

Physique Numérique – Semaine 12

Rappel de la semaine 11

- ☐ Ondes – 2D
- ☐ 4.3 Schrödinger.
 - ☐ Schéma semi-implicite de Crank-Nicolson
 - ☐ Particule libre, étalement du paquet d'onde

Plan de la semaine 12

- ☐ Ondes – Exercice 5 – bref retour
- ☐ 4.3 Schrödinger
 - ☐ Initialiser une onde pour qu'elle se propage dans les 2 directions
 - ☐ Principe d'incertitude de Heisenberg et transformée de Fourier
 - ☐ Propriétés de conservation de la probabilité et de l'énergie
 - ☐ Particule dans un potentiel $V(x)$, effet tunnel, etc...
 - ☐ Détecteur de particule
- ☐ Exercice 6: à rendre MERCREDI prochain.

Physique Numérique – Semaine 12

Evaluation approfondie des cours: jusqu'au 9 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_SP24 et compléter le feedback

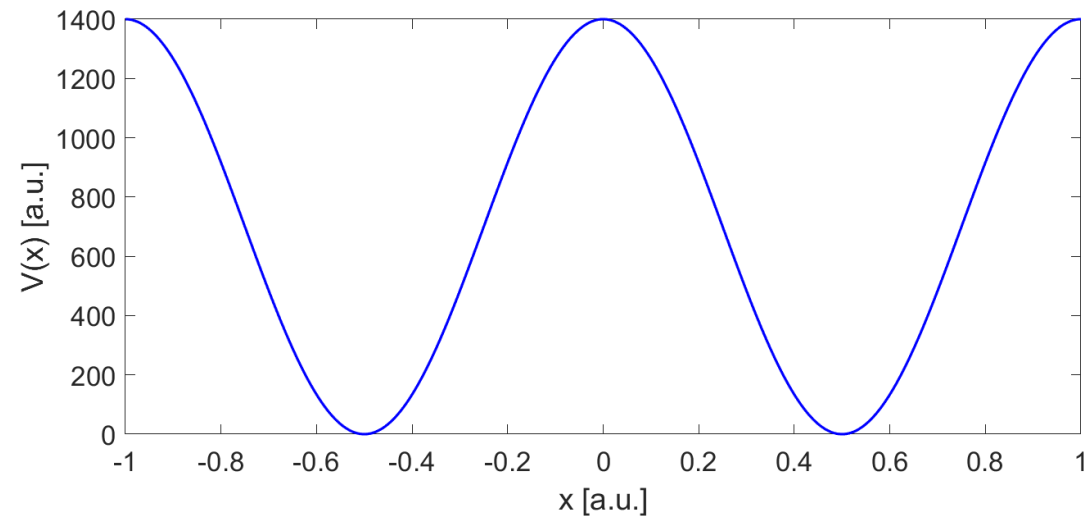
Retour sur l'Exercice 5: ondes, schéma explicite à 3 niveaux:
Le schéma est **exact** dans le cas $u^2 = \text{const}$, $\beta^2 = 1$

Documentation

- Lecture pour la Semaine #12: Notes de cours
 - **Section 4.3. Schrödinger.**

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

Exercice 6



- 2 sessions: 15, 22 mai
- Délai de rendu
~~mardi 26 mai~~ → mercredi 27 mai 2024
- 3e session, 27 mai : “rattrapage”

Ondes - Exercice 5

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 :

