

Physique Numérique – Semaine 13

Rappel de la semaine 12

4.3 Schrödinger.

- Schéma semi-implicite de Crank-Nicolson: conservation exacte de la probabilité totale et de l'énergie moyenne.
- Heisenberg et Fourier
- Particule dans un potentiel $V(x)$, effet tunnel, résonance

Plan de la semaine 13

4.3 Schrödinger

- DéTECTEUR de particule
- Particule dans un potentiel $V(x)$: Oscillateur harmonique, états quasi-classiques (cohérents)
- Etats stationnaires (ou «propres»), énergies «propres».
- Particule dans un potentiel $V(x)$ périodique. Gaps.

Exercice 6: à rendre AUJOURD'HUI.

Physique Numérique – Semaine 13

Evaluation approfondie des cours: jusqu'au 9 juin
5 minutes à la fin du cours

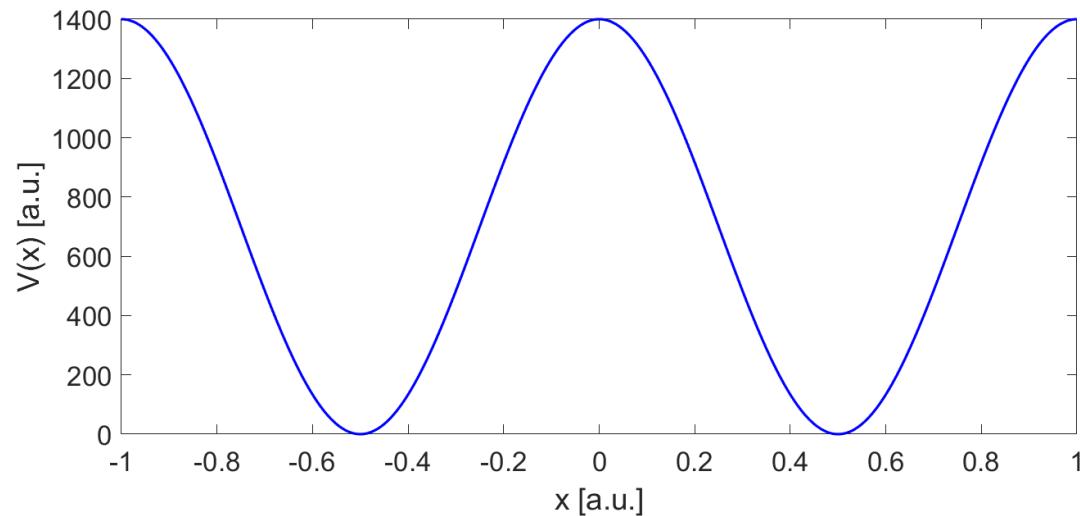
- Aller sur la page d'accueil de Moodle (PAS sur celle du cours)
- Aller à la case «Evaluation approfondie»
- Sélectionner le cours PHYS-210_SP24 et compléter le feedback

Documentation

- Lecture pour la Semaine #13: Notes de cours
 - **Section 4.3.4 Oscillateur harmonique**
 - **Section 4.3.5 Etats stationnaires (propres)**

<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 : “rattrappage”

■ 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:

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

Opérateur A .

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

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

$$\text{soit } T_{\Delta t} = A^{-1} A^*$$

$$\boxed{\psi_{t+\Delta t} = T_{\Delta t} \psi_t}$$

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:

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

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 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!**

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

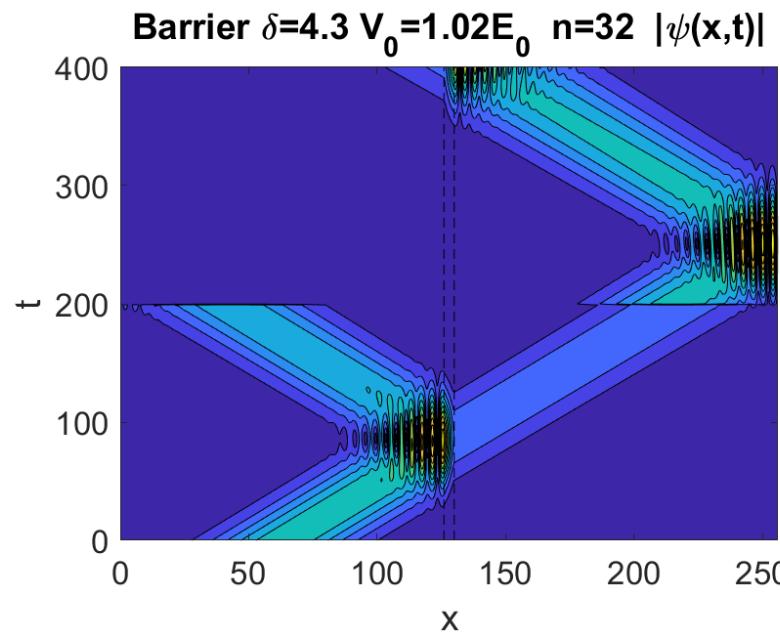
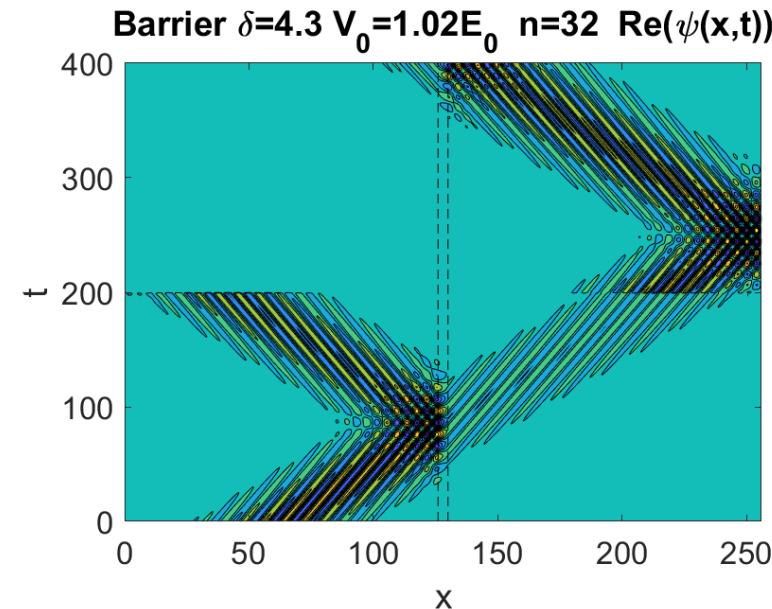
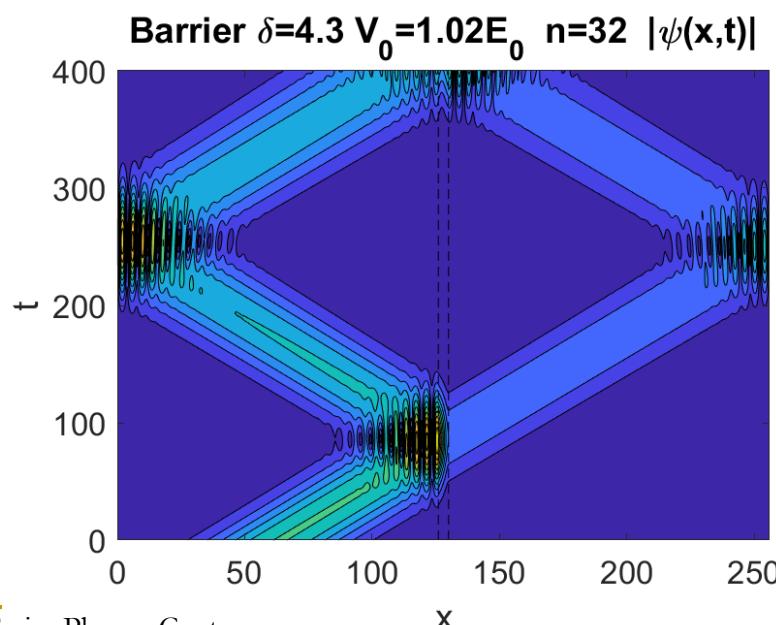
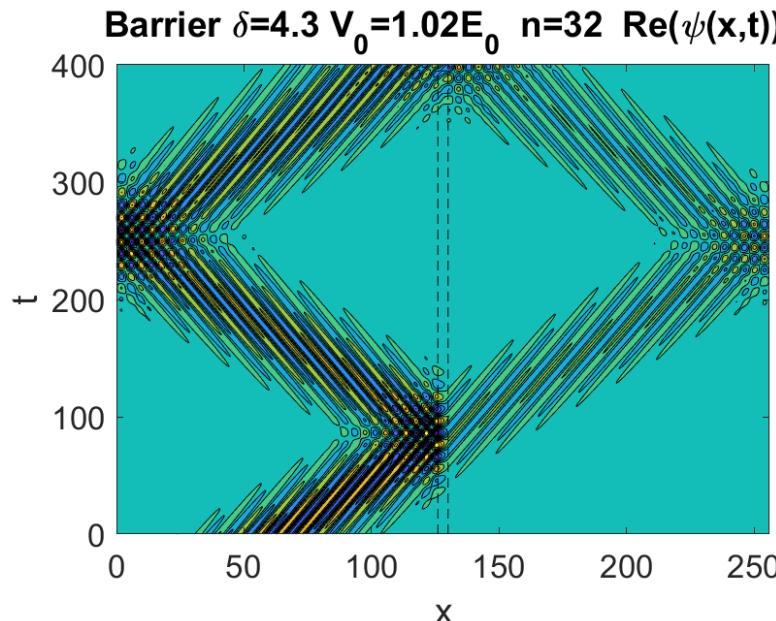
Preuve:

