# Physique Numérique – Semaine 13

## Rappel de la semaine 12

- **4.3 Schrödinger.**
  - Schéma semi-implicite de Crank-Nicolson
  - Particule libre, étalement du paquet d'onde
  - 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

## Plan de la semaine 13

- **4.2 Ondes:** schéma exact pour $\beta$=1
- **4.3  Schrödinger**
  - Propriété de conservation de l'énergie
  - Particule dans un potentiel V(x),
  - Barrière de potentiel effet tunnel
  - Oscillateur harmonique – états quasi-classiques
  - Détecteur de particule

- **Exercice 6: à rendre MERCREDI prochain.**

# Physique Numérique – Semaine 13

Evaluation approfondie des cours: du 19 mai au 8 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_SP25 et compléter le feedback

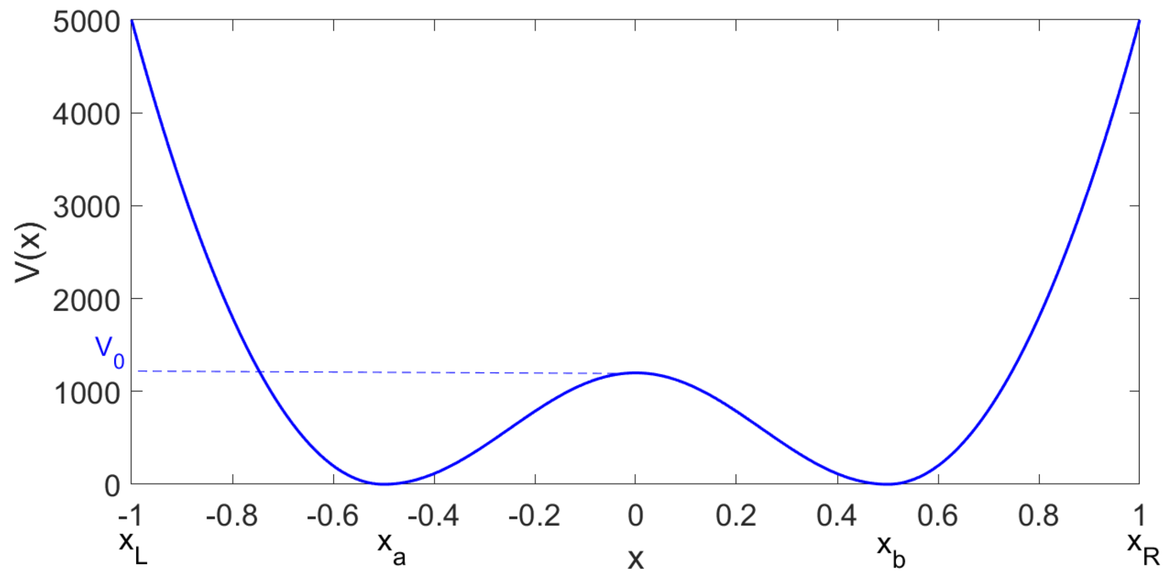
Retour sur les ondes, schéma explicite à 3 niveaux:
Le schéma est ***exact*** dans le cas $u^2$=const, $\boldsymbol{\beta^2=1}$

# Documentation

- Lecture pour la Semaine #13: Notes de cours
  - **Section 4.3. Schrödinger.**

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

# Exercice 6




- 2 sessions: 14, 21 mai
- Délai de rendu

    ~~mardi 27 mai~~ → mercredi 28 mai 2025

- 3e session, 28 mai : “rattrappage”

# Ondes

**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 :

$$f(x,t) = F(x - ut) + G(x + ut) \tag{48}$$

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

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

En substituant la solution exacte, on obtient :

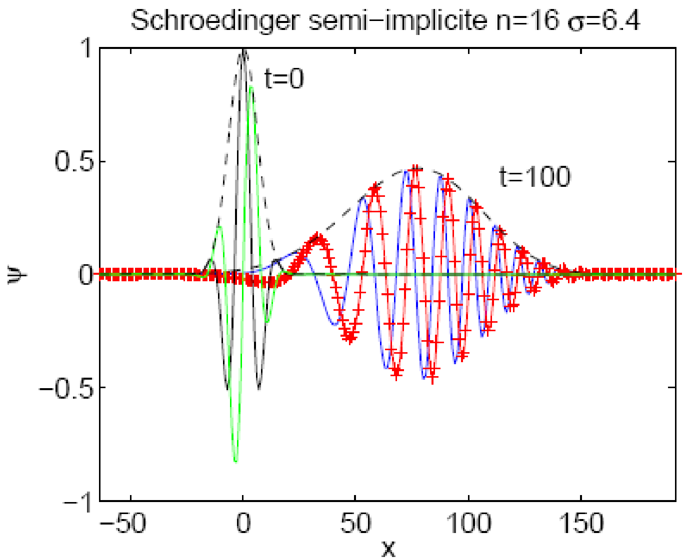
$$\begin{aligned} & F(x_i - ut_{n+1}) + G(x_i + ut_{n+1}) + F(x_i - ut_{n-1}) + G(x_i + ut_{n-1}) \\ = \quad & F(x_{i+1} - ut_n) + G(x_{i+1} + ut_n) + F(x_{i-1} - ut_n) + G(x_{i-1} + ut_n) \end{aligned} \tag{50}$$