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

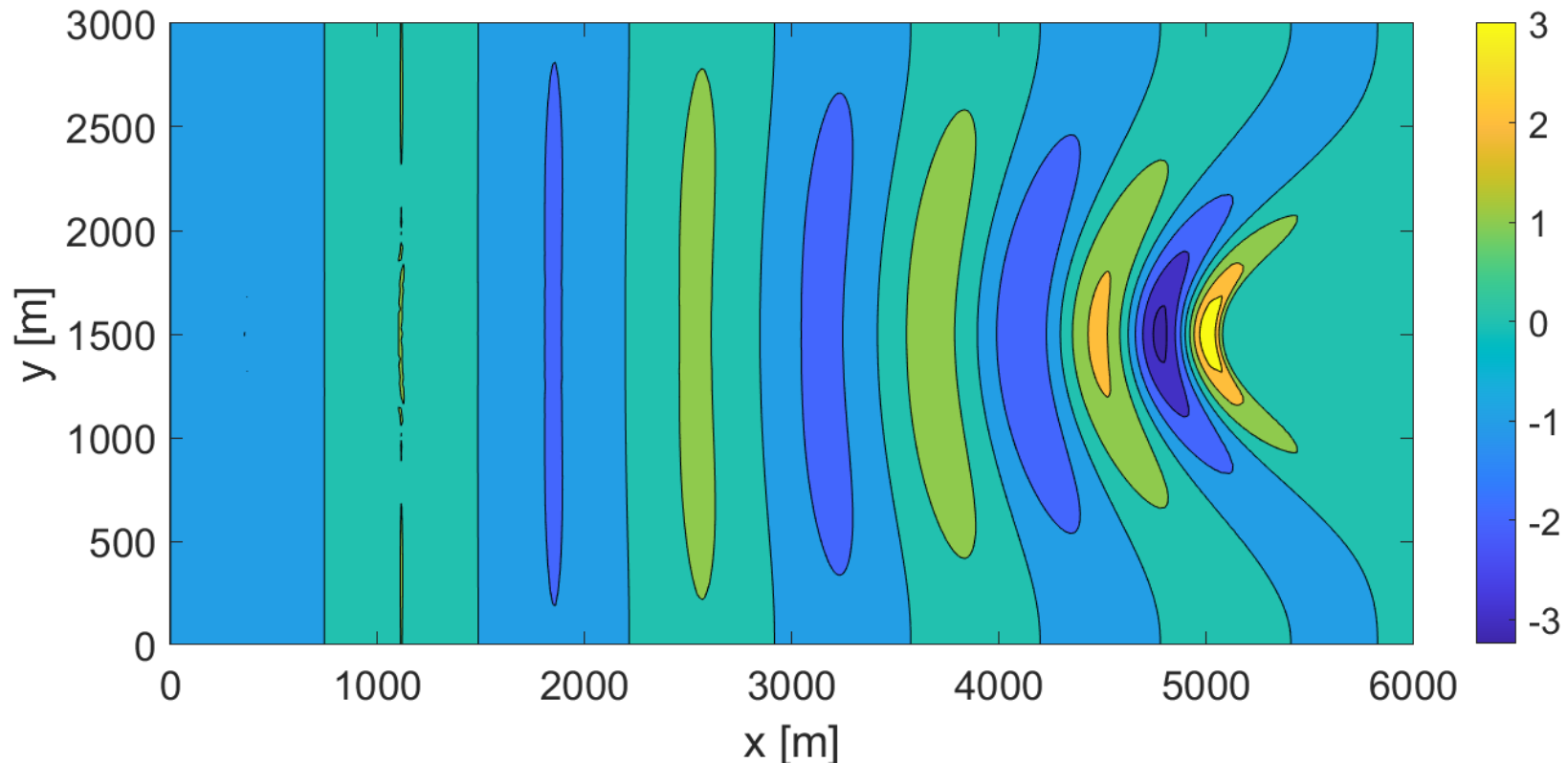
En substituant la solution exacte, on obtient :

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

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

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

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



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
 $V(x)$:

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

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

$H(\psi)$

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

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

■ 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

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

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**:

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

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

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

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

➤ ... 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**

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

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

(4.99)

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.

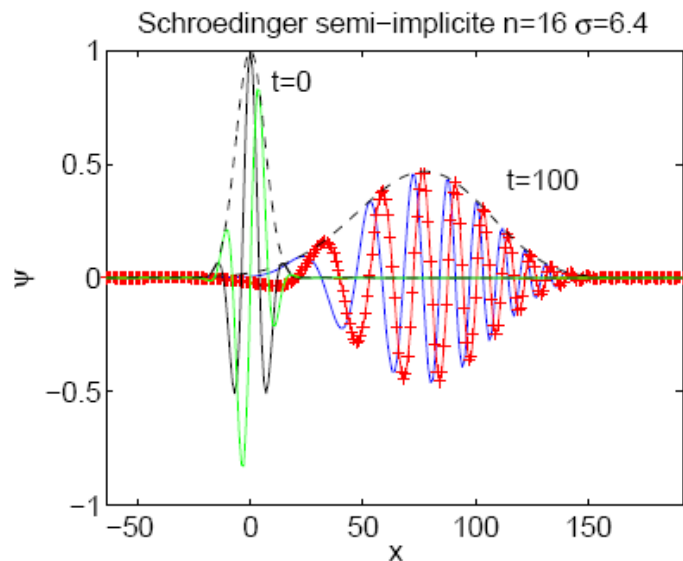
- Paquet d'onde Gaussien: on initialise l'état de la particule par une onde plane dont l'amplitude est modulée par une fonction Gaussienne

