

Physique Numérique - Exercice 8

Mécanique Quantique : oscillateur harmonique, effet tunnel, principe d'incertitude.

Jonas Gruetter, Chloé Mondon
jonas.grutter@epfl.ch, chloe.mondon@epfl.ch

17 août 2021

Table des matières

1	Introduction	2
2	Programmation	2
2.1	Construction et écriture des matrices H , A et B et conditions aux limites . . .	2
2.2	Fonction d'onde initiale et probabilité de présence	4
2.3	Calcul de valeurs moyennes de la particule	4
2.4	Incertaince	6
3	Simulations	6
3.1	Test de l'algorithme dans le cas de l'oscillateur harmonique	6
3.1.1	Études de convergence	6
3.1.2	Conservation de l'énergie et de la probabilité totale	10
3.1.3	Principe d'incertitude de Heisenberg	10
3.2	Analyse du mouvement moyen de la particule et comparaison avec le cas classique	11
3.3	Effet tunnel	13
3.4	Détecteur de particules	16
4	Facultatif	18
4.1	Modification de la forme du potentiel	18
4.2	Trois détecteurs de particule	19
5	Conclusion	21
6	Annexe	22

1 Introduction

Le mouvement d'une particule de masse m soumise à un potentiel V unidimensionnel est étudié dans le cadre de la mécanique quantique. Le potentiel est donné par :

$$V(x) = \begin{cases} 4V_0x^2/(x_R - x_L)^2 & x \in [x_a, x_b] \\ V_L & x \in [x_L, x_a] \\ 0 & x \in [x_b, x_R] \end{cases} \quad (1)$$

Le domaine est tel que $x \in [x_L, x_R]$. Les paramètres x_L , x_R , x_a , x_b , V_0 et V_L sont tels que $x_L \leq x_a < x_b \leq x_R$, $V_0 \geq 0$ et $V_L \leq 0$. Les unités sont normalisées afin que $\hbar = 1$ et $m = 1$. C'est pourquoi elles ne sont pas spécifiées dans ce travail. Initialement, la particule est décrite par un paquet d'ondes d'enveloppe Gaussienne centrée en $x = x_0$, d'écart-type $\sigma_0 = \sigma_{norm}(x_R - x_L)$ et de nombre d'ondes central $k_0 = \frac{2\pi}{(x_R - x_L)}$ où x_0 , σ_{norm} et n sont des nombres donnés. Au niveau du cours, le but de cet exercice est de résoudre numériquement l'équation de Schrödinger éq.(2) à l'aide du schéma semi-implicite de Crank-Nicolson discrétisé avec des différences finies spatiales sur maillage régulier et d'étudier les propriétés de ce schéma. Au niveau physique, la description quantique du mouvement d'une particule et ses propriétés sont étudiées. Ce travail permet notamment d'illustrer numériquement l'effet tunnel, un phénomène purement quantique ayant permis de construire des microscopes pouvant atteindre des résolutions égales ou inférieures à la taille des atomes. Mise à part le fait qu'ils ont permis à leurs inventeurs d'obtenir le prix Nobel de Physique en 1986, les microscopes à effets tunnels ont révolutionné le domaine de la microscopie.

2 Programmation

2.1 Construction et écriture des matrices H , A et B et conditions aux limites

Une particule est décrite par une fonction d'onde $\psi(\vec{x}, t)$ à valeurs complexes. Le mouvement d'une particule de masse m soumis au potentiel $V(x)$ est décrit par l'équation de Schrödinger :

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

Les conditions aux limites sont $\psi(x_L, t) = \psi(x_R, t) = 0 \forall t$. L'hamiltonien du système est défini par :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \quad (3)$$

Le passage du problème en une dimension spatiale ($\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$), l'intégration temporelle de l'équation de Schrödinger, quelques passages mathématiques et la définition d'un maillage temporel avec des intervalles équidistants Δt permettent d'obtenir le schéma semi-implicite de Crank-Nicolson, qui décrit l'évolution du système :

$$(1 + \frac{i\Delta t}{2\hbar}H)\psi(x, t + \Delta t) = (1 - \frac{i\Delta t}{2\hbar}H)\psi(x, t) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (4)$$

On définit les opérateurs suivant :

$$A = (1 + \frac{i\Delta t}{2\hbar}H) , \quad B = (1 - \frac{i\Delta t}{2\hbar}H) \quad (5)$$

Une fois que le problème est discrétisé en x (avec un maillage uniforme avec des intervalles équidistants h) et en t et en négligeant les erreurs d'ordre Δt^2 , l'éq.(4) prend la forme :

$$A\psi^{i+1} = B\psi^i \quad (6)$$

où $\psi^i \in \mathbb{C}^{N_{inters}+1}$ est le vecteur de taille $N_{inters} + 1$ (N_{inters} est le nombre d'intervalles du maillage) qui représente la fonction d'onde $\psi(x, t)$ au temps $t_i = i\Delta t$. Donc $\psi_j^i = \psi(x_L + jh, i\Delta t)$, $j \in \{0, 1, \dots, N_{inters}\}$. La matrice H est construite de la manière suivante :

$$H = \begin{pmatrix} Hd_0 & Hc_0 & 0 & \dots & 0 \\ Ha_0 & Hd_1 & Hc_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & Ha_{N_{inters}-2} & Hd_{N_{inters}-1} & Hc_{N_{inters}-1} \\ 0 & \dots & 0 & Ha_{N_{inters}-1} & Hd_{N_{inters}} \end{pmatrix} \quad (7)$$

Compte tenu de les expressions du laplacien en une dimension centrée au point de maillage ($\frac{\partial^2 g}{\partial x^2}(x_i) \approx \frac{g(x_{i+1}) - 2g(x_i) + g(x_{i-1}))}{h^2}$), les éléments des diagonales principale, supérieure et inférieure sont donnés par ($\hbar = m = 1$) :

$$\begin{aligned} Hd_i &= \frac{1}{\Delta x^2} + V(x_i) , \quad i \in \{0, 1, \dots, N_{inters}\} \\ Hc_i &= -\frac{1}{2\Delta x^2} , \quad i \in \{0, 1, \dots, N_{inters}-1\} \\ Ha_i &= -\frac{1}{2\Delta x^2} , \quad i \in \{0, 1, \dots, N_{inters}-1\} \end{aligned} \quad (8)$$