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

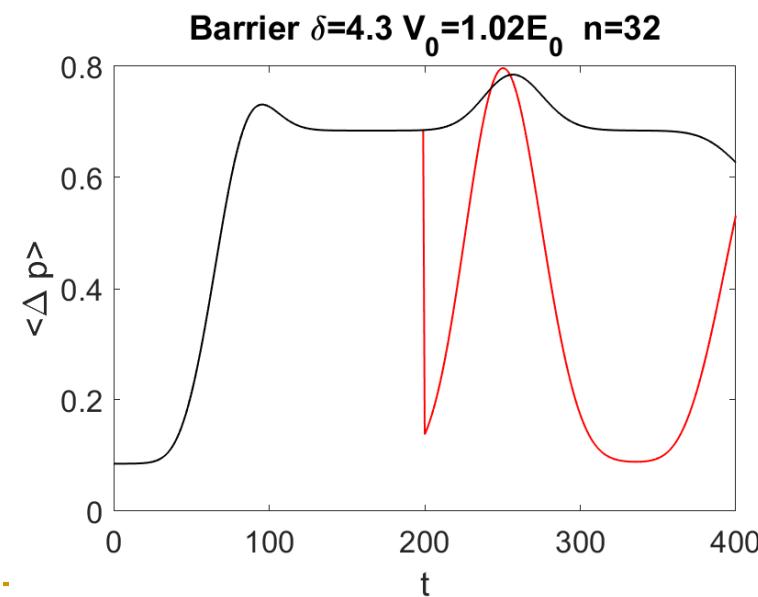
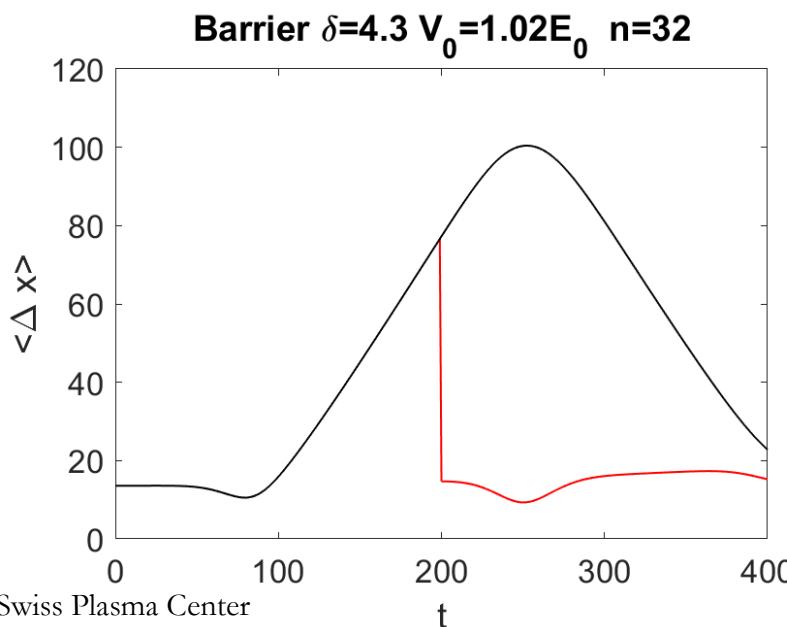
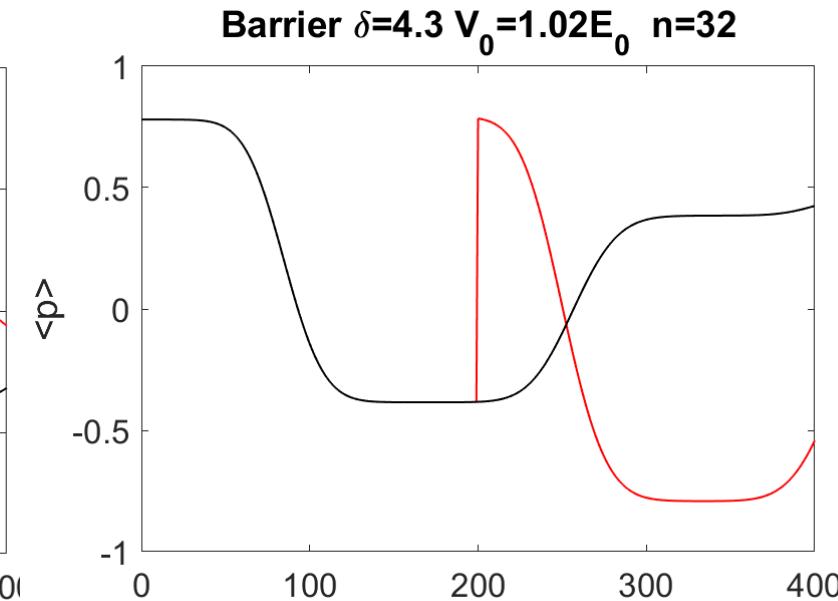
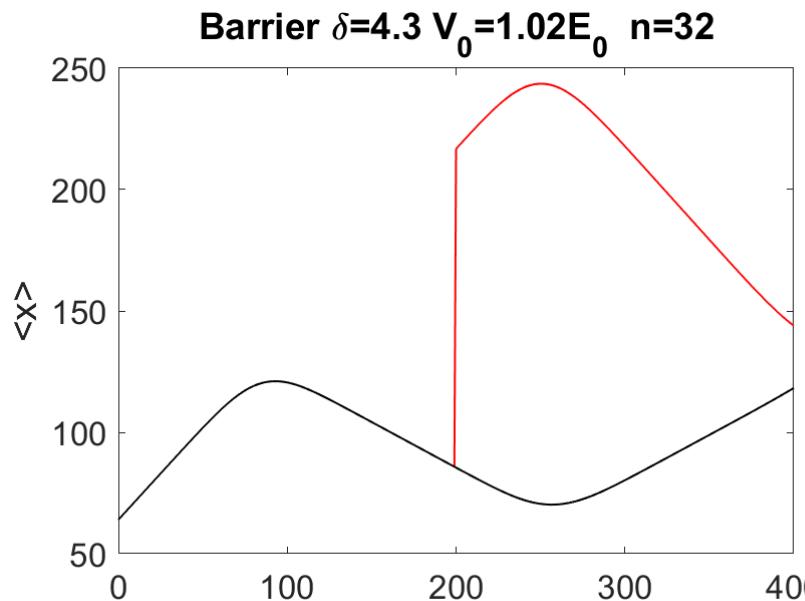
Détection de particule

- 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 ($t > t_{\text{tac}}$) de la particule si on l'a détectée en $t = t_{\text{tac}}$, par rapport au cas où on ne l'a pas détectée ?***
- Complément facultatif Ex.6