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

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

Exemples

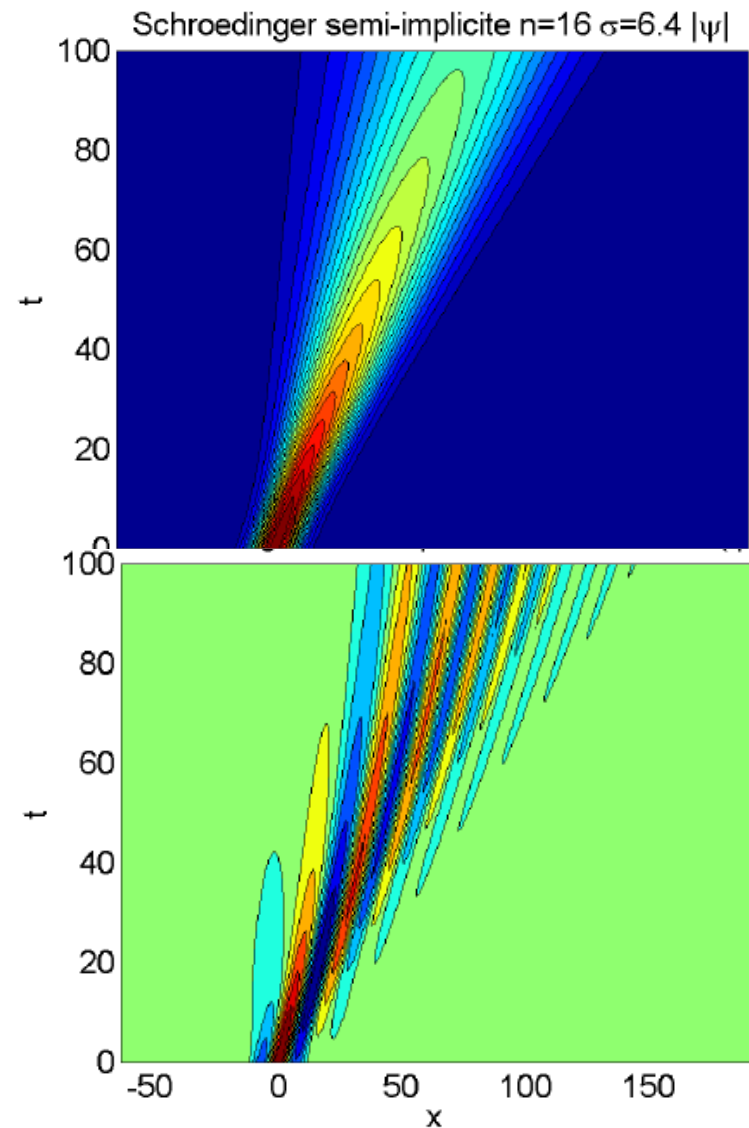
4.3.2 Particule libre



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)?

$$k_0 < 0$$

Comment initialiser le paquet d'onde initial pour qu'il se scinde en deux paquets, l'un se propageant vers la gauche, l'autre vers la droite?

On remarque que l'Eq. de Schrödinger est du premier ordre en dérivée temporelle ($\frac{\partial \psi}{\partial t}$), 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*** $\psi(x, -\Delta t)$, contrairement aux ondes classiques.

■ 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

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

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

Conservation de la probabilité: semi-implicite

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

Conservation de la probabilité: semi-implicite et implicite

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:

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

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

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

Conservation de la probabilité: 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:

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

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 de différences finies «centrés» sont préférables, on gagne en **ordre de convergence**.

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!**

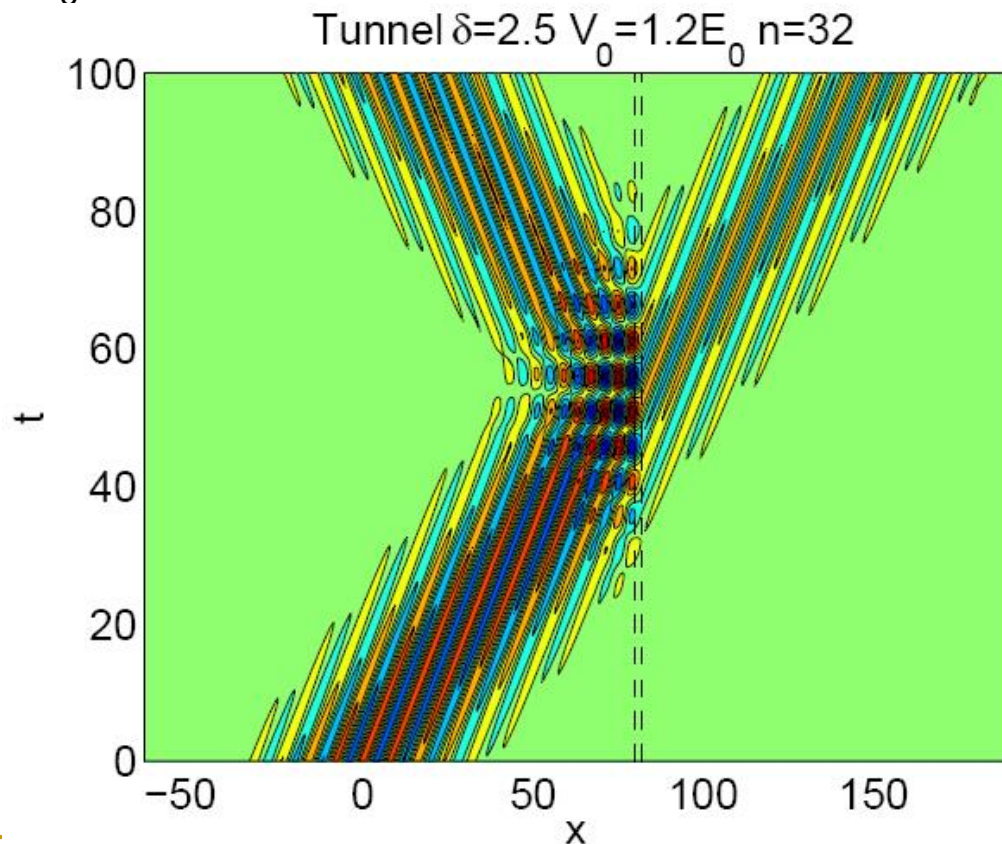
$$\langle H \rangle(t) = \text{const}$$

Preuve:

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

■ 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 V_0 et l'épaisseur de la barrière
- Cas $V_0 > E$