Par définition des opérateurs A et B éq.(5), les matrices A et B sont définies de la manière suivante :

$$A = \mathbb{1} + \frac{i\Delta t}{2}H , \quad B = \mathbb{1} - \frac{i\Delta t}{2}H \quad (9)$$

où H est définie par l'éq.(7) et $\mathbb{1}$ est la matrice identité. Il est important de noter que, comme la matrice H , les matrices A et B sont tri-diagonales. Leur diagonales sont, dans

l'implémentation, stockées sous formes de vecteurs. Les vecteurs correspondant aux diagonales principales, supérieures et inférieures des matrices A et B sont respectivement dénotés par Zd (taille $N_{inters} + 1$), Zc (taille N_{inters}) et Za (taille N_{inters}) où $Z = A, B$. Afin de satisfaire les conditions aux bords $\psi(x_L, t) = \psi(x_R, t) = 0 \forall t$ et de faire en sorte que les matrices soient hermitiennes, on a $Ad_0 = Ad_{N_{inters}} = 1$, $Bd_0 = Bd_{N_{inters}} = 0$, $cA_0 = cA_{N_{inters}-1} = aA_0 = aA_{N_{inters}-1} = 0$, $cB_0 = cB_{N_{inters}-1} = aB_0 = aB_{N_{inters}-1} = 0$.

2.2 Fonction d'onde initiale et probabilité de présence

La particule est initialement décrite par un paquet d'onde d'enveloppe Gaussienne :

$$\psi(x, 0) = C \cdot \exp(ik_0x) \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_0^2}\right) \quad (10)$$

où x_0 , σ_0 , k_0 sont définies en section 1 et C une constante de normalisation telle que $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = 1$. Afin de respecter les conditions aux bords, on a $\psi_0^0 = \psi_{N_{inters}}^0 = 0$. Dans le code, la fonction d'onde est normalisée à l'aide d'une fonction qui calcul la norme du vecteur ψ^0 et qui divise chaque composante par la norme.

Afin de calculer les probabilités qu'on trouve le potentiel à gauche $P_{x_L < x < x_a}(t)$, dans le creux $P_{x_a < x < x_b}(t)$, et à droite $P_{x_b < x < x_R}(t)$ de la barrière de potentiel, une fonction qui permet de calculer la probabilité de trouver la particule entre les points de maillage n_L et n_R au temps $t = i\Delta t$ est implémentée :

$$P_{n_L \cdot h < x < n_R \cdot h}(t) = \int_{n_L \cdot h}^{n_R \cdot h} |\psi(x, t)|^2 dx \simeq \sum_{j=n_L}^{n_R-1} \frac{1}{2} (|\psi_j^i|^2 + |\psi_{j+1}^i|^2) \cdot h \quad (11)$$

La règle des trapèzes a été employée afin de calculer l'intégrale numériquement.

2.3 Calcul de valeurs moyennes de la particule

Les valeurs moyenne sont calculées en un temps $t = i \cdot \Delta t$. Toutes les approximations numériques des intégrales (dénotées par \simeq) se font à l'aide de la méthode des trapèzes.

Énergie de la particule

L'énergie de la particule est donnée par la moyenne de l'Hamiltonien :

$$E(t) = \langle H \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x, t) H(x) \psi(x, t) dx \simeq \sum_{j=0}^{N_{inters}-1} \frac{1}{2} ((\psi_{j+1}^i)^* H \psi_{j+1}^i + (\psi_j^i)^* H \psi_j^i) \cdot h \quad (12)$$

Position moyenne

La position moyenne de la particule est donnée par :

$$\langle x \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx \simeq \sum_{j=0}^{N_{inters}-1} \frac{1}{2} ((\psi_{j+1}^i)^* x_{j+1} \psi_{j+1}^i + (\psi_j^i)^* x_j \psi_j^i) \cdot h \quad (13)$$

x^2 moyen

Le carré de la position moyenne de la particule est donnée par :

$$\langle x^2 \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x, t) x^2 \psi(x, t) dx \simeq \sum_{j=0}^{N_{inters}-1} \frac{1}{2} ((\psi_{j+1}^i)^* x_{j+1}^2 \psi_{j+1}^i + (\psi_j^i)^* x_j^2 \psi_j^i) \cdot h \quad (14)$$

Quantité de mouvement moyenne

La quantité de mouvement moyenne d'une particule en mécanique classique est donnée par :

$$\langle p \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right) dx \quad (15)$$

L'implémentation numérique se fait en deux étapes. Soit λ^i le vecteur dont les éléments sont les dérivées premières spatiales des élément de ψ^i . Tout d'abord, la méthode des différences finies centrée est appliquée pour évaluer $\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x}$ dans les points intérieurs du domaine :

$$\lambda_j^i = \frac{\partial \psi_j^i}{\partial x} \simeq \frac{\psi_{j+1}^i - \psi_{j-1}^i}{2h}, \quad j \in \{1, \dots, N_{inters} - 1\} \quad (16)$$

La méthode des différences finies forward est employée pour évaluer $\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x}$ au bord gauche et backward au bord droit du domaine :

$$\lambda_0^i = \frac{\partial \psi_0^i}{\partial x} \simeq \frac{\psi_1^i - \psi_0^i}{h}, \quad \lambda_{N_{inters}}^i = \frac{\partial \psi_{N_{inters}}^i}{\partial x} \simeq \frac{\psi_{N_{inters}}^i - \psi_{N_{inters}-1}^i}{h} \quad (17)$$