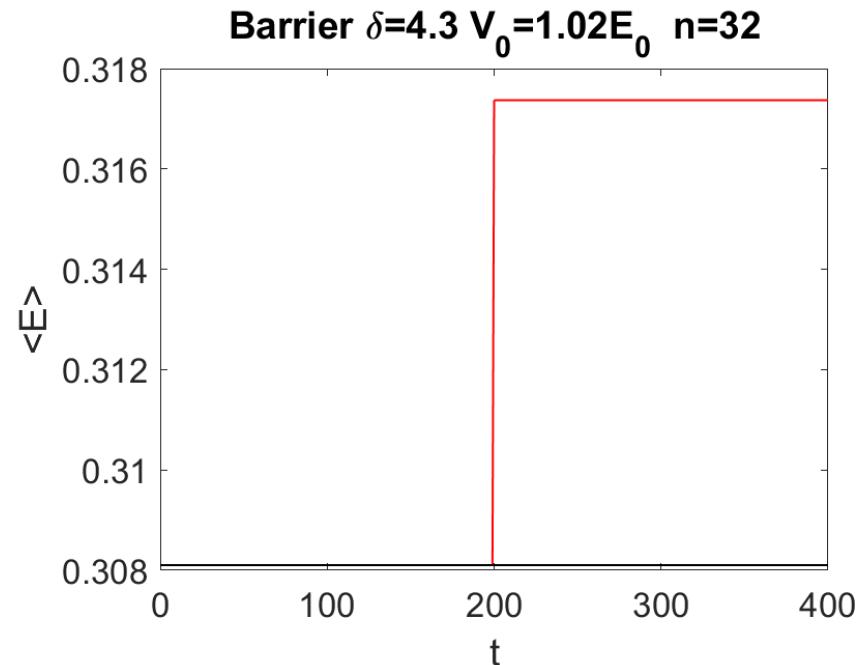
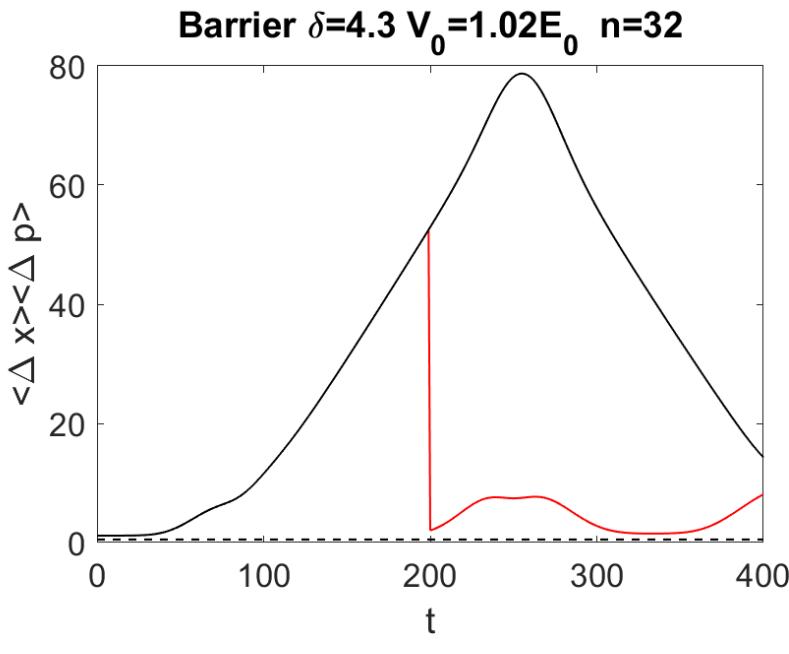
Détection ou non ...



Détection ou non ...



Détection ou non ...



Oscillateur harmonique

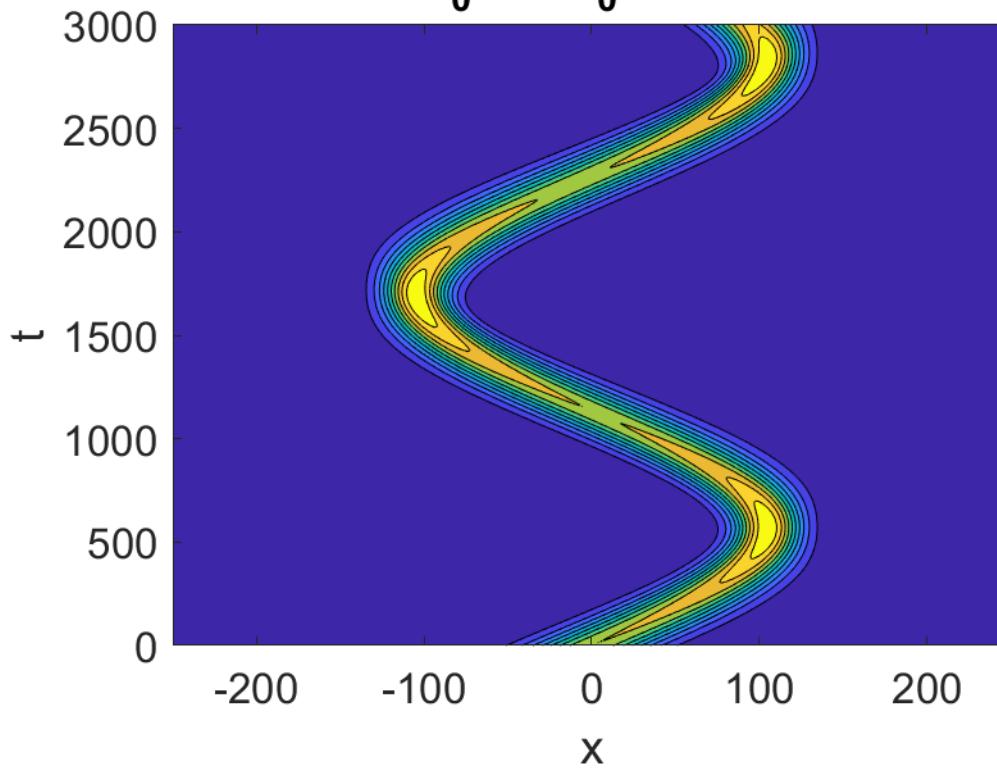
■ 4.3.4

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$$

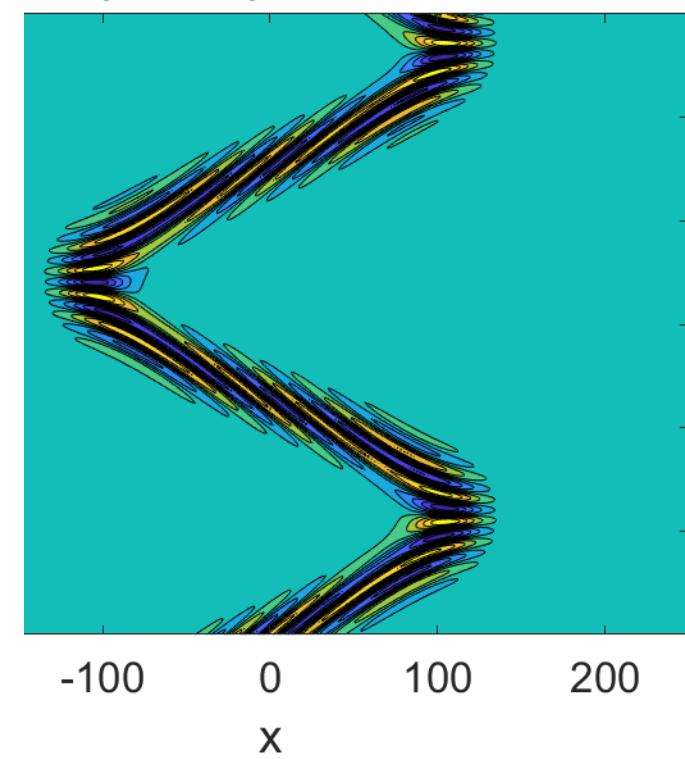
$$V(x) = V_0 \left(\frac{x}{L/2} \right)^2$$

$$\omega_0^2 = \frac{8V_0}{mL^2}$$

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



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



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

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

Limite classique

- Thm Ehrenfest:

$$\frac{d \langle p \rangle}{dt} = \langle -\frac{dV}{dx} \rangle$$

$$\frac{d \langle x \rangle}{dt} = \langle \frac{p}{m} \rangle .$$

- ! En général

$$\left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle \neq \frac{dV(\langle x \rangle)}{dx}$$

- Particule classique #1 d'énergie

$$E_{class,1} = \langle H \rangle = \langle p^2/2m + V(x) \rangle$$

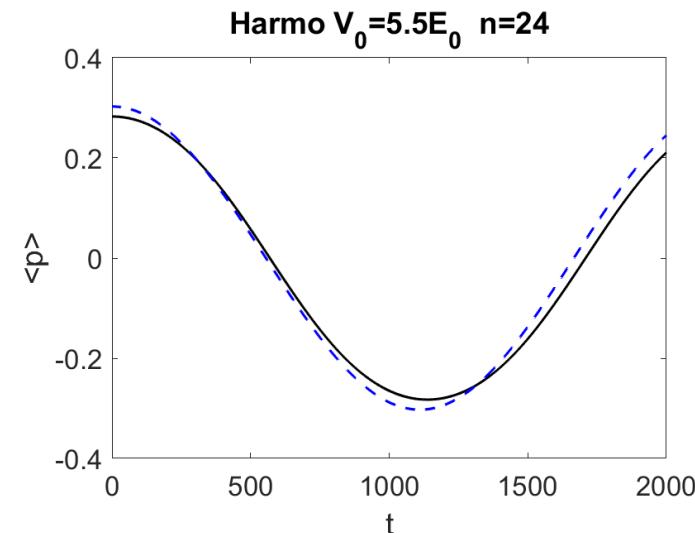
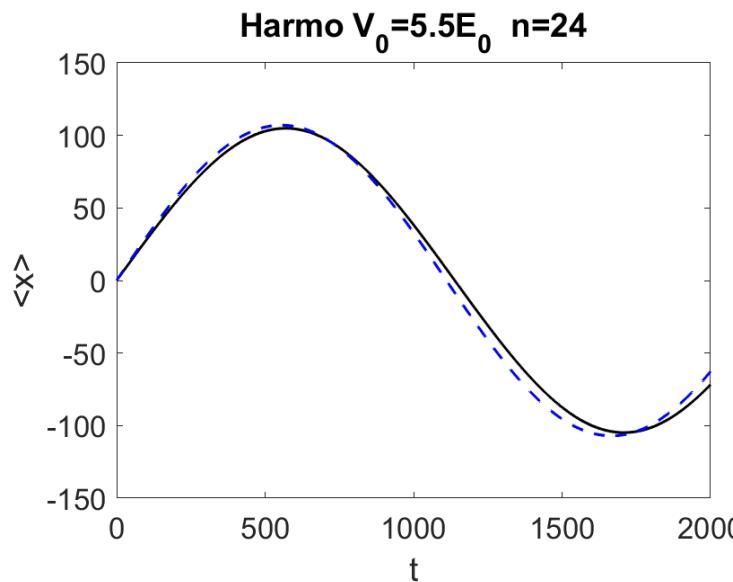
- Particule classique #2 de quantité de mvmt