$\text{Re}(\psi(x,t))$

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

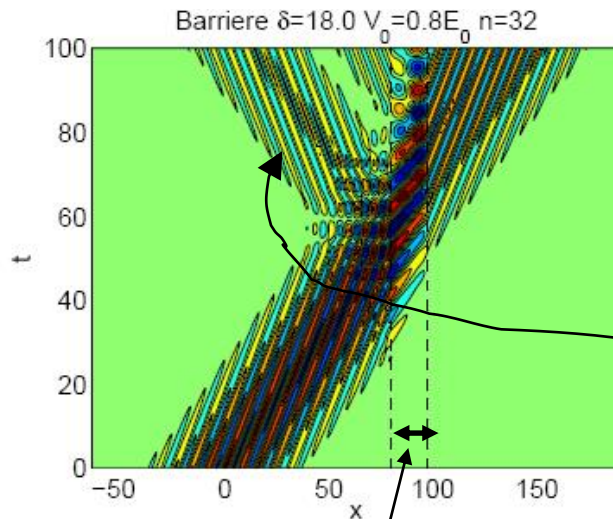
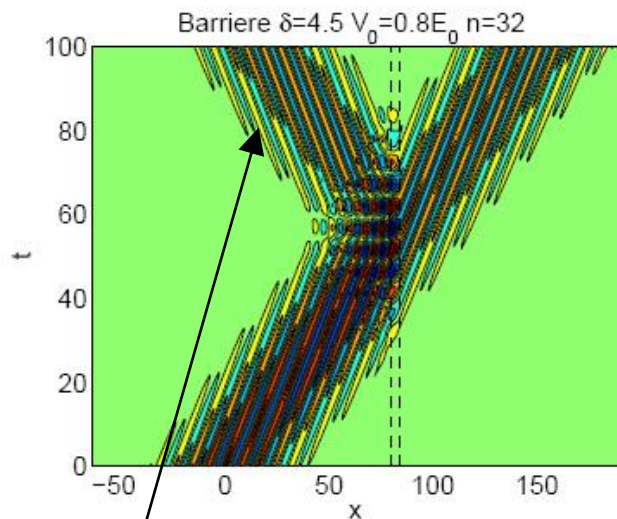
Voir aussi Ex6

Résonance avec l'épaisseur de la barrière

■ 4.3.3 Barrière de potentiel: résonances

□ Cas $V_0 < E$

$\text{Re}(\psi(x,t))$

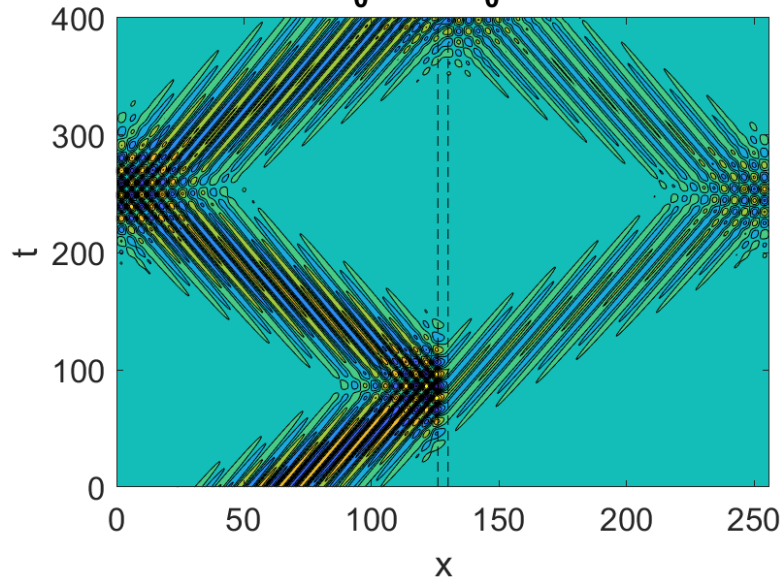


Détection de particule

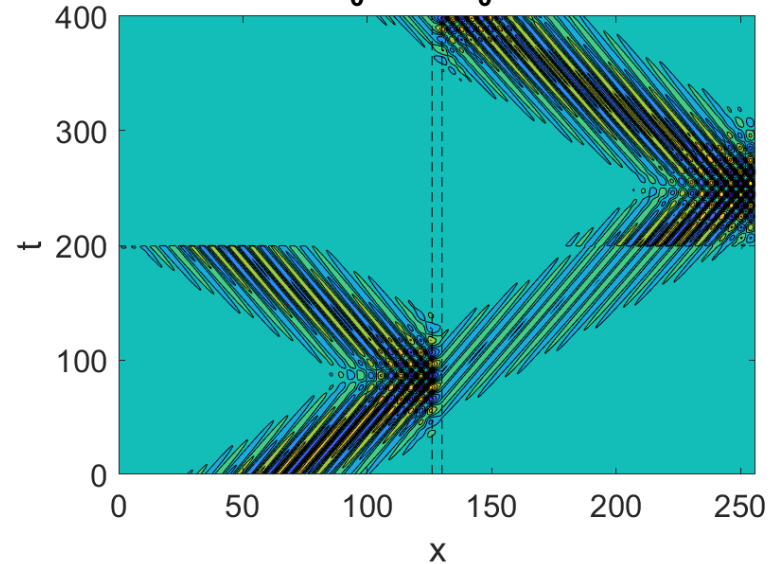
- Que se passe-t-il si le détecteur détecte une particule («tac»)?
- Que devient la fonction d'onde?
- La détection conserve-t-elle l'énergie?
- ***Cela fait-il une différence sur l'évolution ultérieure ($t > t_{tac}$) de la particule si on l'a détectée en $t = t_{tac}$, par rapport au cas où on ne l'a pas détectée ?***
- Complément facultatif Ex.6
- Que puis-je dire si le détecteur ne détecte pas la particule?
- Est-elle à gauche ou à droite?