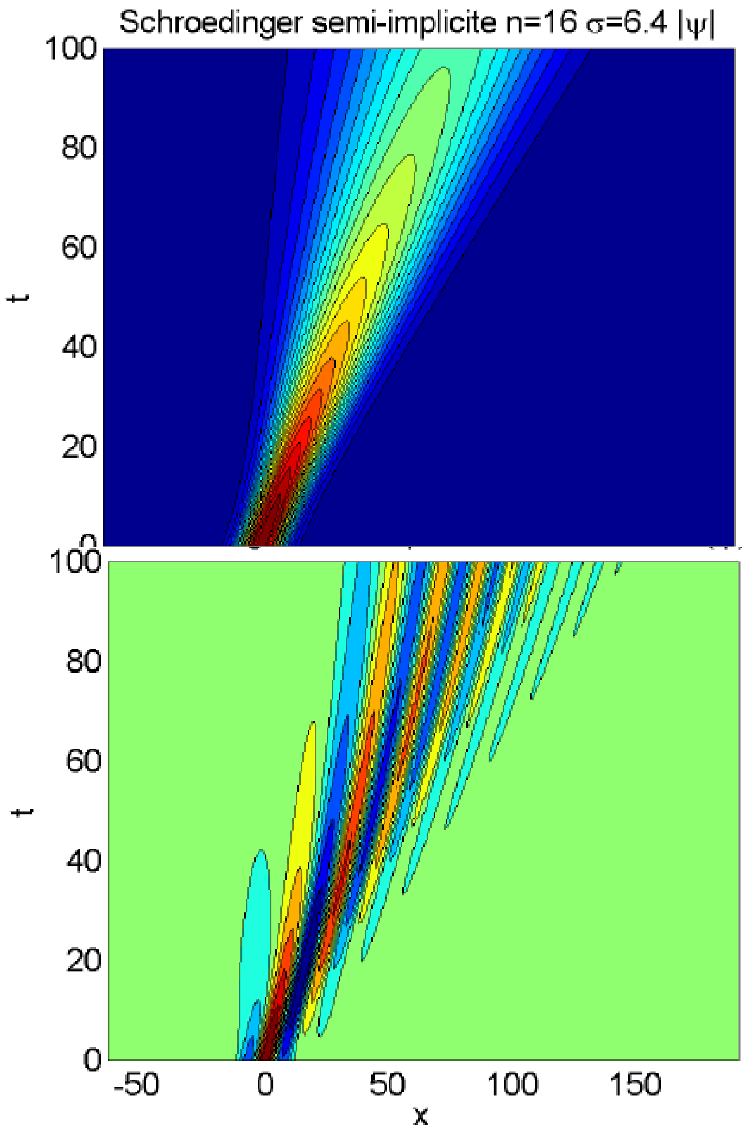
$$\begin{aligned} & F(x_i - ut_n - u\Delta t) + G(x_i + ut_n + u\Delta t) + F(x_i - ut_n + u\Delta t) + G(x_i + ut_n - u\Delta t) \\ = \quad & F(x_i - ut_n + \Delta x) + G(x_i + ut_n + \Delta x) + F(x_i - ut_n - \Delta x) + G(x_i + ut_n - \Delta x) \end{aligned} \tag{51}$$

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

# Exemples

## 4.3.2 Particule libre




Etalement du paquet d'onde.

Effet de la **dispersion**, pas de diffusion!

(Etalement n'est pas $\sim \sqrt{t}$ )

# Conservation de la probabilité: semi-implicite

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

**Preuve:**

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

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

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

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

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

# Conservation de la probabilité: semi-implicite et implicite

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

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

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!***

# Conservation de la probabilité: schéma explicite

**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 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**!

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

Preuve:

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

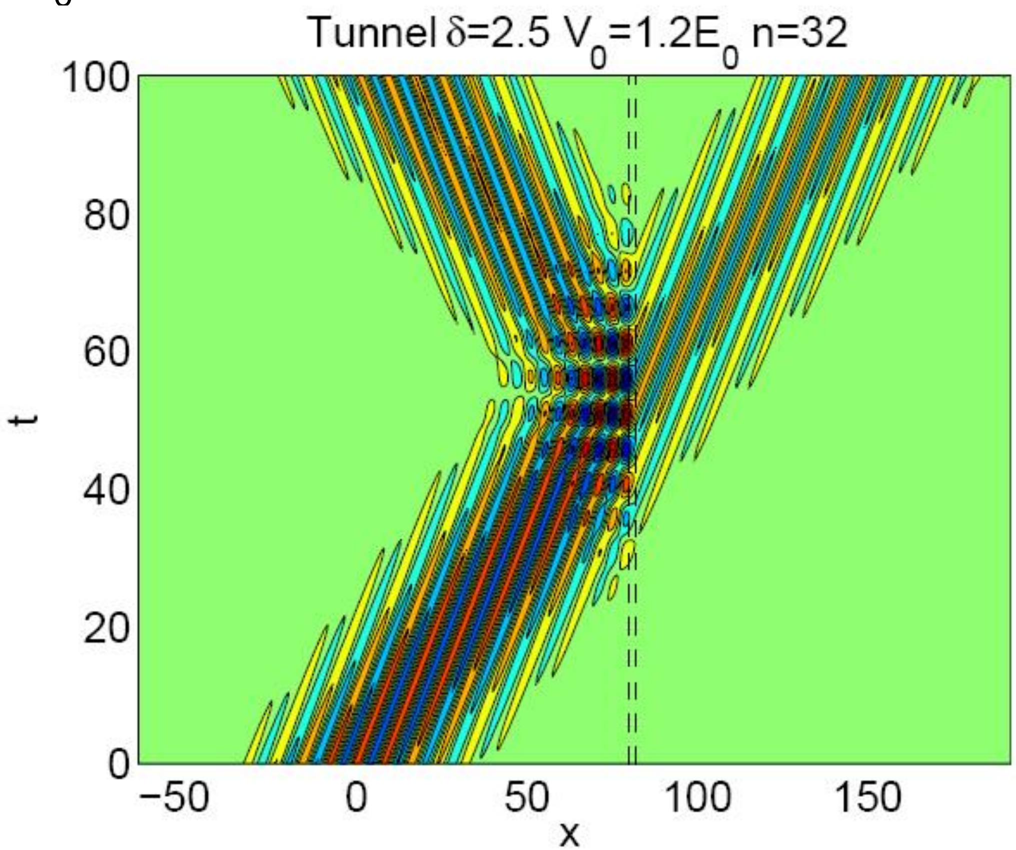
Eq. Schrödinger:

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

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

# 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 $V_0>E$

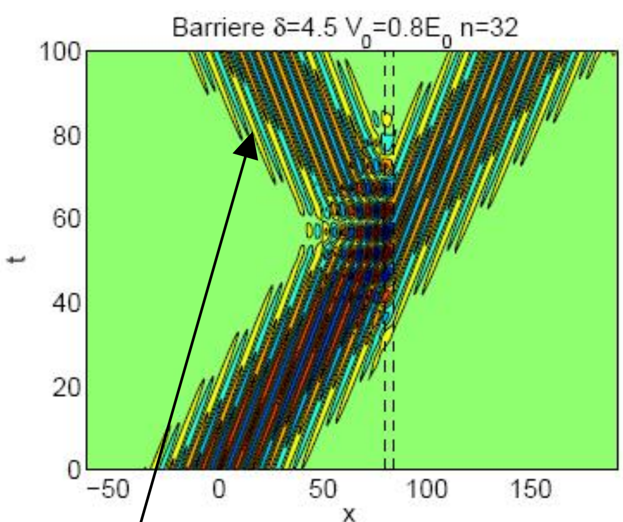
Voir aussi Ex6

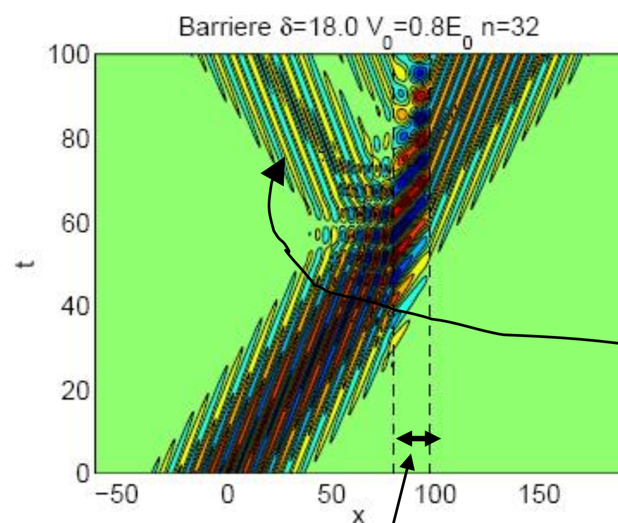
# Résonance avec l'épaisseur de la barrière

## 4.3.3 Barrière de potentiel: résonances

- Cas $V_0 < E$

Re(ψ(x,t))




Probabilité non nulle de réflexion !

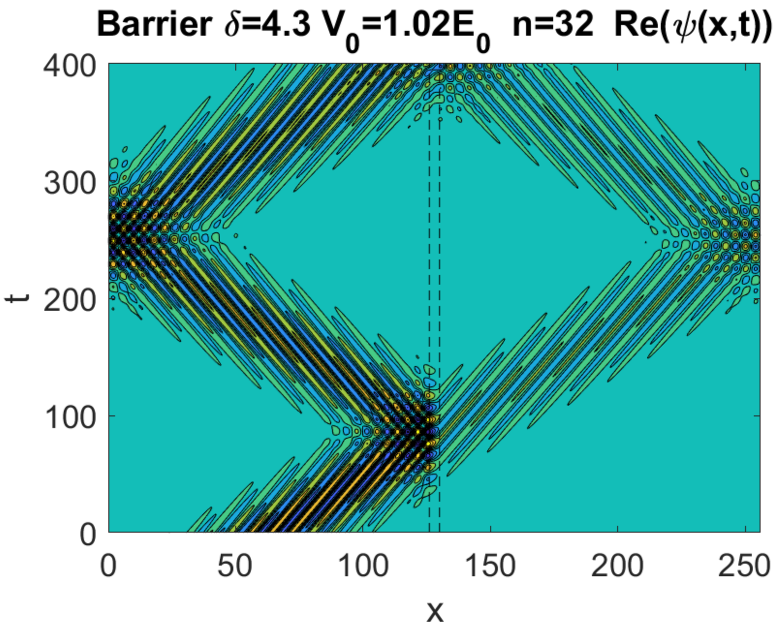
On augmente la largeur de la barrière, et la probabilité de réflexion *diminue*… (NB: elle est nulle pour $\delta = n\,\pi/k_t$ )

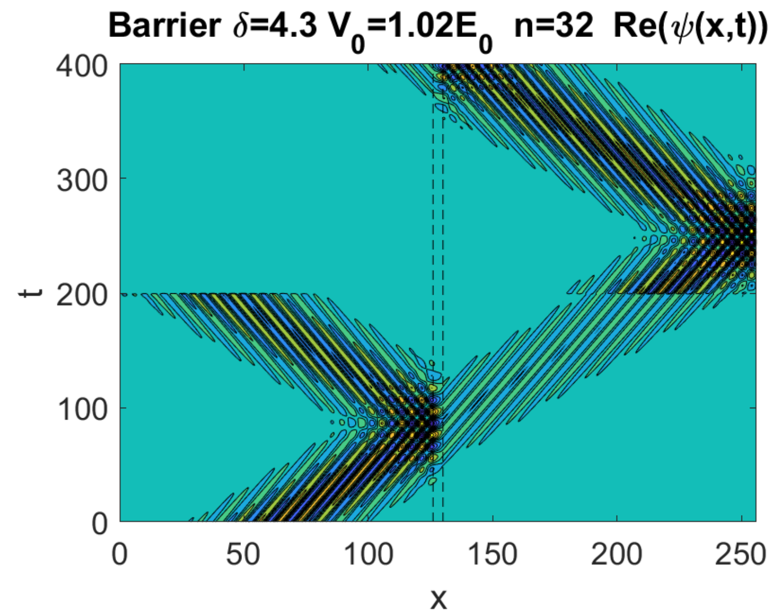
# Détection de particule

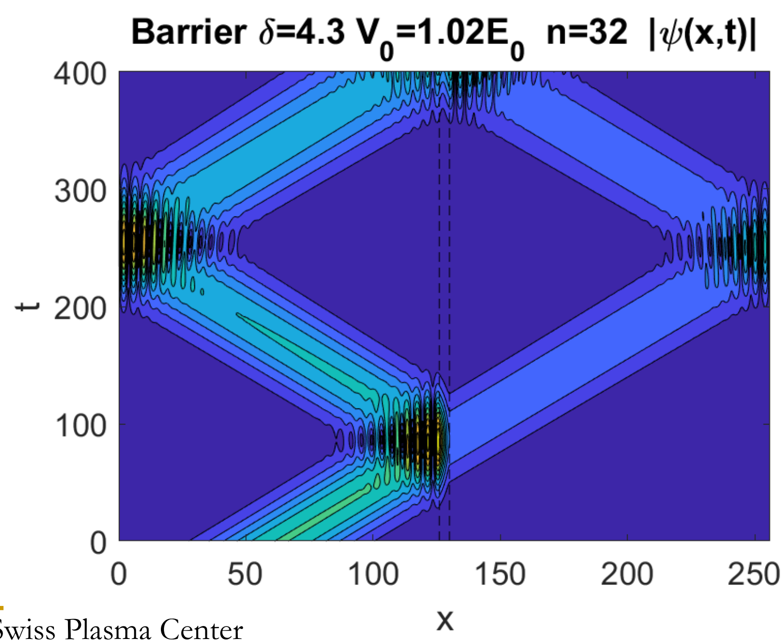
- Que se passe-t-il si le détecteur détecte une particule («tac»)?
- Que devient la fonction d'onde?
- La détection conserve-t-elle l'énergie?
- Que puis-je dire si le détecteur ne détecte pas la particule?
- Est-elle à gauche ou à droite?