$$p_{class,2} = \langle p \rangle$$

$$E_{class,1} \neq E_{class,2} \quad p_{class,1} \neq p_{class,2}$$

Limite classique

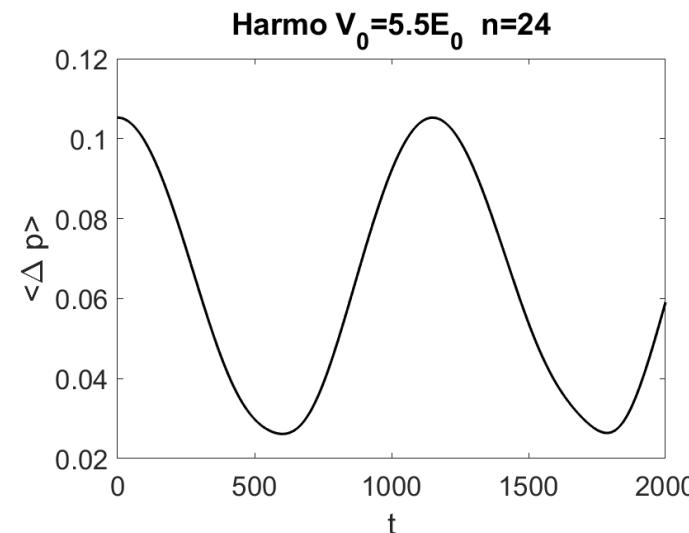
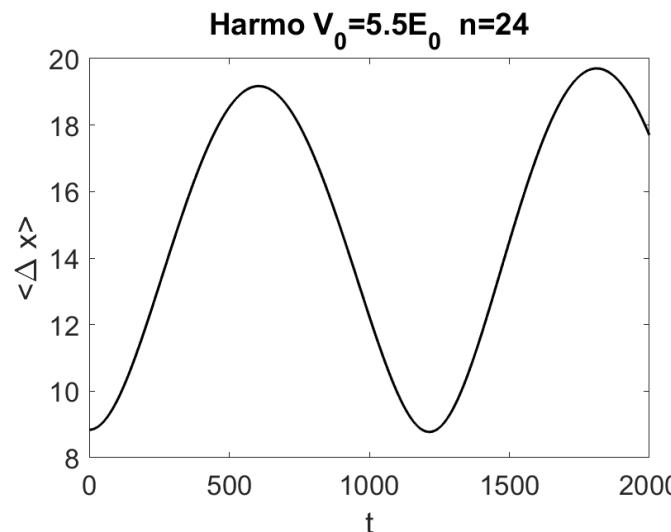
- Oscillateur harmonique:
- $\langle x \rangle(t)$ vs $x_{\text{class}}(t)$ et $\langle p \rangle(t)$ vs $p_{\text{class}}(t)$



- L'accord n'est pas parfait... est-ce un problème numérique, ou un problème physique?

Limite classique

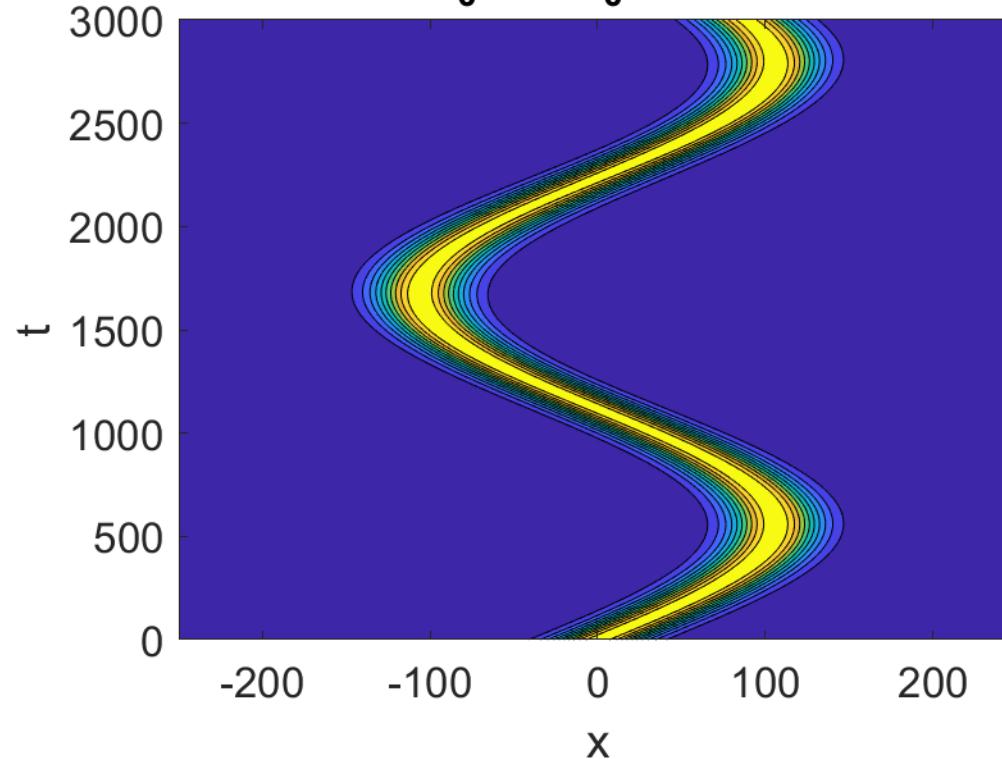
- Oscillateur harmonique:
- Incertitudes...



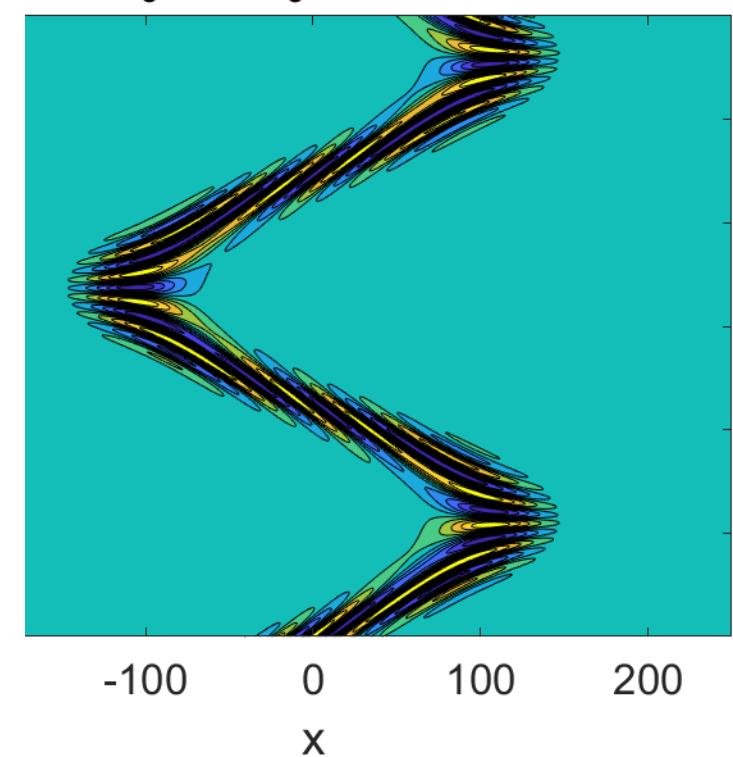
- Δx augmente quand Δp diminue et vice-versa... Peut-on trouver des particules quantiques avec $\Delta x=\text{const}$?