L'implémentation numérique de l'éq.(15) est donc donnée par ($\hbar = 1$) :

$$\langle p \rangle(t) \simeq -i \sum_{j=0}^{N_{inters}-1} \frac{1}{2} ((\psi_{j+1}^i)^* \lambda_{j+1}^i + (\psi_j^i)^* \lambda_j^i) \cdot h \quad (18)$$

p^2 moyen

Le carré de la quantité de mouvement moyen est donné par :

$$\langle p^2 \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x, t) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \right) dx \quad (19)$$

À nouveau, l'implémentation numérique se fait en deux étapes. Soit Λ^i le vecteur dont les éléments sont les dérivées deuxièmes (spatiales) des élément de ψ^i . Pour les points à l'intérieur du domaine, on a :

$$\Lambda_j^i = \frac{\partial^2 \psi_j^i}{\partial x^2} \simeq \frac{\psi_{j+1}^i - 2\psi_j^i + \psi_{j-1}^i}{h^2}, \quad j \in \{1, 2, \dots, N_{inters} - 1\} \quad (20)$$

Concernant les points aux bords gauches et droites du domaine, on a :

$$\Lambda_0^i = \Lambda_{N_{inters}}^i = 0 \quad (21)$$

Donc :

$$\langle p^2 \rangle(t) \simeq \sum_{j=0}^{N_{inters}-1} -\frac{1}{2}((\psi_{j+1}^i)^* \Lambda_{j+1}^i + (\psi_j^i)^* \Lambda_j^i) \cdot h \quad (22)$$

2.4 Incertitude

Le calcul de l'incertitude sur la position de la particule au temps t ($\langle \Delta x \rangle(t)$) est donné par :

$$\langle \Delta x \rangle(t) = \sqrt{\langle x^2 \rangle(t) - \langle x \rangle^2(t)} \quad (23)$$

où $\langle x \rangle(t)$ et $\langle x^2 \rangle(t)$ sont définis par les éq.(13) et éq.(14). L'incertitude sur la quantité de mouvement au temps t ($\langle \Delta p \rangle(t)$) est calculée de la même manière :

$$\langle \Delta p \rangle(t) = \sqrt{\langle p^2 \rangle(t) - \langle p \rangle^2(t)} \quad (24)$$

où $\langle p^2 \rangle(t)$ et $\langle p \rangle(t)$ sont définis par les éq.(18) et éq.(22).

3 Simulations

3.1 Test de l'algorithme dans le cas de l'oscillateur harmonique

Le but de cette sous-section est de tester l'algorithme dans le cas de l'oscillateur harmonique. Les paramètres utilisés sont recensés dans le Tab.1.

$x_L = x_a$	$x_R = x_b$	V_0	x_0	σ_{norm}	n	t_{fin}
-250	250	0.25	0	0.05	20	3000

TABLE 1 – Paramètres utilisés dans le cas de l'oscillateur harmonique

Sous ces conditions, le potentiel est donné par :

$$V(x) = 4V_0 x^2 / (x_R - x_L)^2, \quad x \in [x_L, x_R] \quad (25)$$

3.1.1 Études de convergence

Des études de convergence sont effectuées sur la position moyenne $\langle x \rangle(t)$, la quantité de mouvement moyenne $\langle p \rangle(t)$, l'incertitude $\langle \Delta x \rangle(t)$ et l'incertitude $\langle \Delta p \rangle(t)$ au temps $t = t_{fin}$.

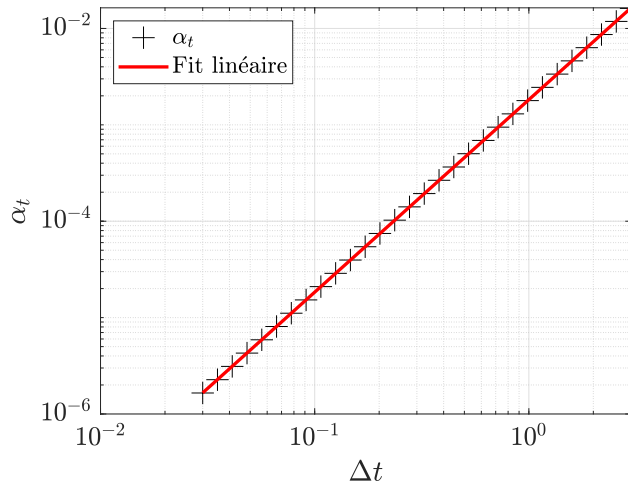
D'abord la convergence des quantités est étudiée en faisant varier Δt . Ensuite les études sont effectuées à nouveau en faisant varier N_{inters} , le nombre d'intervalle du maillage. Les études de convergences en N_{inters} sont effectuées en faisant varier le paramètre $h = \frac{1}{N_{inters}}$ (N_{inters} entier strictement positif) afin de pouvoir représenter l'intervalle de distance pour la convergence spatiale (car on utilise l'intervalle de temps pour la convergence temporelle). Pour la convergence temporelle, on fixe $N_{inters} = 1024$ et pour la convergence spatiale, on utilise $\Delta t = 0.5$. Dans les deux cas, les solutions analytiques pour les quantités étudiées à $t = t_{fin}$ ne sont pas connues. On ne peut donc pas calculer directement une erreur et la représenter en fonction du pas de discrétisation comme désirée. Il a été observé que, en représentant les quantités désirées en fonction de $(\Delta t)^2$ et h^2 sur une échelle linéaire-linéaire, dans la limite des petits Δt (et h), les points du graphe forment une droite. On peut donc s'attendre que le schéma converge à l'ordre 2 temporellement et spatialement. De plus, en supposant que le comportement des points en fonction de $(\Delta t)^2$ (et h^2) est identique lorsque Δt (et h) tend vers 0, il est alors possible d'extrapoler les données dans la limite où le pas de discrétisation tend vers 0 et de trouver la valeur convergée de la grandeur désirée. Ce processus a été effectué pour toutes les grandeurs en fonction de Δt et de h . Les figures utiles à ce processus ne sont pas montrées dans ce rapport afin de rester concis. Les erreurs sont définies de la manière suivante ($i = t, h$ pour l'erreur trouvée entre la quantité et sa valeur convergée en Δt ou en h respectivement) :