Détection ou non ...

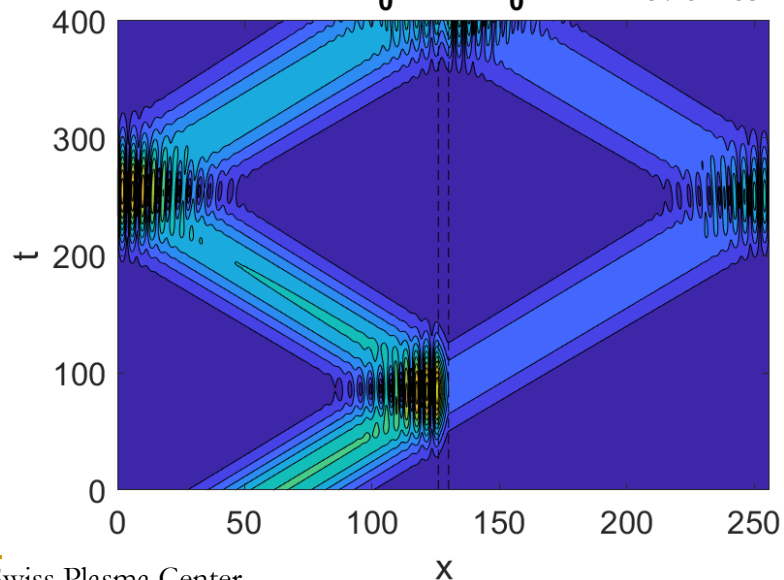
Barrier $\delta=4.3$ $V_0=1.02E_0$ $n=32$ $\text{Re}(\psi(x,t))$



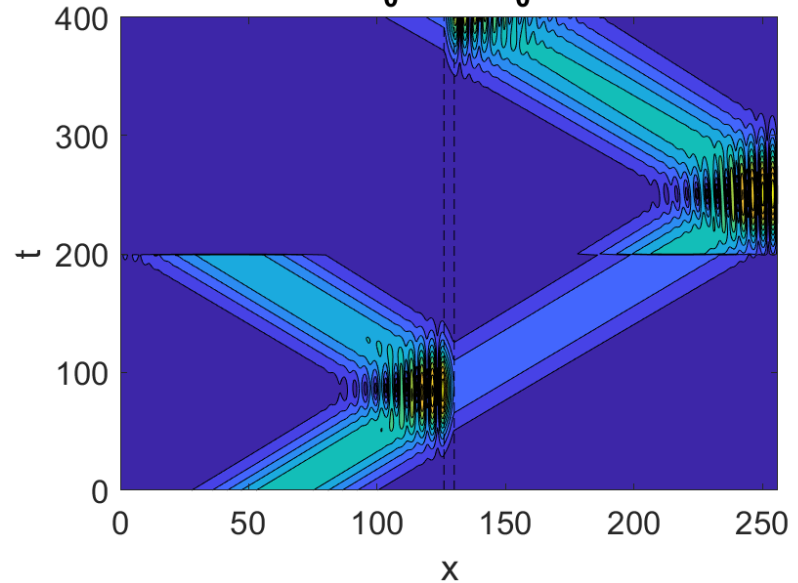
Barrier $\delta=4.3$ $V_0=1.02E_0$ $n=32$ $\text{Re}(\psi(x,t))$