Etats cohérents ou semi - classiques

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



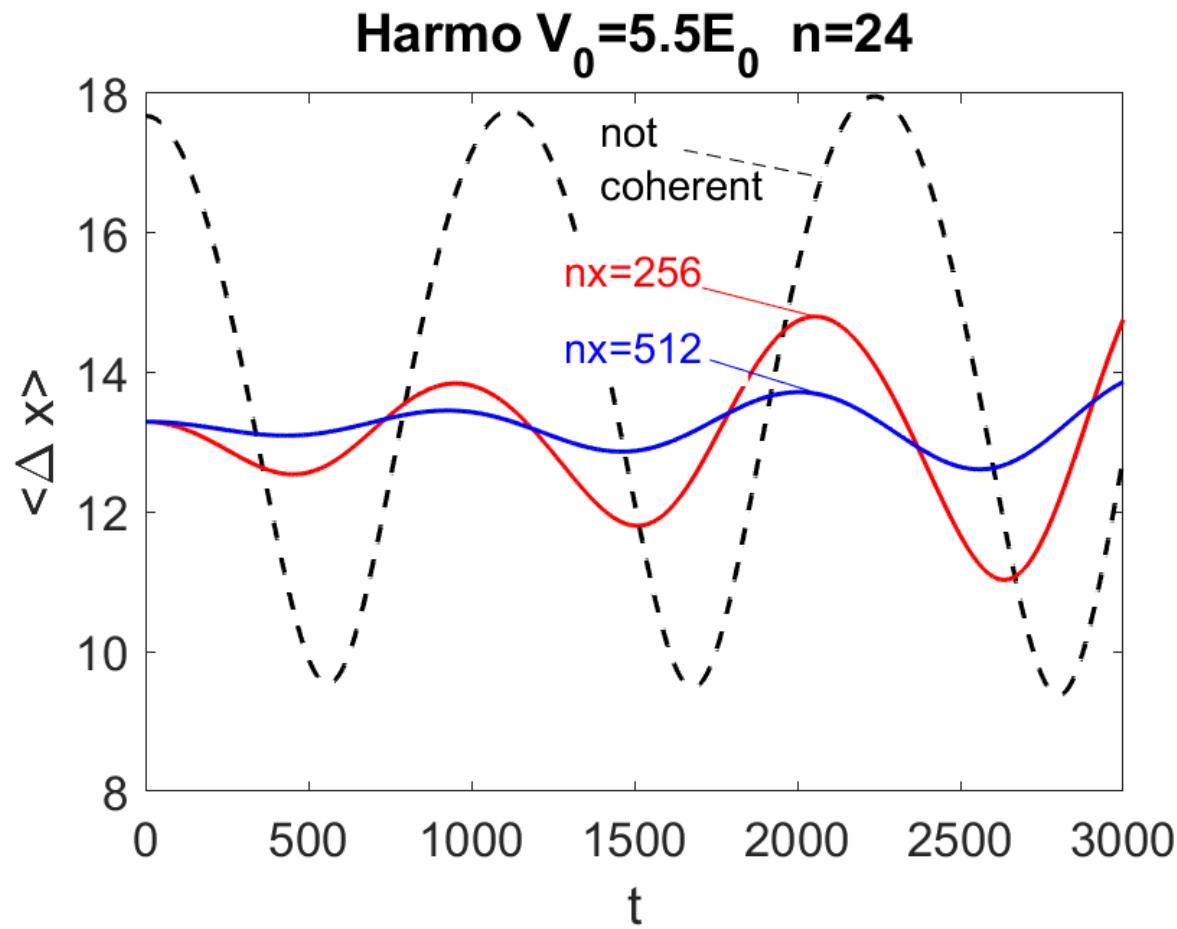
mo $V_0 = 5.5E_0$ n=24 $\text{Re}(\psi(x,t))$



Etats dits «quasi-classiques», tels que leur incertitude Δx est constante au cours du temps. Il s'agit de paquets d'ondes gaussiens avec

$$\Delta x = \sqrt{\hbar/2 m\omega_0}$$

Etats cohérents ou semi - classiques



Schrödinger stationnaire

■ 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 . $\rightarrow \{\Psi_{(n)}, E_n\}$

Principe de superposition

- Solution Générale de Schroedinger = superposition d'états propres:

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{x}) \exp(-iE_n t / \hbar)$$
- $|c_n|^2$: probabilité que la particule soit dans l'état no n
- D'où une autre méthode, dite *spectrale*, de résolution de Schroedinger:
 - Opérateur H : calcul des fonctions et valeurs propres $\{\Psi_n(x), E_n\}$
 - \rightarrow Matrice H : calcul des valeurs et vecteurs propres $\{\Psi_n(x_i), E_n\}$
 - Calcul des $c_n = \int \Psi_n^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}, 0) dx \rightarrow c_n = \sum_j \Psi_n^*(x_i) \psi(x_i, 0)$
(projection sur les états propres)
 - La solution numérique est:
- Voir aussi <http://falstad.com/qm1d/>

Puits

■ Particule dans un puits de potentiel de profondeur finie

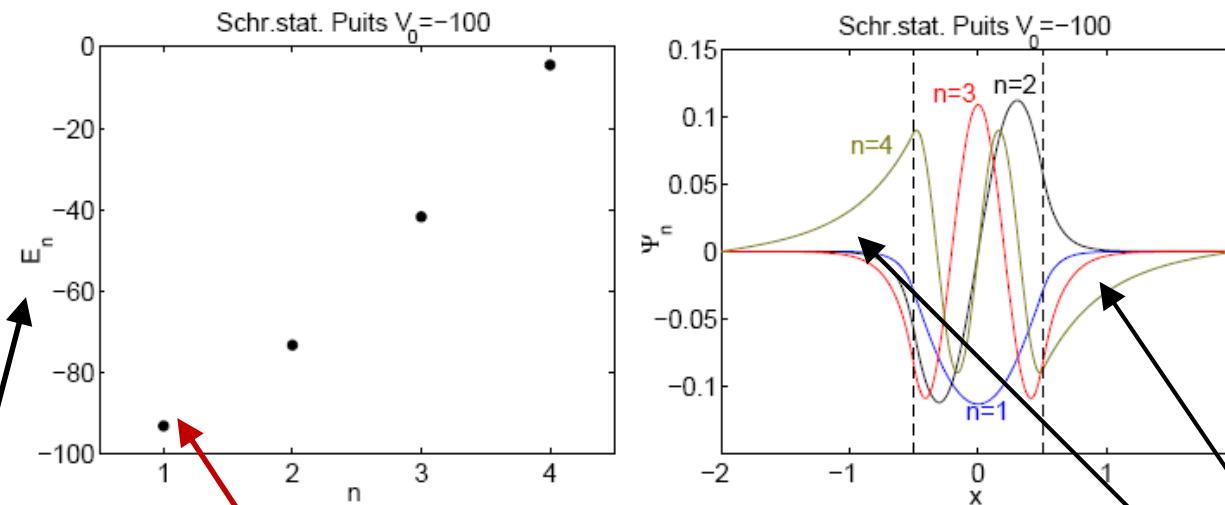


FIG. 4.25 – Spectre des énergies propres (à gauche) et les 4 premiers états propres (à droite) pour une particule confinée dans un puits de potentiel de profondeur finie, $V_0 = -100$, entre $x = -0.5$ et $x = +0.5$ (lignes traitillées).

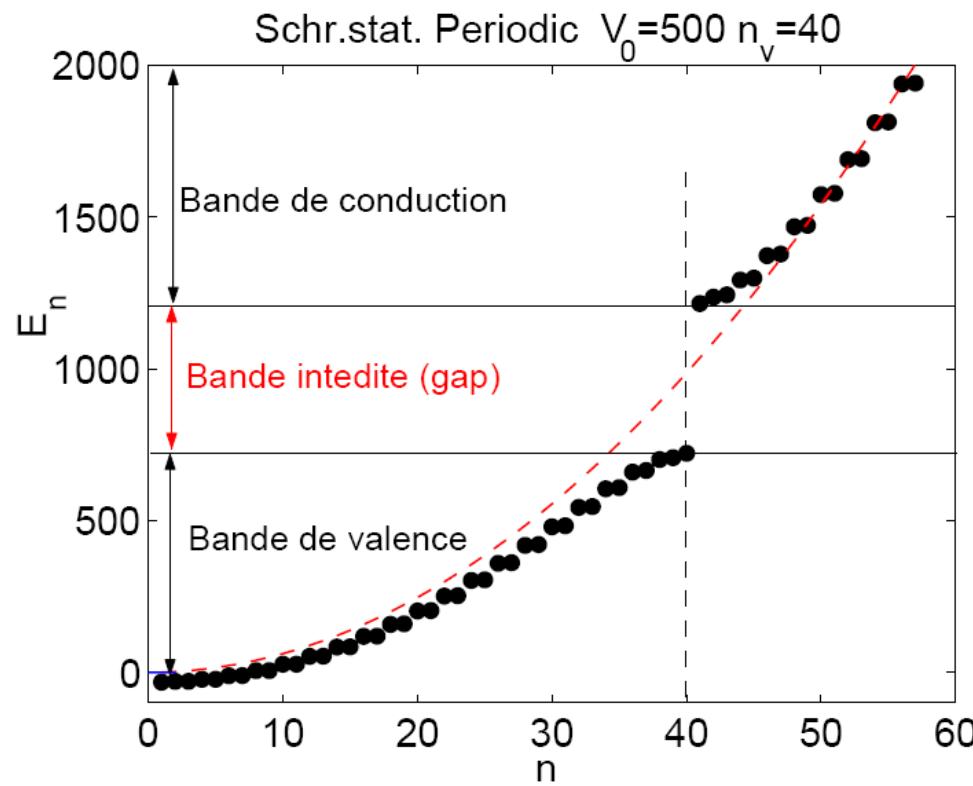
Seul un nombre fini de valeurs négatives de l'énergie est possible:
«spectre discret». Etat fundamental $E > \min(\text{pot})$