- α_i est l'erreur relative entre $\langle x \rangle(t_{fin})$ et sa valeur convergée
- β_i est l'erreur relative entre $\langle p \rangle(t_{fin})$ et sa valeur convergée
- γ_i est l'erreur relative entre $\langle \Delta x \rangle(t_{fin})$ et sa valeur convergée
- δ_i est l'erreur relative entre $\langle \Delta p \rangle(t_{fin})$ et sa valeur convergée

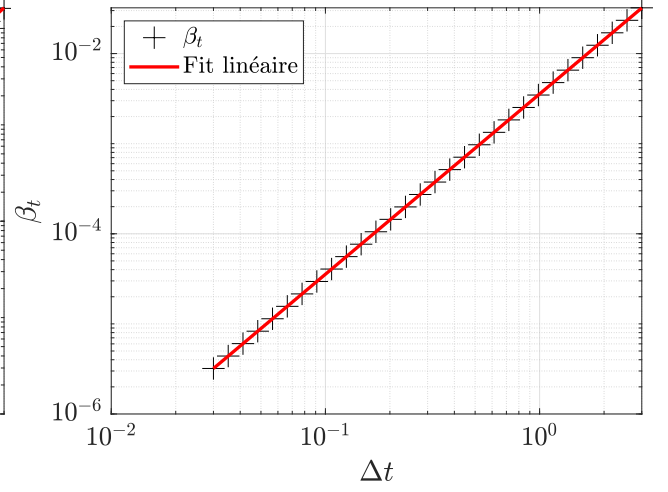
Pour chaque quantité, cette erreur est représentée sur un diagramme log-log.

Pour la convergence en Δt , ceci est réalisé par les Fig. 1a, 1b, 1c et 1d. Grâce au fit linéaire effectué chaque figure, il est possible de vérifier que toutes les pentes sont de 2. Le schéma semi-implicite de Crank-Nicolson converge donc à l'ordre 2 temporellement. Ceci est le résultat attendu car, analytiquement, le schéma converge à l'ordre 2 temporellement (éq.(4)).

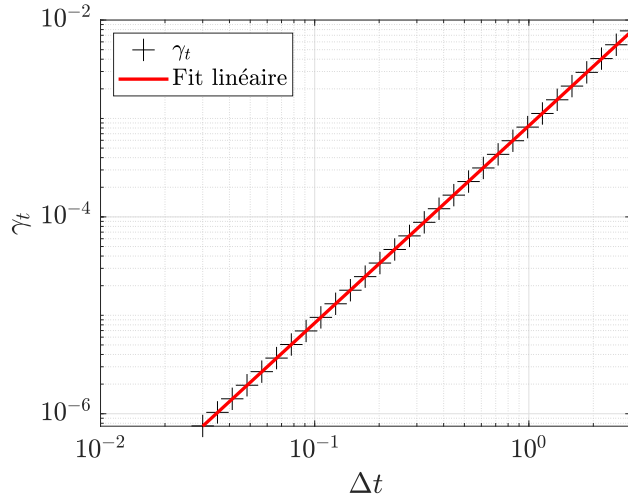
Pour la convergence spatiale, la représentation de l'erreur en fonction de h sur un diagramme log-log est réalisé par les Fig. 2a, 2b, 2c et 2d. Grâce au fit linéaire effectué chaque figure, il est possible de vérifier que toutes les pentes sont de 2. Le schéma semi-implicite de Crank-Nicolson converge donc à l'ordre 2 spatialement. Ceci est le résultat attendu car, le schéma semi-implicite de Crank-Nicolson utilise des différences finies centrées d'ordre 2. Par le cours, un schéma qui utilise des différences finies centrées d'ordre 2 converge à l'ordre 2 [1](Annexe A).



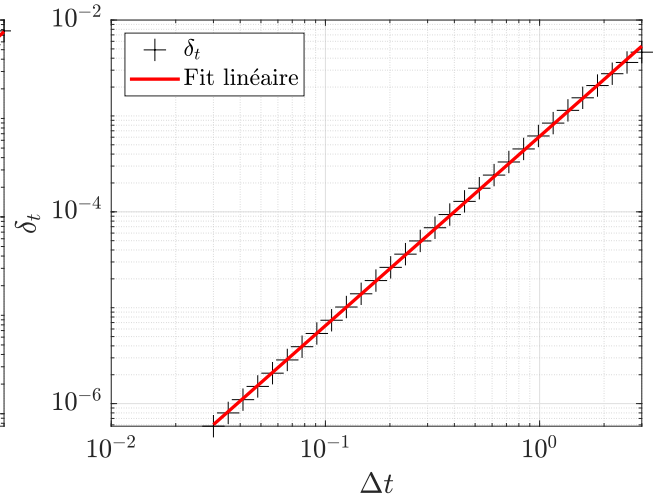
(a) Fit linéaire : $y = 2.0 \cdot x - 2.7$