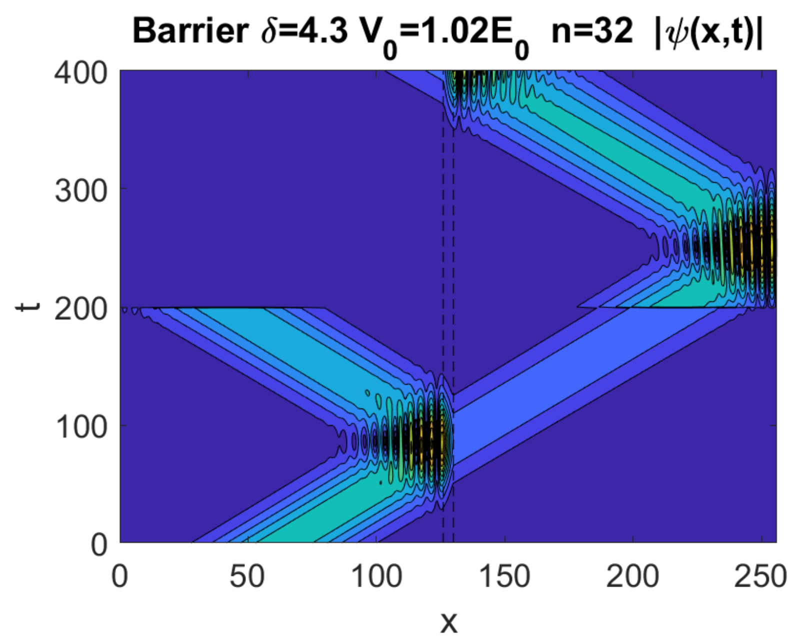
- ***Cela fait-il une différence sur l'évolution ultérieure ($t>t_{tac}$) de la particule si on l'a détectée en $t=t_{tac}$, par rapport au cas où on ne l'a pas détectée ?***
- Complément facultatif Ex.6