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

Etats d'énergie positive: «spectre continu»

■ Particule dans un potentiel périodique. Solide

$$V(x) = V_0 \sin \left(n_{\text{pot}} \frac{2\pi x}{L} \right)$$



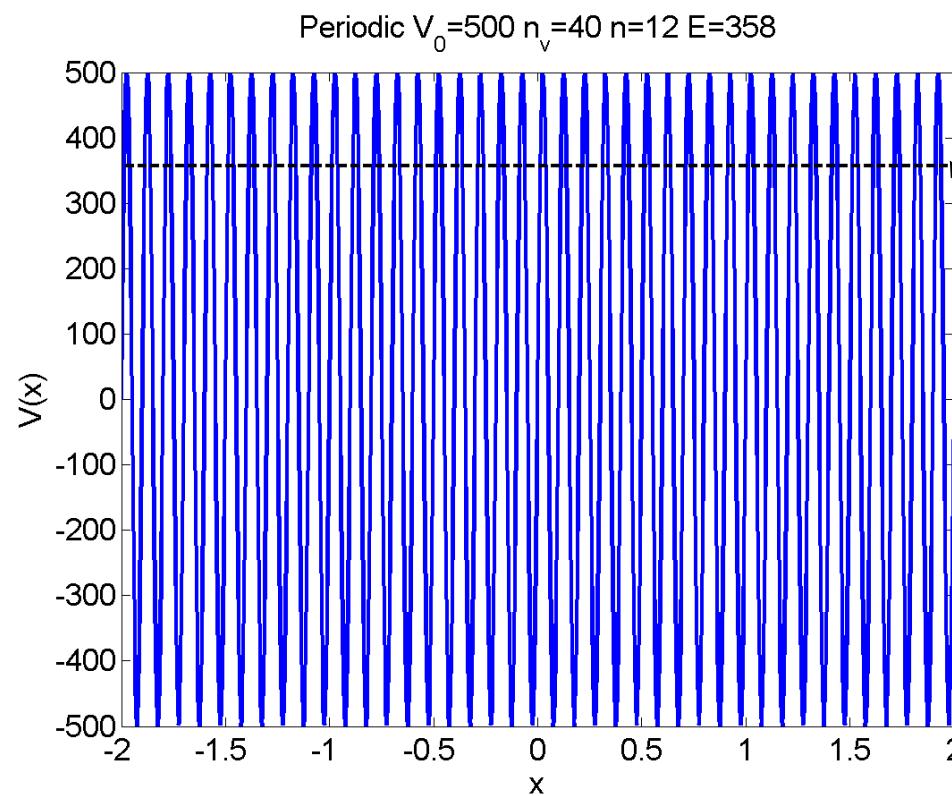
Retour vers Schroedinger dépendant du temps

- Plaçons un paquet d'onde initial dans un potentiel périodique
- Observons comment ce paquet d'onde se propage dans le système
- Le premier paquet d'onde a une énergie inférieure aux maxima du potentiel
- Le deuxième paquet d'onde a une énergie supérieure aux maxima du potentiel
- ... QUIZ: qui va gagner la course?

Potentiel périodique

Energie inférieure aux maxima de V

$$V(x) = V_0 \sin\left(n_{\text{pot}} \frac{2\pi x}{L}\right)$$



Paquet d'onde initial:

$$\psi(x,0) = Ce^{ik_0x} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}$$

$$k_0 = \frac{2\pi n}{x_r - x_l}$$

Energie (esp.math.) de la particule

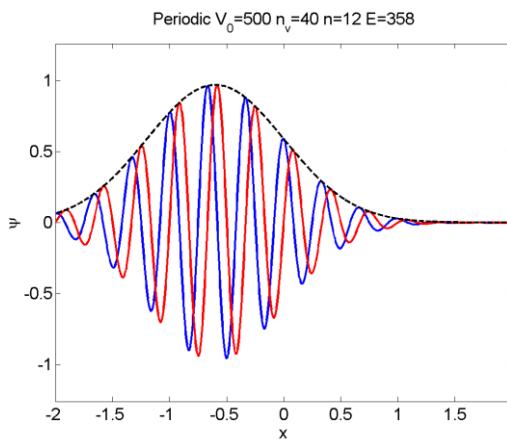
$$\langle E \rangle = (\psi, H(\psi))$$

$$\approx \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$$

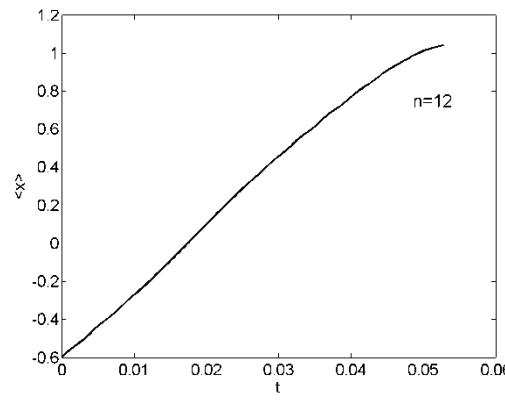
Potentiel périodique

- La particule arrive quand même à avancer!