(b) Fit linéaire : $y = 2.0 \cdot x - 2.4$

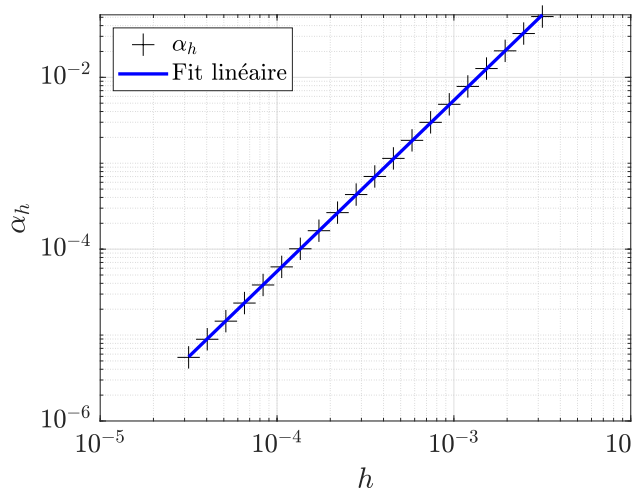


(c) Fit linéaire : $y = 2.0 \cdot x - 3.1$

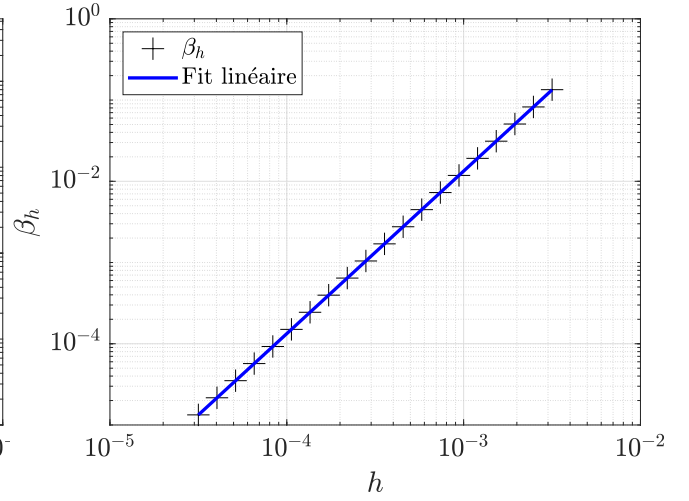


(d) Fit linéaire : $y = 2.0 \cdot x - 3.2$

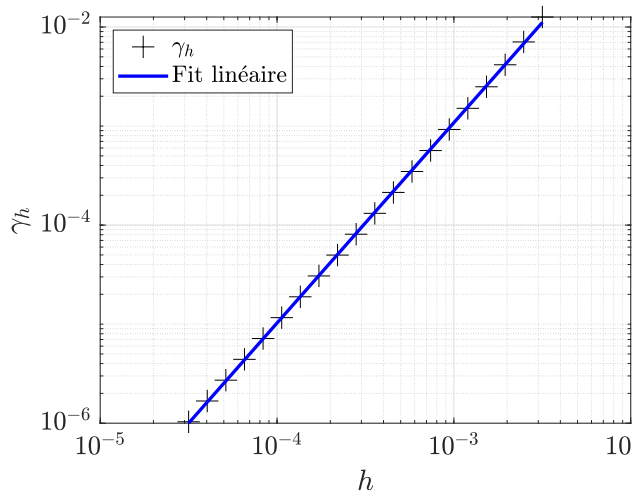
FIGURE 1 – Études de convergence sur la position moyenne $\langle x \rangle(t_{fin})$ (Fig.1a), sur la quantité de mouvement moyenne $\langle p \rangle(t_{fin})$ (Fig.1b), sur l'incertitude de la position $\langle \Delta x \rangle(t_{fin})$ (Fig.1c), sur l'incertitude de la quantité de mouvement $\langle \Delta p \rangle(t_{fin})$ (Fig.1d) en variant Δt .



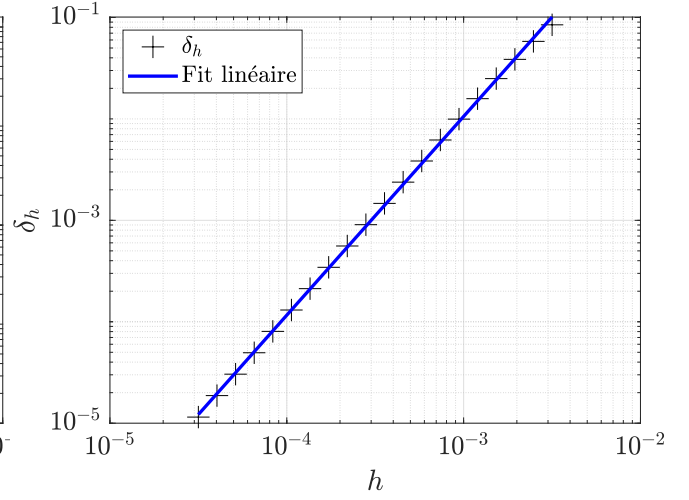
(a) Fit linéaire : $y = 2.0 \cdot x + 3.7$



(b) Fit linéaire : $y = 2.0 \cdot x + 4.1$



(c) Fit linéaire : $y = 2.0 \cdot x + 3.1$



(d) Fit linéaire : $y = 2.0 \cdot x + 4.1$

FIGURE 2 – Études de convergence sur la position moyenne $\langle x \rangle(t_{fin})$ (Fig.2a), sur la quantité de mouvement moyenne $\langle p \rangle(t_{fin})$ (Fig.2b), sur l'incertitude de la position $\langle \Delta x \rangle(t_{fin})$ (Fig.2c), sur l'incertitude de la quantité de mouvement $\langle \Delta p \rangle(t_{fin})$ (Fig.2d) en variant h .

3.1.2 Conservation de l'énergie et de la probabilité totale

Par le cours, on sait que le schéma semi-implicite de Crank-Nicolson conserve la probabilité totale et l'énergie moyenne $E(t)$ [1] (Section 4.3.1). Afin de vérifier cela numériquement, les grandeurs $\eta = 1 - P_{x_L < x < x_a}(t) - P_{x_a < x < x_b}(t) - P_{x_b < x < x_R}(t)$ et $\Omega = \frac{E(t) - E(0)}{E(0)}$ sont représentés en fonction du temps. Ceci est réalisé par les Fig.3a et Fig.3b respectivement. Ces figures permettent de voir que, mis à part les erreurs numériques (d'ordre 10^{-14} !), ces quantités sont conservées. La probabilité totale est donc bien égale à 1 et l'énergie reste constante au cours de la simulation. Dans cette partie, les simulations sont effectuées avec $\Delta t = 0.5$ et $N_{inters} = 1024$.