# Détection ou non …

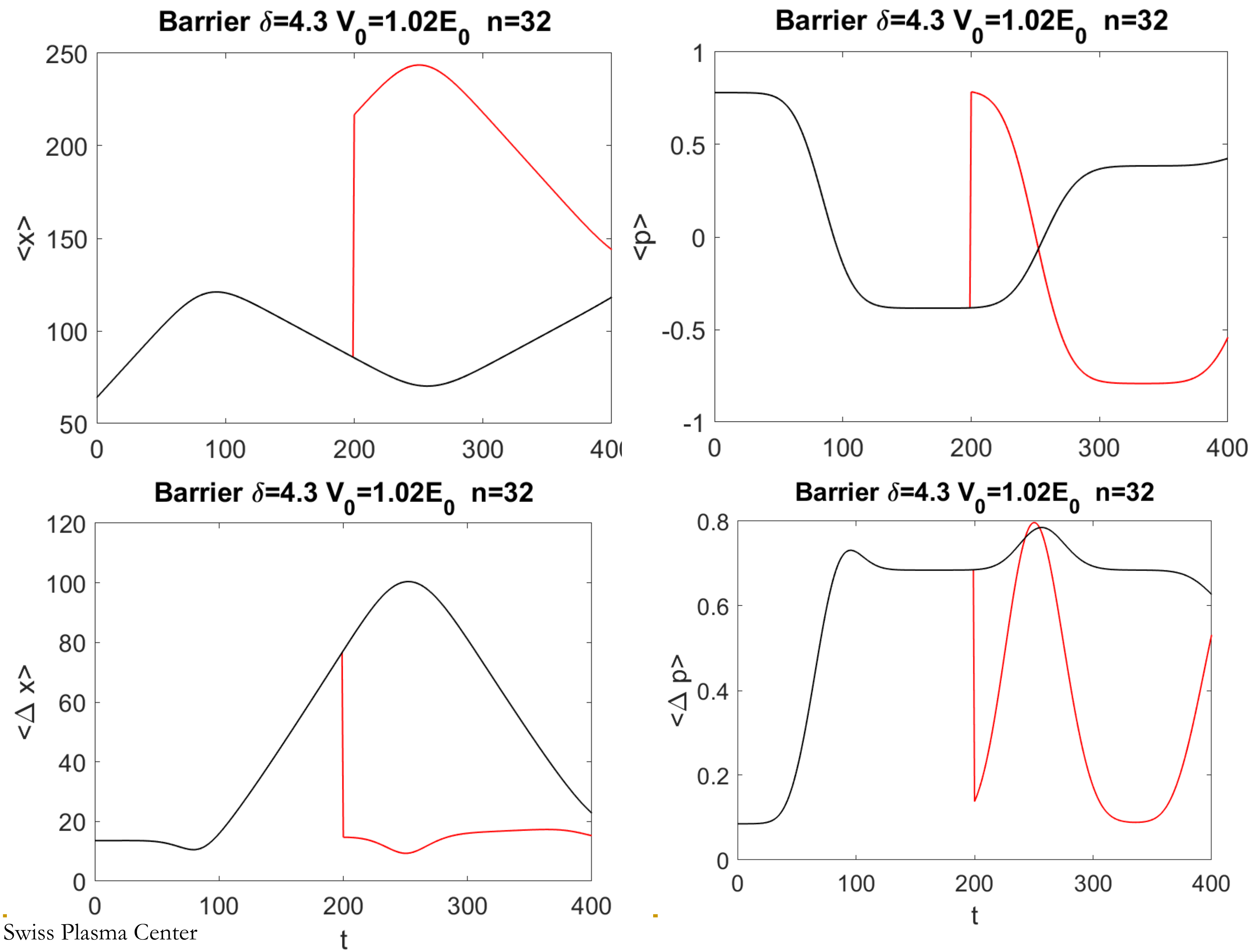


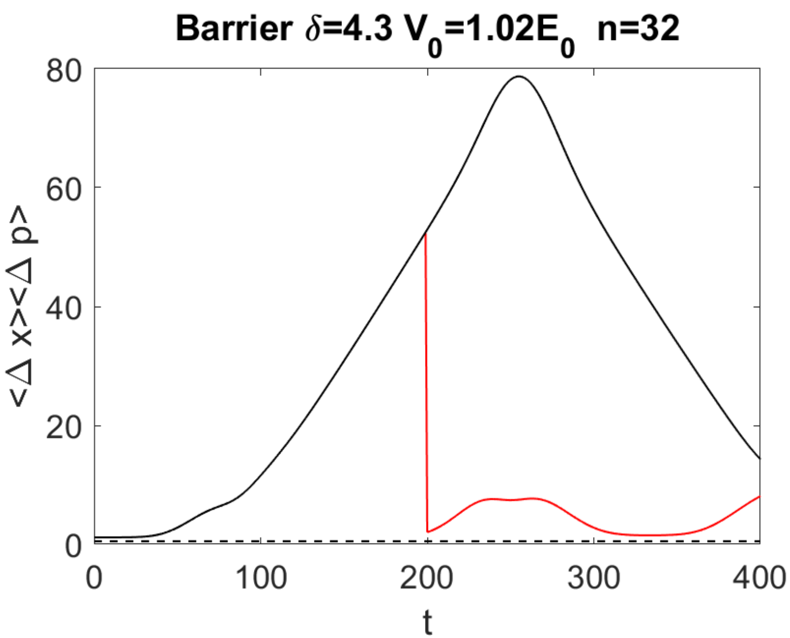



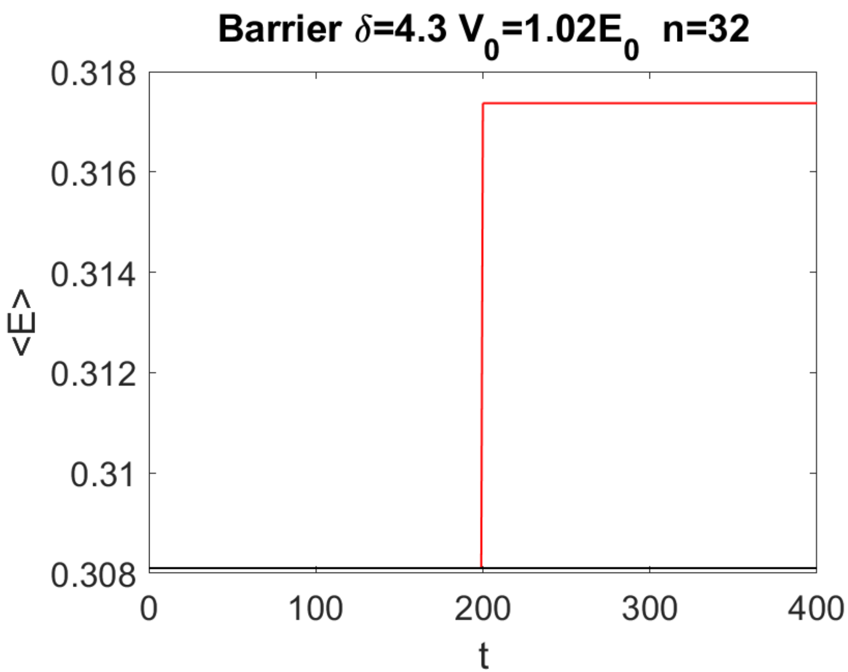



# Détection ou non …



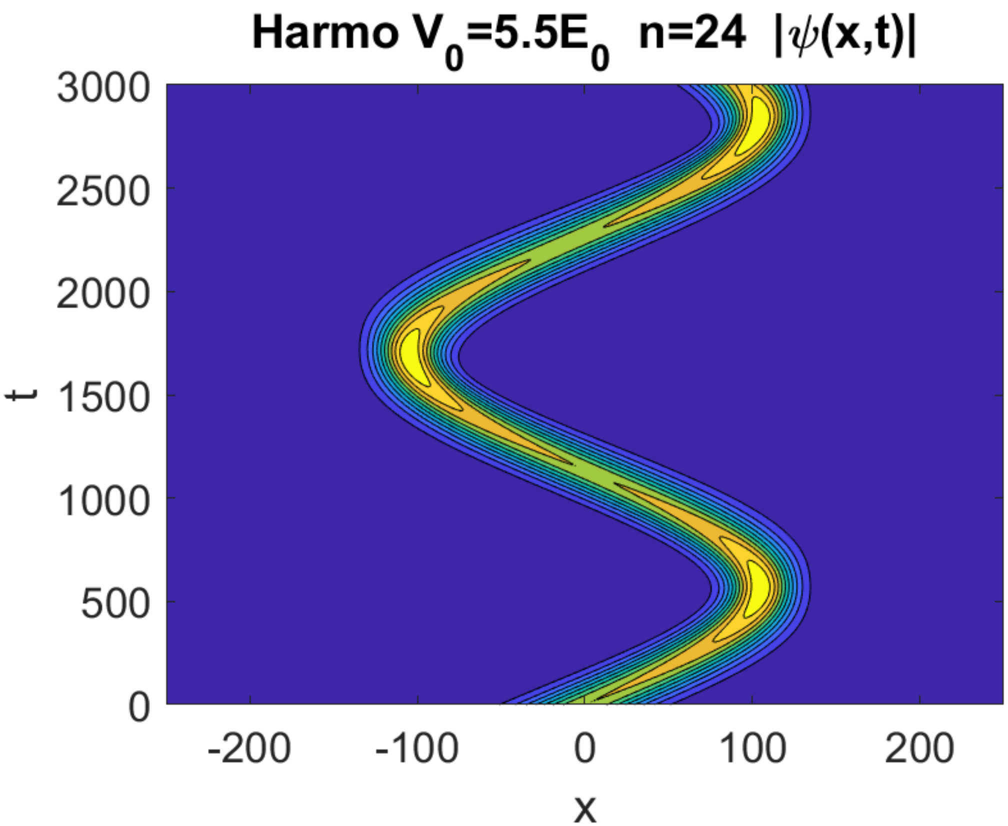
# Détection ou non …

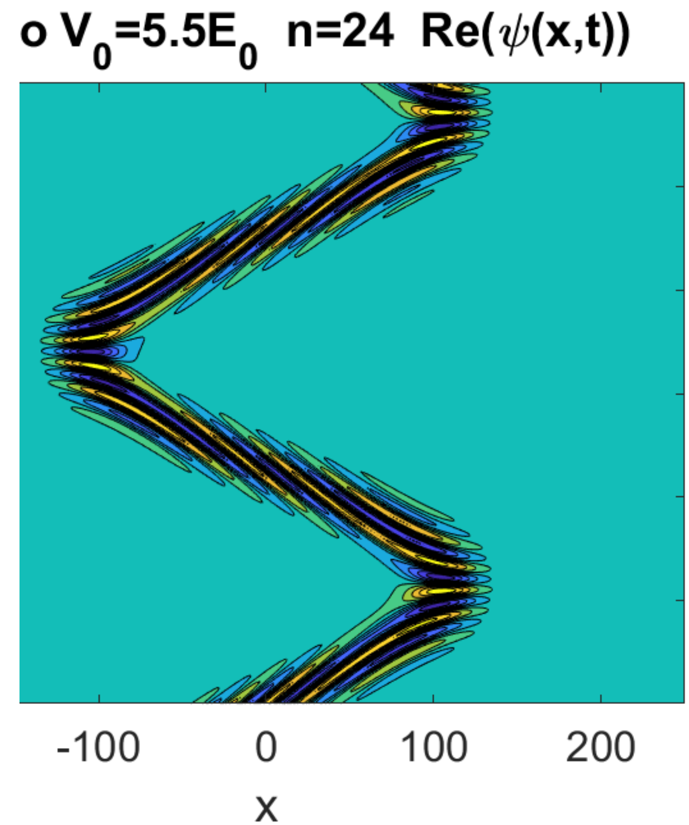


# Oscillateur harmonique

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




$x \in [-L/2 + L/2]$ $\quad E_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2m$

# Limite classique

- Thm Ehrenfest:
$$\frac{\mathrm{d} < p >}{\mathrm{d}t} = < -\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} >$$
$$\frac{\mathrm{d} < x >}{\mathrm{d}t} = < \frac{p}{m} > .$$

- ! En général
$$\left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle \neq \frac{dV(\langle x \rangle)}{dx}$$