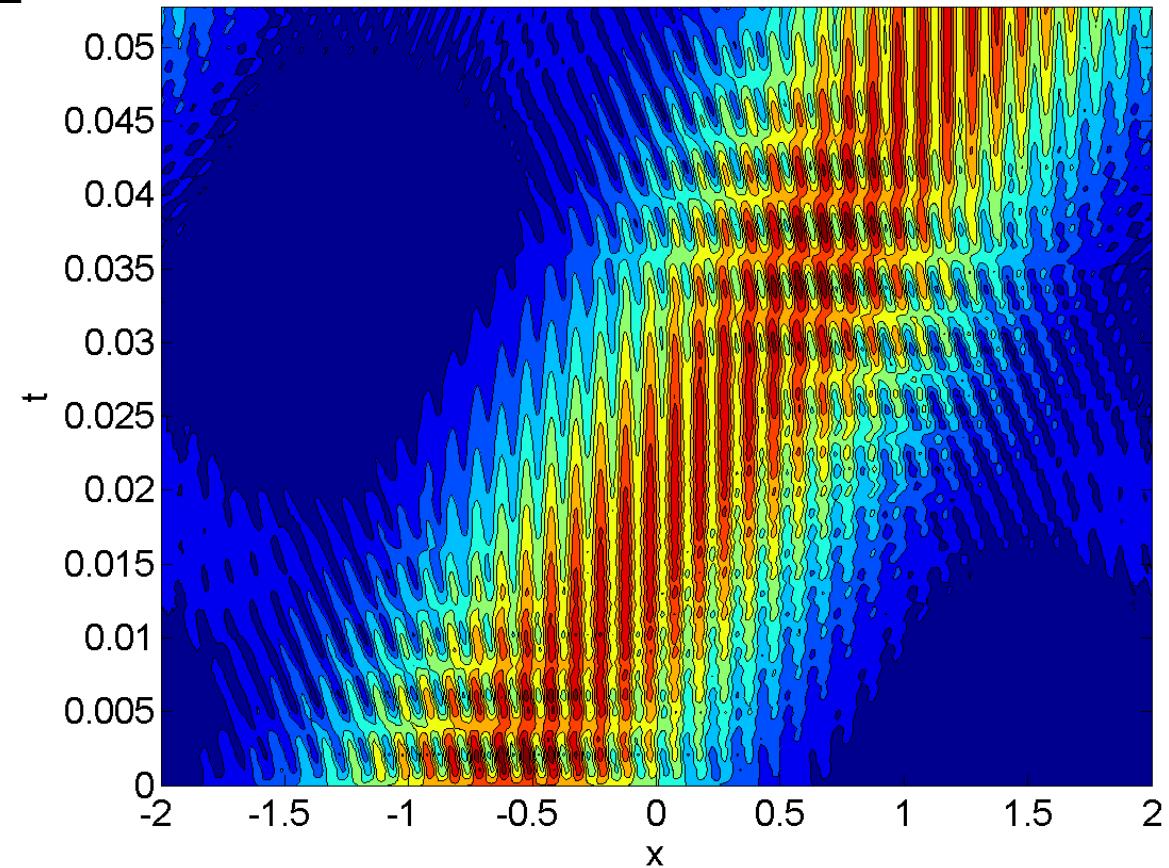
Paquet d'onde initial n=12



Position moyenne

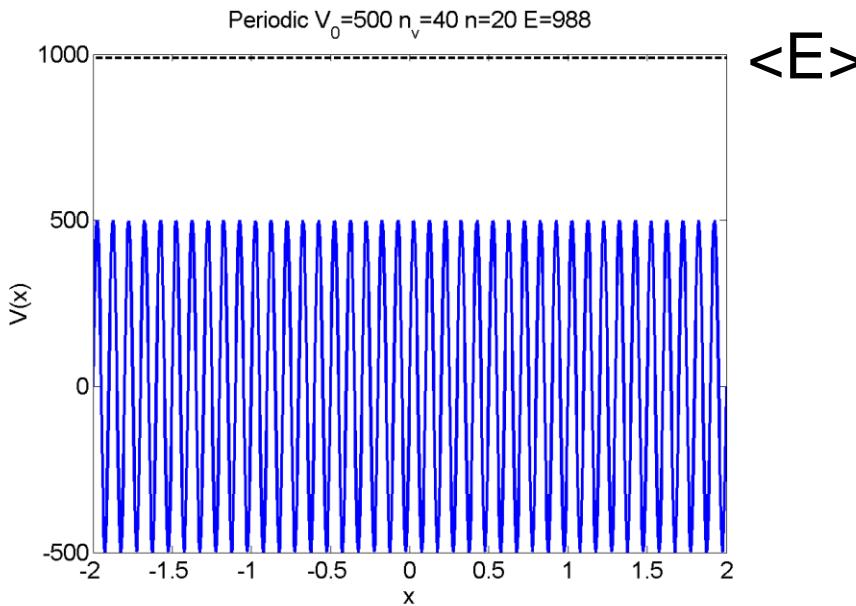


Periodic $V_0=500$ $n_v=40$ $n=12$ $E=358$

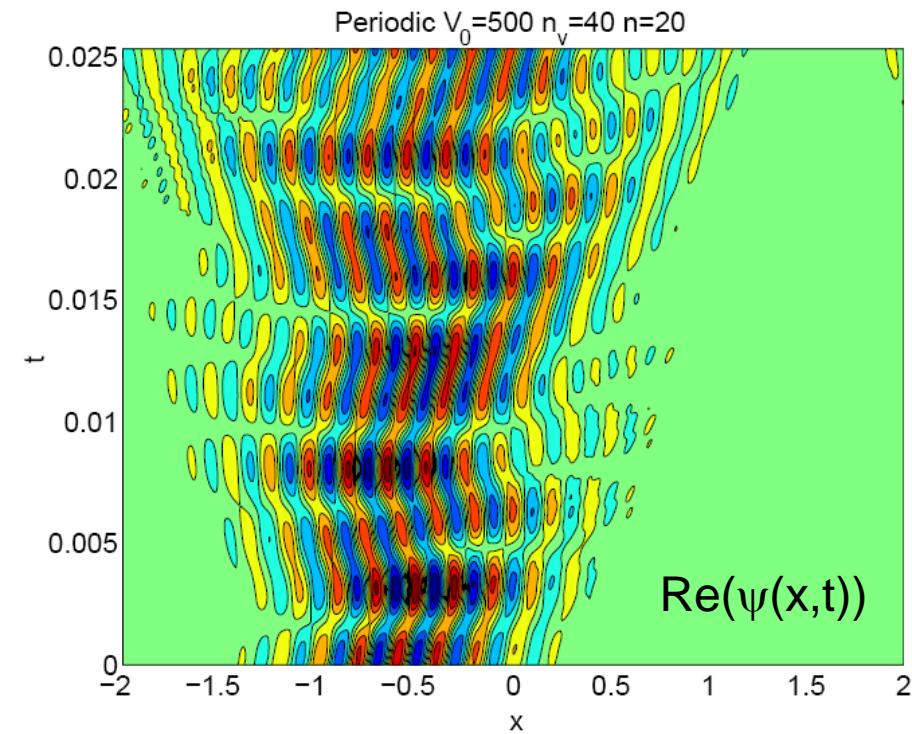


Physique Numérique I-II semaine 28

- Energie supérieure aux maxima de V , ... et pourtant la particule n'arrive pas à avancer!



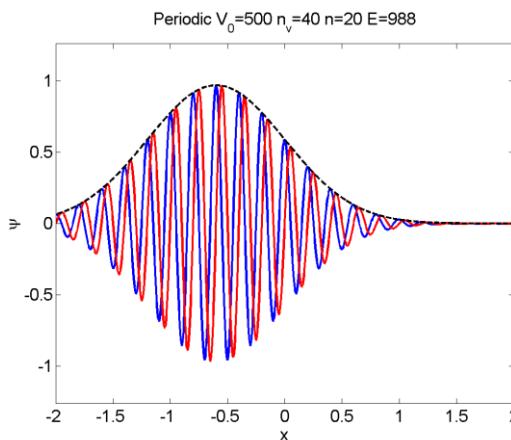
L'énergie de la particule est bien supérieure au maximum du potentiel.



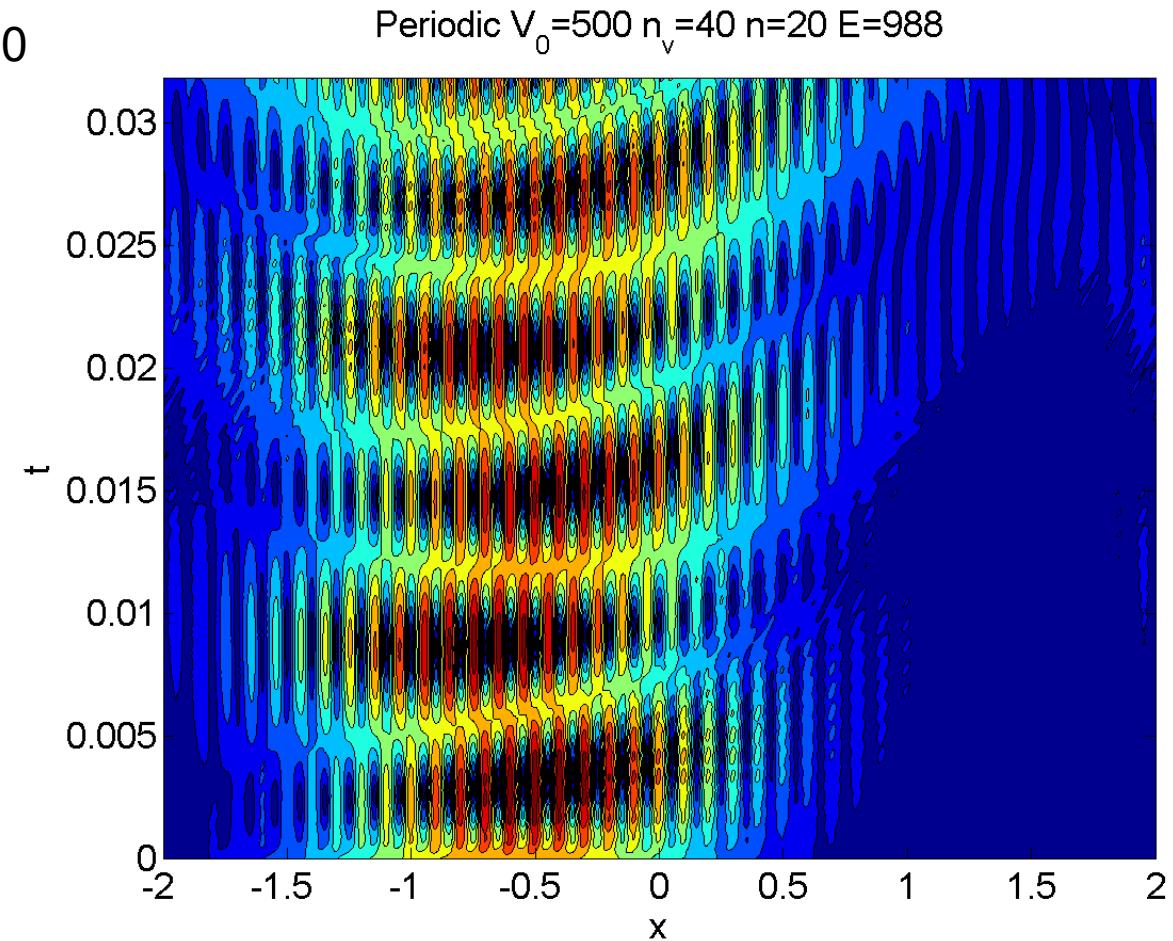
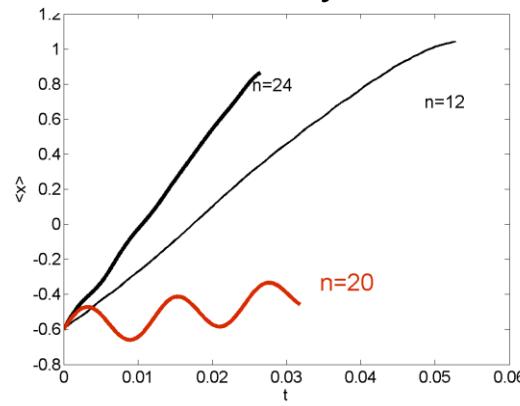
Pourquoi la particule n'arrive-t-elle pas à avancer ?