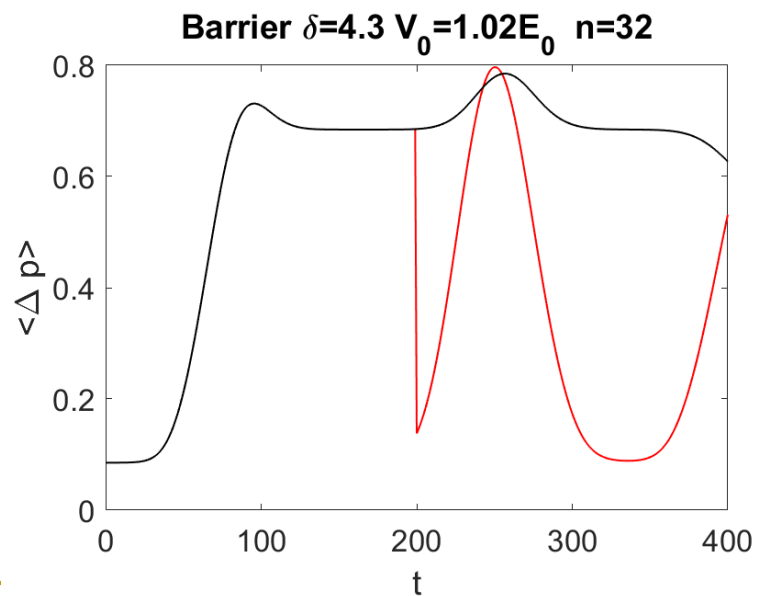
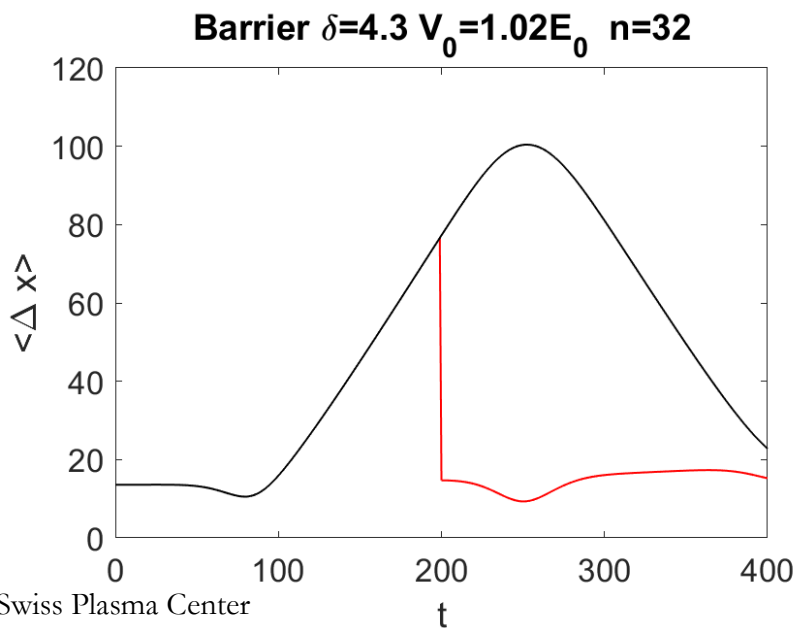
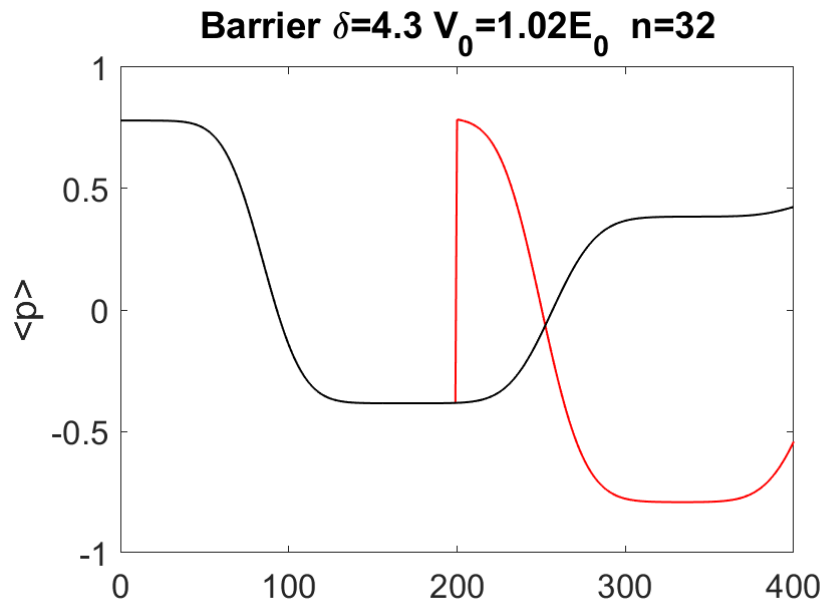
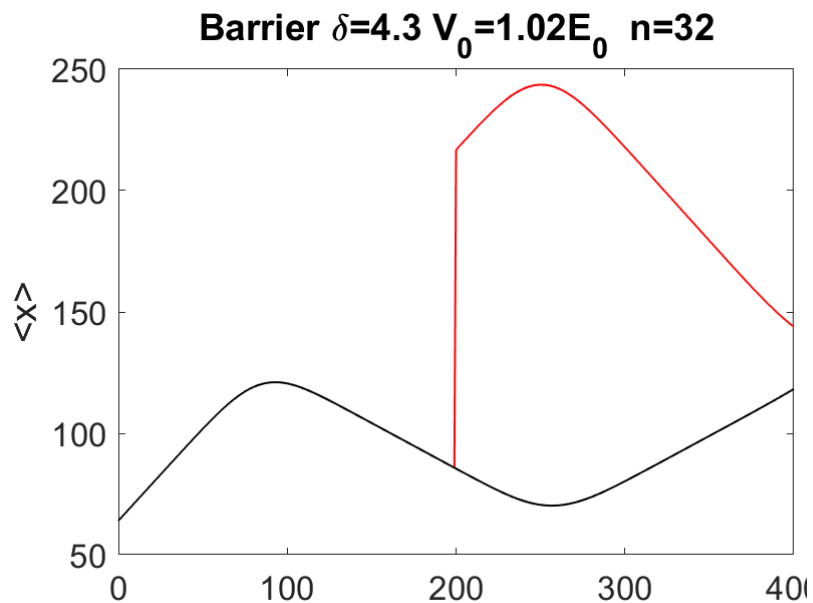
Barrier $\delta=4.3$ $V_0=1.02E_0$ $n=32$ $|\psi(x,t)|$