- Particule classique #1 d'énergie
$$E_{class,1} = < H > = < p^2/2m + V(x) >$$

- Particule classique #2 de quantité de mvmt
$$p_{class,2} = < p >$$

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

# Limite classique

- Type equation here.Oscillateur harmonique: <x> et Δx

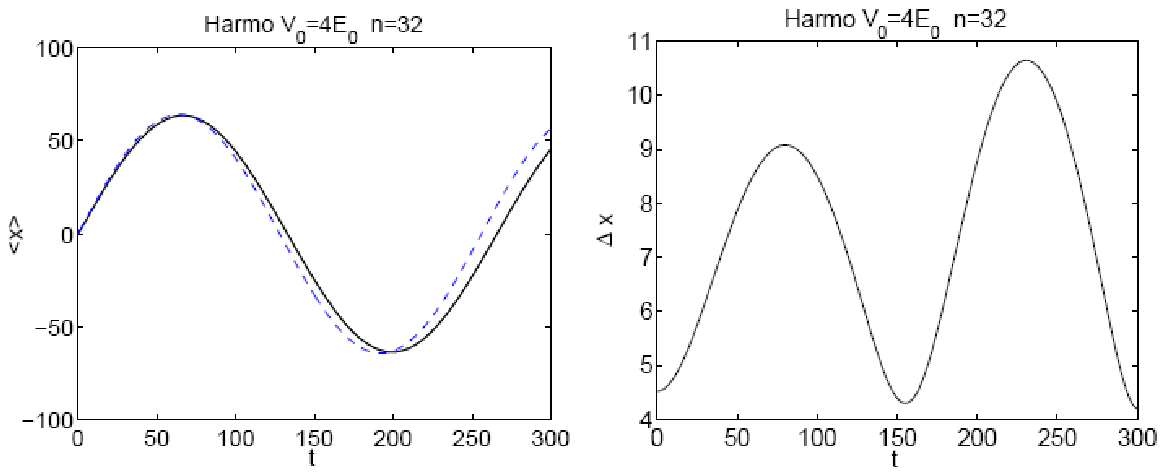



FIG. 4.22 – *Particule dans un potentiel harmonique (même simulation que la FIG. 4.21). A gauche : position moyenne $< x > (t)$, avec en traitillés la solution de la physique classique. A droite, incertitude sur la position $< \Delta x > (t)$.*

- Particule classique d'énergie $E_{class} = E_{\mathrm{quant}} =< H > = < p^2/2\,m + V(x) >$

$$p_{class} \neq p_{quant}$$

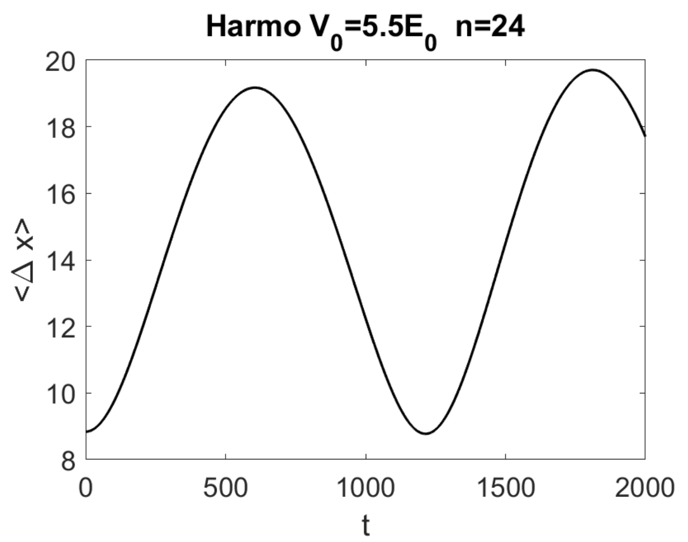
- Ex.6: particule classique de qté de mvmt