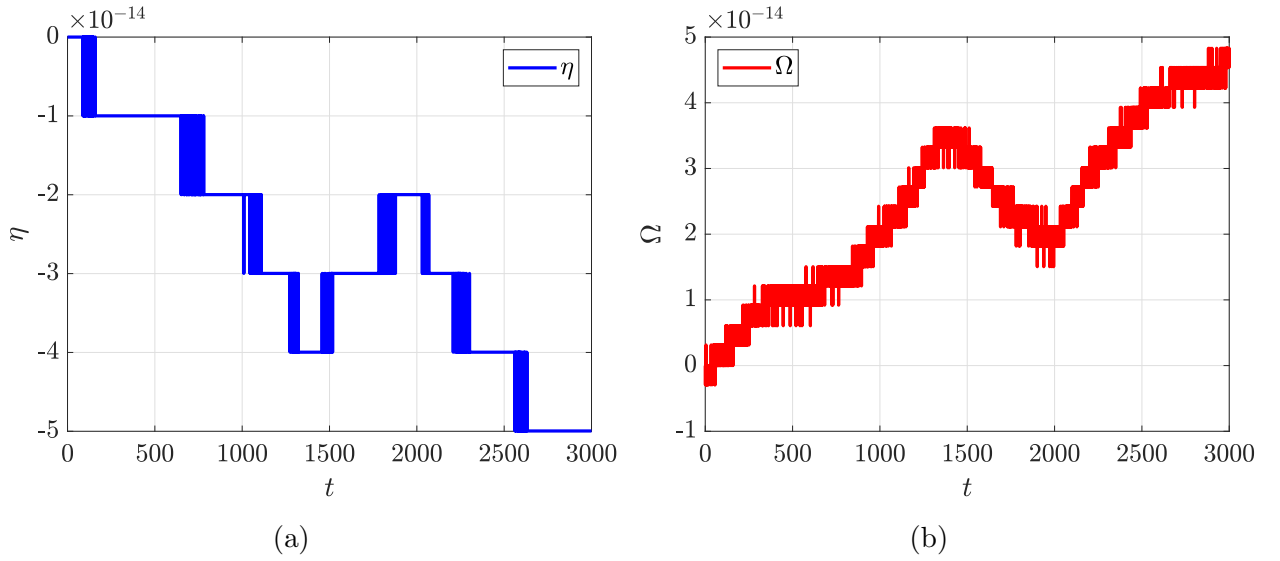


FIGURE 3 – Illustration de la conservation de la conservation de la probabilité totale (Fig.3a) où $\eta = 1 - P_{x_L < x < x_a}(t) - P_{x_a < x < x_b}(t) - P_{x_b < x < x_R}(t)$ et conservation de l'énergie moyenne (Fig.3b) où $\Omega = \frac{E(t) - E(0)}{E(0)}$.

3.1.3 Principe d'incertitude de Heisenberg

Le principe d'incertitude d'Heisenberg de la mécanique quantique dit qu'il existe une limite sur la précision à laquelle on peut connaître la quantité de mouvement et la position d'une particule au même temps. Ce principe est décrit par l'éq.(26).

$$(\langle \Delta x \rangle(t)) \cdot (\langle \Delta p \rangle(t)) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (26)$$

Le but de cette partie est de montrer que ce principe n'est pas violé numériquement. Pour ce faire, la quantité $(\langle \Delta x \rangle(t)) \cdot (\langle \Delta p \rangle(t))$ est représentée au cours du temps. Ceci est réalisé par la Fig.4. La simulation est effectuée avec $\Delta t = 0.5$ et $N_{inters} = 1024$. Cette figure permet

de montrer que le principe d'Heisenberg est respecté numériquement. En effet, la courbe est toujours au-dessus de $\frac{\hbar}{2} = 0.5$. De plus, il a pu être calculé (à l'aide de la fonction *min* de Matlab) que le minimum de la quantité $(\langle \Delta x \rangle(t)) \cdot (\langle \Delta p \rangle(t))$ est bien de $\frac{\hbar}{2}$ aux erreurs numériques près. Il est encore intéressant de constater à l'aide de la Fig.4 que $\frac{\hbar}{2}$ est une limite sur la précision à laquelle on peut connaître simultanément la quantité de mouvement et la position d'une particule. Cette imprécision peut être bien plus élevée.

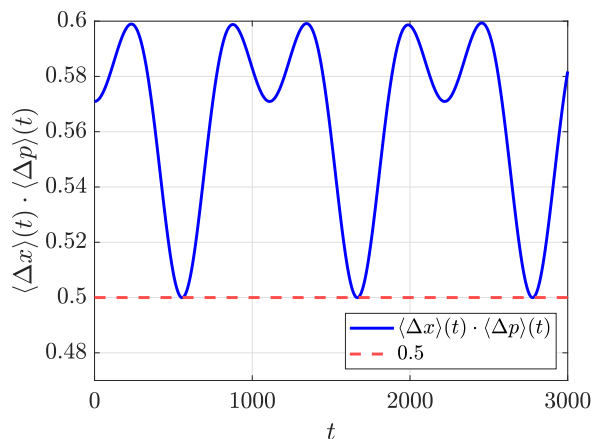


FIGURE 4 – Vérification du principe d'incertitude de Heisenberg

3.2 Analyse du mouvement moyen de la particule et comparaison avec le cas classique

Le but de cette sous-section est de comparer la position moyenne et la quantité de mouvement moyenne de la particule, $\langle x \rangle(t)$ et $\langle p \rangle(t)$ avec le résultat classique obtenu en résolvant les équations de la dynamique Newtonnienne d'une particule. Cette particule a une énergie "classique" :

$$E_{\text{class}} = \frac{\langle p \rangle^2}{2m} + V(\langle x \rangle) \quad (27)$$

où $\langle p \rangle$ et $\langle x \rangle$ sont calculés pour la particule quantique en $t = 0$. On considère à nouveau le cas de l'oscillateur harmonique où le potentiel est donné par l'éq.(25).