Barrier $\delta=4.3$ $V_0=1.02E_0$ $n=32$ $|\psi(x,t)|$

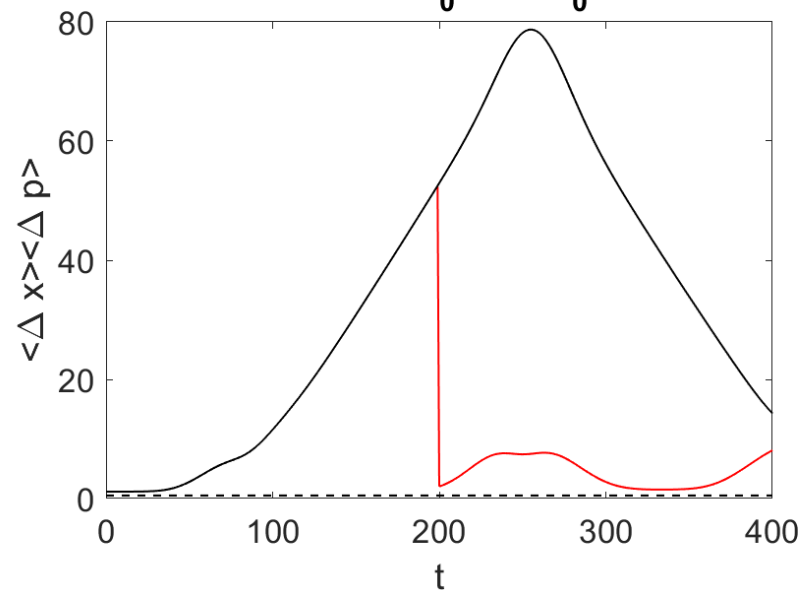


Détection ou non ...

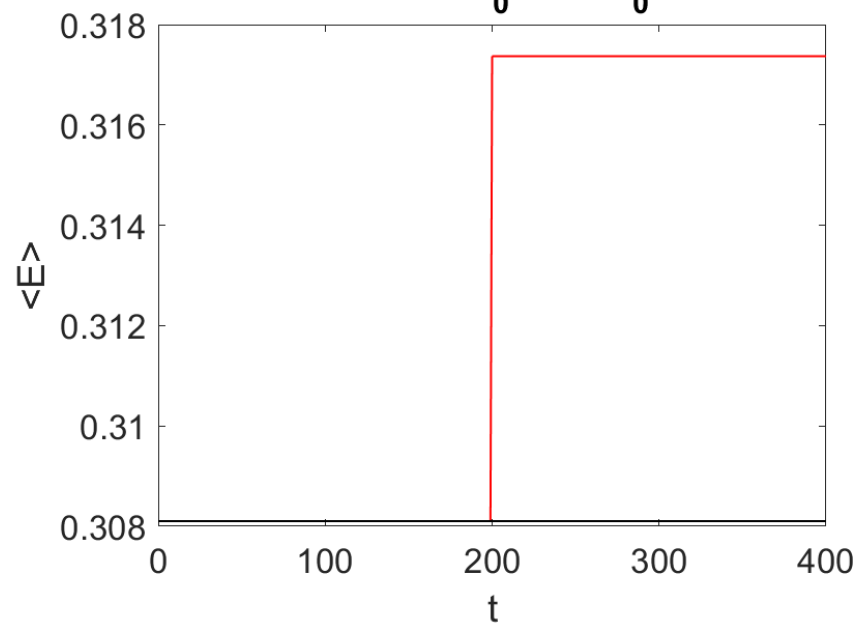


Détection ou non ...