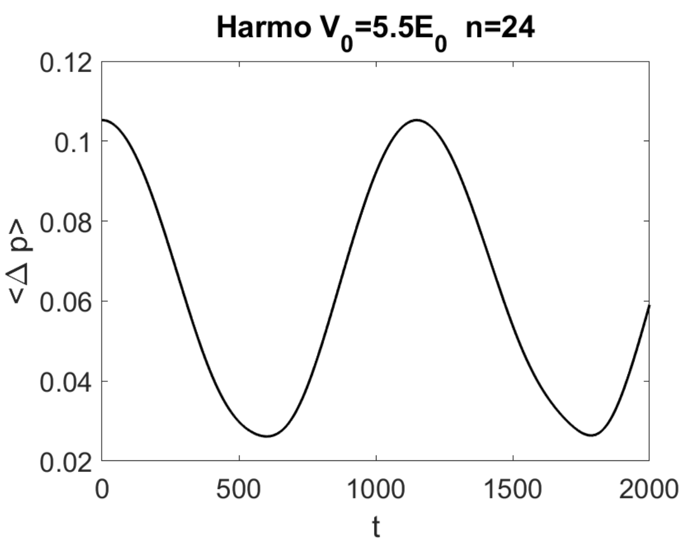
$$p_{class} = p_{quant} =< p >$$

$$E_{class} \neq E_{quant}$$

# Limite classique

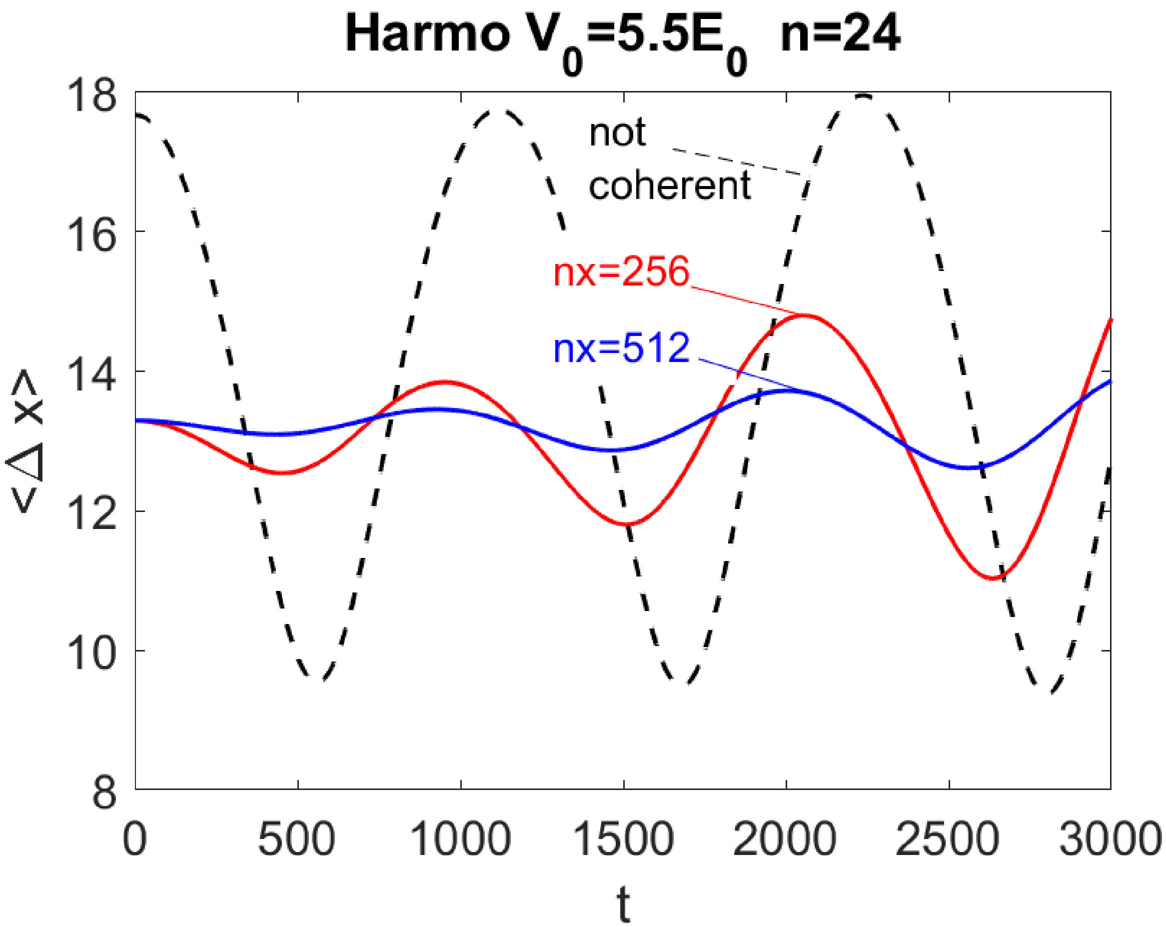
- Oscillateur harmonique:
- Incertitudes…