Afin de trouver la trajectoire classique de la particule l'Hamiltonien et les équations des Hamilton-Jacobi sont utilisées. L'éq.(27) peut être réécrite de la façon suivante :

$$E_{\text{class}} = H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (28)$$

où H représente l'Hamiltonien de la particule. Les équations de Hamilton impliquent :

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} = \sqrt{\frac{2}{m}(E_{\text{class}} - V(x))} \quad (29)$$

Sachant que le système est isolé, l'énergie est conservée : $E_{\text{class}}(t) = E(0) = E \forall t$. En substituant l'éq.(25) dans l'éq.(29) et en séparant les variables x et t on obtient la relation entre dx et dt :

$$dt = \sqrt{\frac{m}{2(E - V(x))}} dx = \sqrt{\frac{m}{2(E - \frac{4V_0}{(x_R - x_L)^2} x^2)}} dx \quad (30)$$

La solution analytique de la position d'une particule en mécanique classique est obtenue en intégrant l'éq.(30) entre 0 et t et $x(0) = x_0 = 0$ et $x(t)$:

$$x(t) = \frac{1}{2}(x_R - x_L) \sqrt{\frac{E}{V_0}} \sin\left(\sqrt{\frac{2V_0}{m}} \frac{2t}{(x_R - x_L)}\right) \quad (31)$$

En dérivant l'éq.(31) et en la substituant dans l'éq.(29) on obtient la quantité de mouvement d'une particule en mécanique classique :

$$p(t) = \sqrt{2Em} \cos\left(\sqrt{\frac{2V_0}{m}} \frac{2t}{(x_R - x_L)}\right) \quad (32)$$

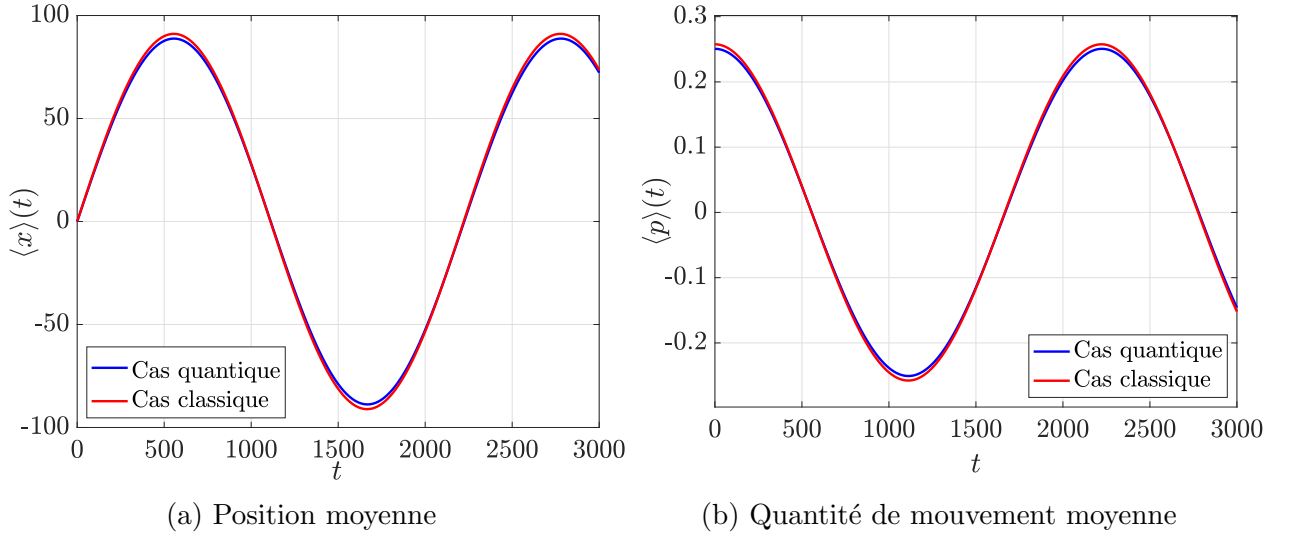


FIGURE 5 – Comparaison entre le cas classique et le cas quantique pour $t = 0$ jusqu'à $t = 3000$

La Fig.5 permet de comparer la position et la quantité de mouvement moyenne quantique de la particule avec le cas classique. Dans chaque cas, les courbes ont le même comportement bien qu'elles ne se superposent pas parfaitement. Dans les deux cas, le pic de la quantité est plus élevé dans le cas classique que quantique.

3.3 Effet tunnel

L'objectif de cette sous-section est d'observer l'effet tunnel [2]. Cet effet désigne la propriété que possède un objet quantique de franchir une barrière de potentiel même si son énergie est inférieure à l'énergie minimale requise pour franchir cette barrière. C'est un effet purement quantique, qui ne peut pas s'expliquer par la mécanique classique. Afin d'observer un tel phénomène, les conditions initiales sont modifiées : $x_L = -250$, $x_a = -110$, $x_b = 110$, $x_R = 250$, $V_0 = 0.25$ et $V_L = -0.04$. Ainsi, sous cette configuration et par l'éq.(1), le potentiel maximal est donné par $\hat{V} = V(x_a) = V(x_b)$.

Dans un premier temps, des simulations sont effectuées en variant l'énergie initiale de la particule. Augmenter la valeur de n permet d'augmenter la valeur initiale de l'énergie de la particule. En effet, le nombre d'ondes central initial est donné par $k_0 = \frac{2\pi n}{(x_R - x_L)}$ et l'énergie de la particule dépend de k_0 . L'évolution de la fonction d'onde $|\psi(x, t)|^2$ est représentée dans les trois cas suivants : $E < \hat{V}$ pour $n = 10$, $E \approx \hat{V}$ pour $n = 24$ et $E > \hat{V}$ pour $n = 30$. Les probabilités $P_{x < x_a}(t)$, $P_{x_b \leq x \leq x_b}(t)$ et $P_{x > x_b}(t)$ sont tracées dans les différents cas. La Fig.6 représente les énergies dans les trois différents cas énumérés ci-dessus.