Barrier $\delta=4.3$ $V_0=1.02E_0$ $n=32$

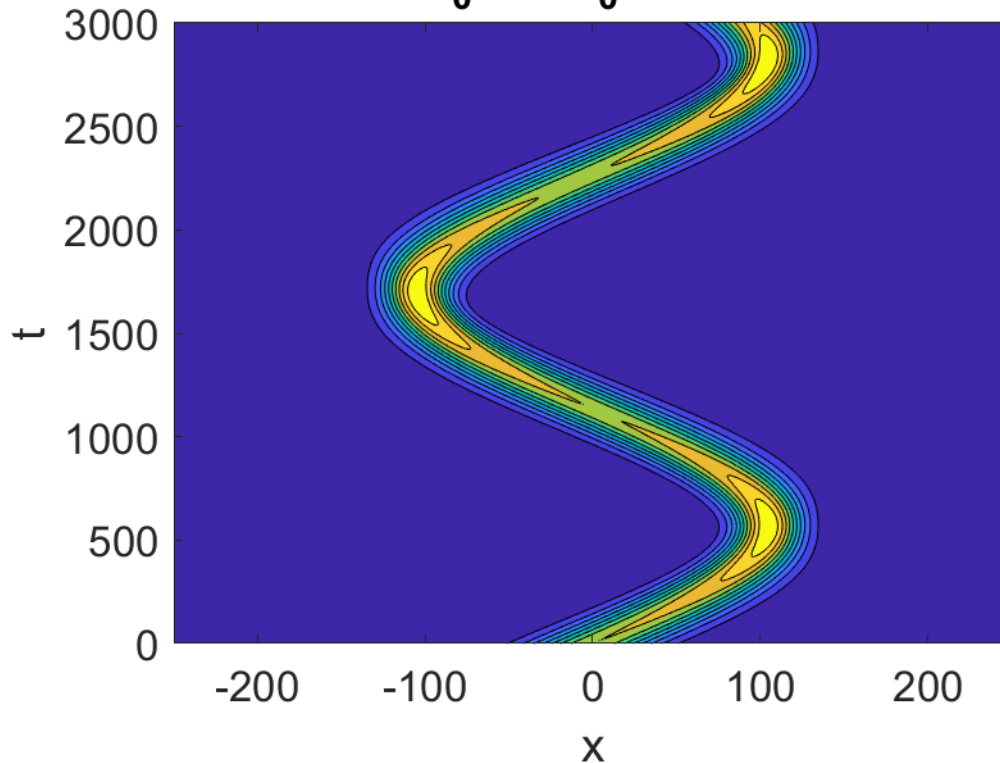
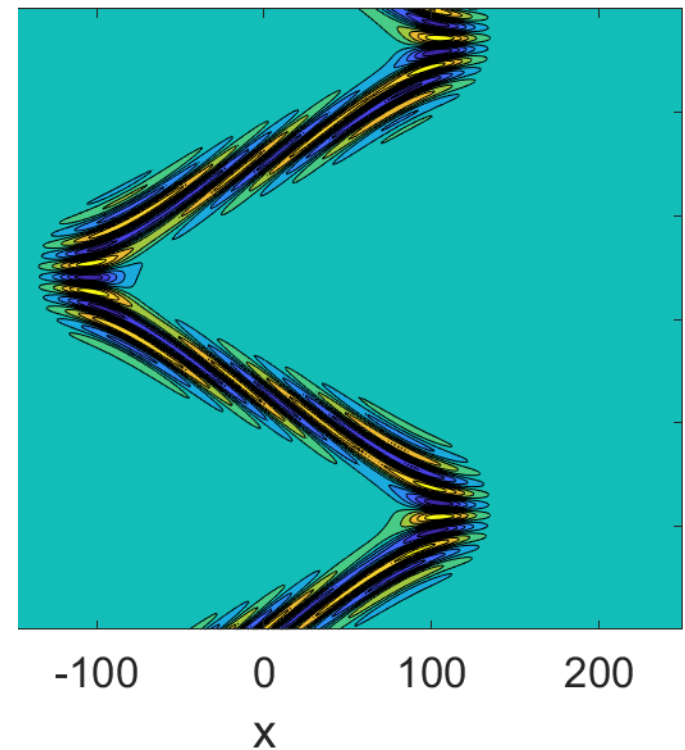


Barrier $\delta=4.3$ $V_0=1.02E_0$ $n=32$



Oscillateur harmonique

■ 4.3.4 $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$ $V(x) = V_0 \left(\frac{x}{L/2}\right)^2$ $\omega_0^2 = \frac{8V_0}{mL^2}$

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

$$x \in [-L/2 + L/2]$$

$$E_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2m$$

Limite classique

■ Oscillateur harmonique: $\langle x \rangle$ et Δx

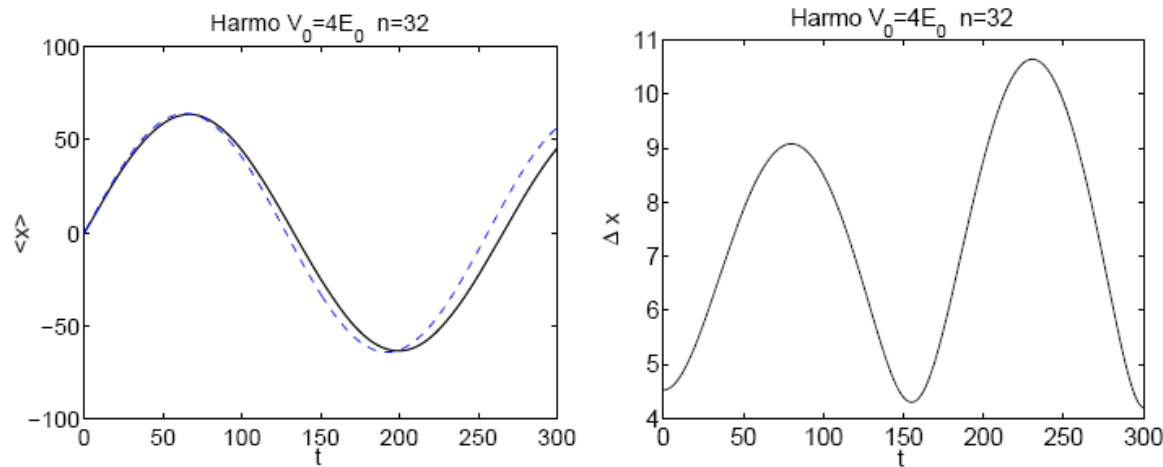


FIG. 4.22 – Particule dans un potentiel harmonique (même simulation que la FIG. 4.21).
A gauche : position moyenne $\langle x \rangle (t)$, avec en traitillés la solution de la physique classique. A droite, incertitude sur la position $\langle \Delta x \rangle (t)$.

■ Particule classique d'énergie

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

- Etats dits «quasi-classiques», tels que leur incertitude Δx 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

