27 mai 2024
- 3e session, 27 mai : “rattrappage”

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 ?***
- Complément facultatif Ex.6