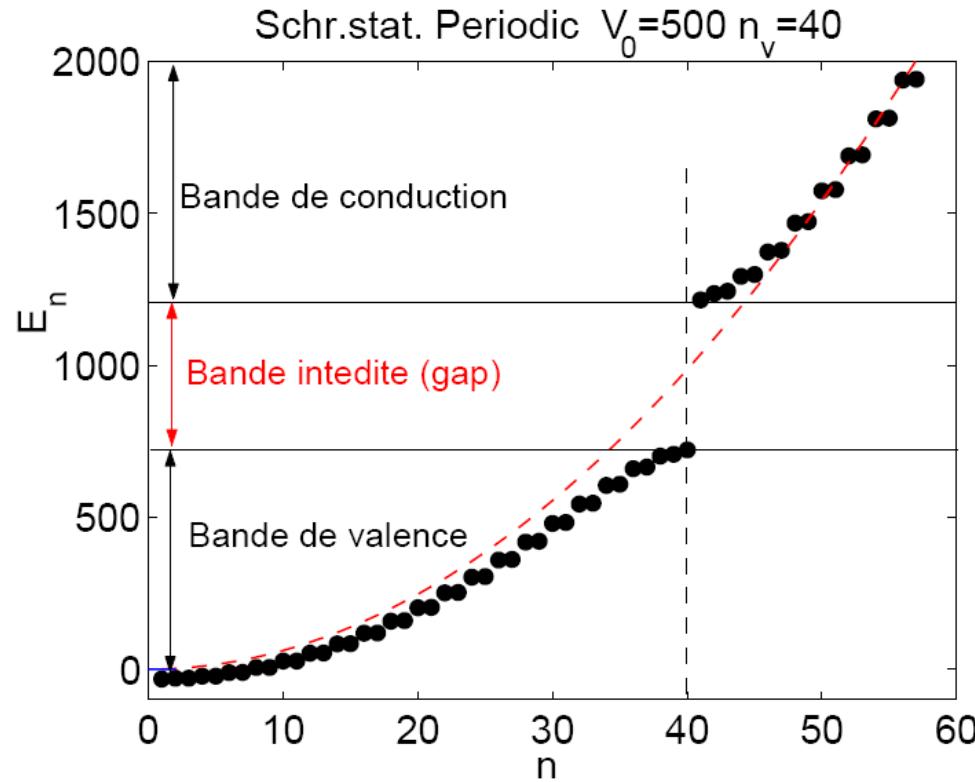
■ Longueur d'onde = 2 x périodicité du potentiel

Paquet d'onde initial $n=20$



Position moyenne

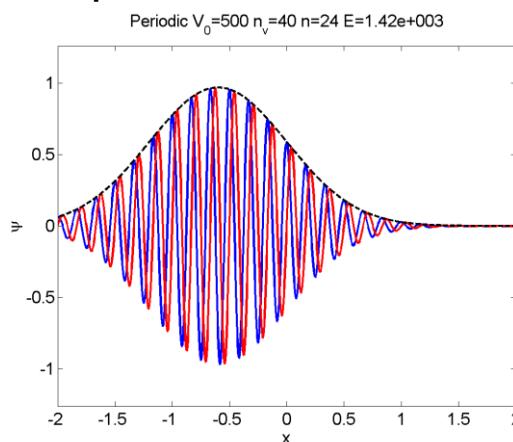




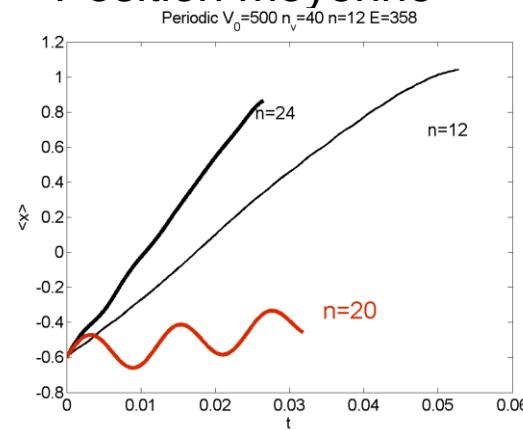
- On est autour du mode $n=40 \rightarrow$ gap
- La vitesse de groupe est nulle au voisinage du gap \rightarrow le paquet d'onde a une vitesse nulle

■ Energie encore plus élevée, au dessus du gap

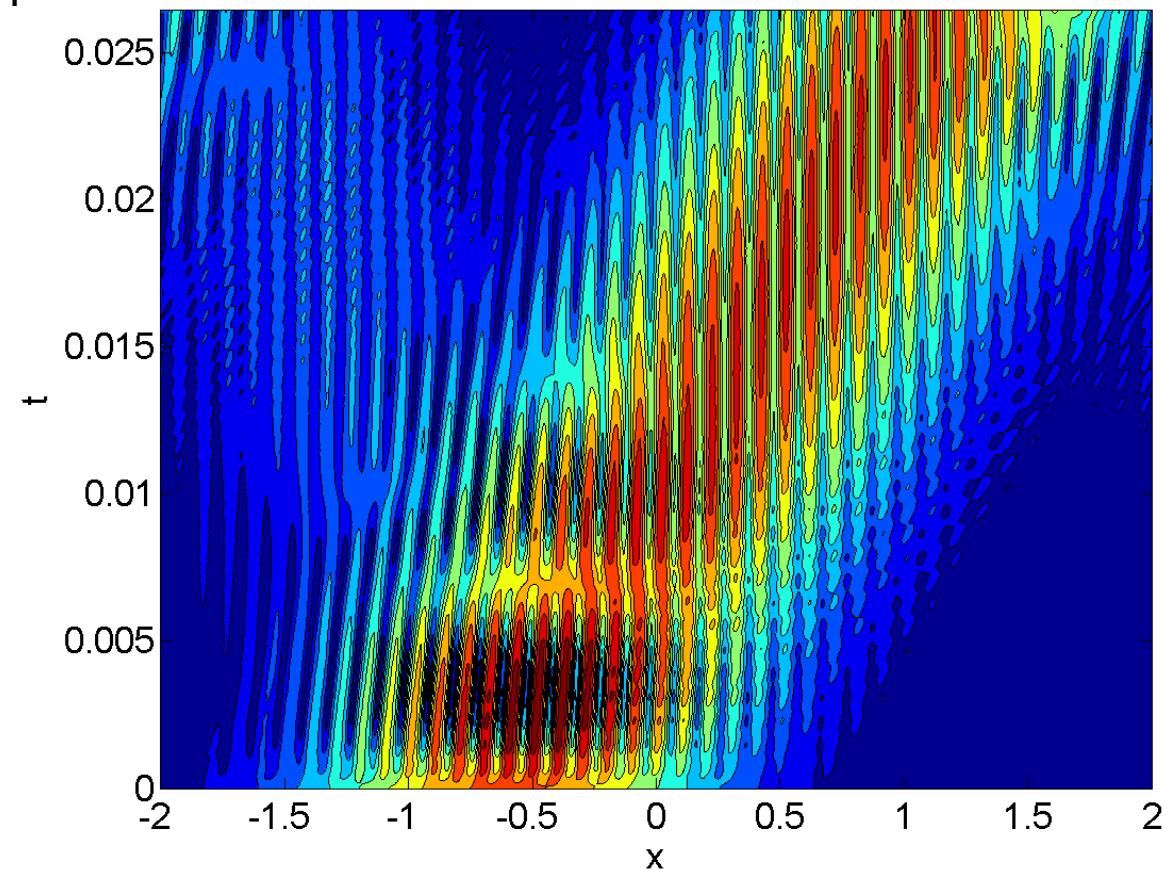
Paquet d'onde initial $n=24$



Position moyenne



Periodic $V_0=500$ $n_v=40$ $n=24$ $E=1.42e+003$



Physique Numérique