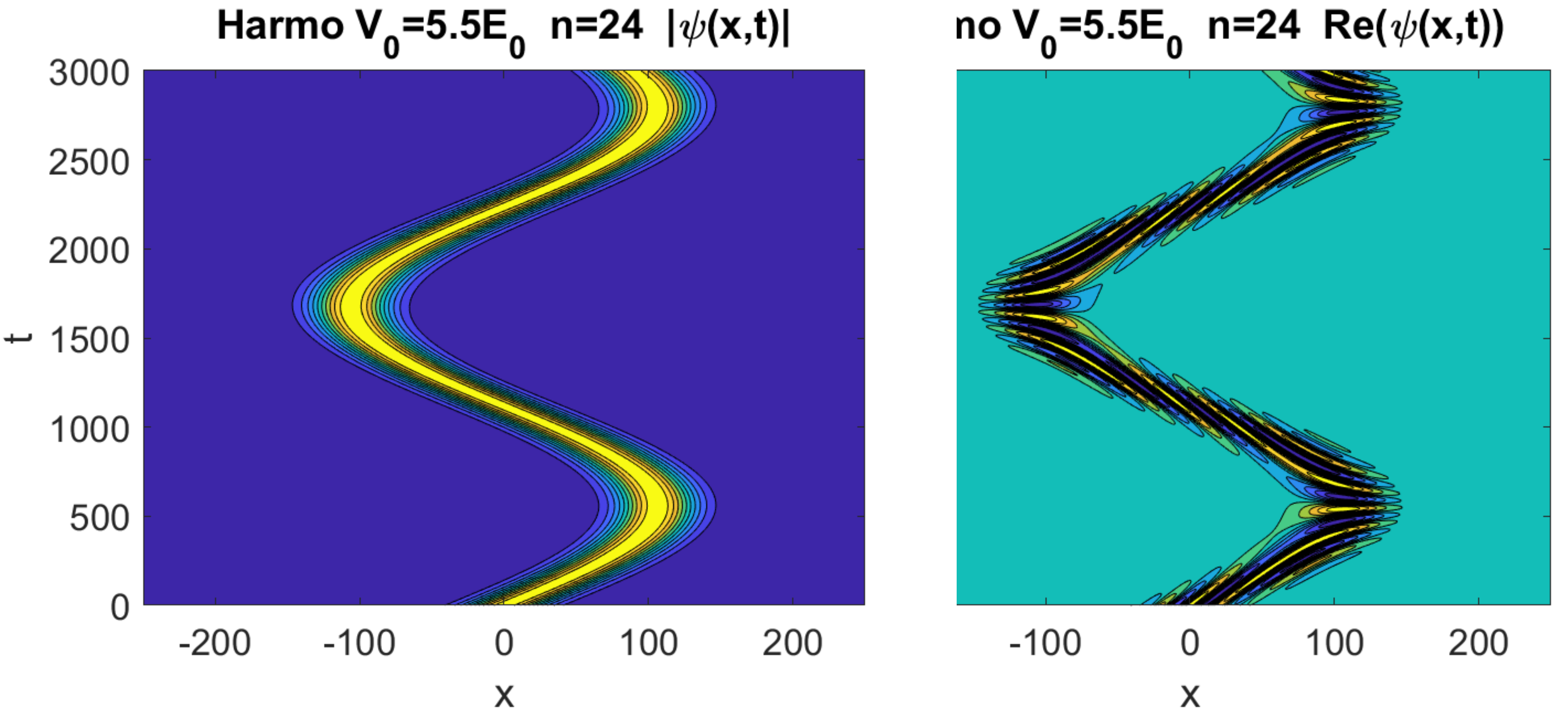




- $\Delta x$ augmente quand $\Delta p$ diminue et vice-versa… Peut-on trouver des particules quantiques avec $\Delta x$=const?

# Etats cohérents ou semi - classiques



# Etats cohérents ou quasi - classiques




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

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

# Schrödinger stationnaire

- 4.3.5 Etats d'énergie bien déterminée:

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

- Eq. de Schrödinger stationnaire

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

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

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

$$\boxed{\sum_j \mathrm{H}_{ij}\Psi_j = E\Psi_i}$$

**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. →** $\{\Psi_{(n)}, E_n\}$

# Principe de superposition

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

$$\boxed{\psi(\vec{x},t)=\sum_n c_n \Psi_n(\vec{x})\exp(-iE_n t/\hbar)}$$

- $|c_n|^2$: 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 $\{\Psi_n(x), \mathrm{E_n}\}$
  - → Matrice H : calcul des valeurs et vecteurs propres $\{\Psi_n(x_i), \mathrm{E_n}\}$
  - Calcul des $c_n = \int \Psi^*{}_n(\vec{x})\psi(\vec{x},0)dx$ → $c_n = \sum_j \Psi_n^*(\mathrm{x_i})\psi(x_i,0)$
    (projection sur les états propres)
  - La solution numérique est:

$$\psi(x_i,t_j) = \sum_n \mathrm{c_n}\Psi_n(x_i)\exp\left(-\frac{iE_n}{\hbar}t_j\right)$$

- Voir aussi http://falstad.com/qm1d/

# Puits

- Particule dans un puits de potentiel de profondeur finie

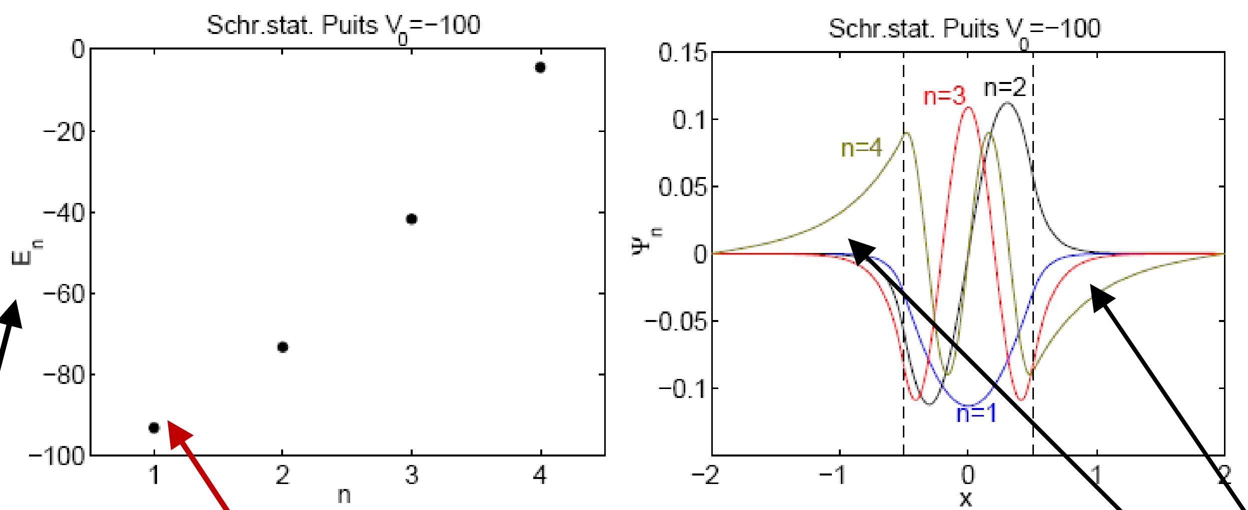



FIG. 4.25 – *Spectre des énergies propres (à gauche) et les 4 premiers états propres (à droite) pour une particule confinée dans un puits de potentiel de profondeur finie,* $V_0 = -100$, *entre* $x = -0.5$ *et* $x = +0.5$ *(lignes traitillées).*

Seul un nombre fini de valeurs négatives de l'énergie est possible: «spectre discret». Etat fondamental E>min(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

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