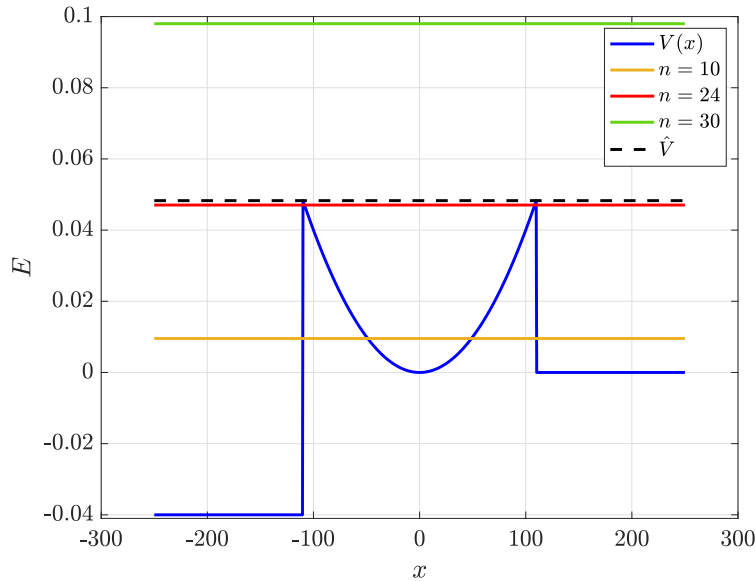
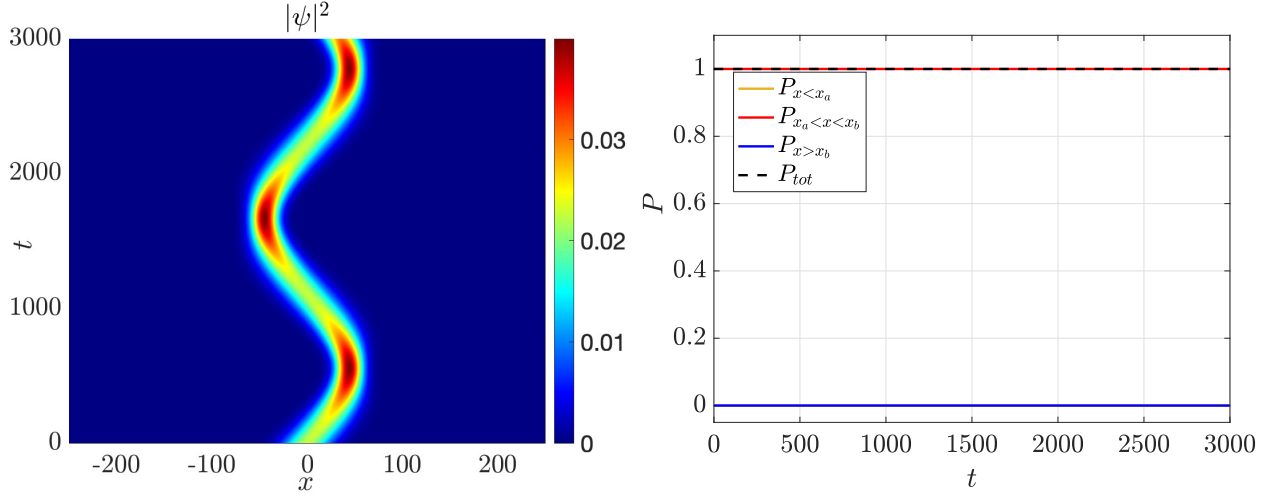


FIGURE 6 – Comparaison entre le potentiel $V(x)$ et trois différents paramètres n qui donne l'énergie de la particule libre

Le premier cas étudié correspond à $E < \hat{V}$. La Fig.7a illustre l'évolution de la fonction d'onde au cours du temps. On remarque que la particule semble rester confinée entre x_a et x_b . Cette observation est confirmée par la Fig.7b qui montre que la probabilité que la particule se trouve entre x_a et x_b est très proche de 1 durant toute la simulation. Ceci démontre que la particule n'a pas assez d'énergie pour passer la barrière de potentiel et n'interagit pas avec elle-même. Le comportement de la particule est identique à celui d'une particule classique.



(a) Évolution de la fonction d'onde $|\psi(x, t)|^2$

(b) Évolution de la probabilité de présence de la particule dans différents intervalles spatiaux au cours du temps

FIGURE 7 – Particule simulée numériquement pour $n = 10$

Pour étudier un cas où l'énergie de la particule est similaire à \hat{V} , la valeur du nombre d'ondes initial choisi est $n = 24$. Comme on peut le constater en observant la Fig.6, dans cette situation, l'énergie de la particule est très légèrement inférieure à \hat{V} . La Fig.8a est très intéressante puisqu'elle montre que la particule interagit avec elle-même (stries observées). On observe des phénomènes de transmission et de réflexion du faisceau d'onde. La particule est capable de franchir la barrière de potentiel mais elle est aussi réfléchiée dans l'autre direction. Contrairement au cas précédent, le faisceau d'onde ne reste pas confiné entre x_a et x_b . Cette observation est appuyée par la Fig.8b qui montre qu'aucune des probabilités $P_{x < x_a}(t)$, $P_{x_a \leq x \leq x_b}(t)$ et $P_{x > x_b}(t)$ est nulle en tout temps. La particule n'a donc absolument pas un comportement classique.

Le dernier cas étudié est celui où $E > \hat{V}$. La Fig.6 laisse voir que la valeur de cette énergie correspond à plus du double de la valeur de \hat{V} . La Fig.9a montre que la particule franchie la barrière de potentiel au premier passage. Ce résultat est attendu dans le cadre de la physique classique. La Fig.9a illustre à nouveau des phénomènes d'interférences de la particule avec elle-même. Au cours du temps, la particule semble être réfléchiée à chaque fois qu'elle passe un pic de potentiel. La Fig.9b permet de confirmer que la probabilité que la particule franchisse la barrière de potentiel est très élevée (proche de 1) mais cette probabilité diminue au cours du temps. C'est un effet purement quantique : l'effet de tunnel inverse. En effet, bien que l'énergie de la particule soit supérieure à \hat{V} , elle ne franchit pas obligatoirement la barrière de potentiel. Il est encore possible de remarquer que malgré le comportement différent de la particule dans les trois cas de figure, la probabilité totale P_{Tot} est égale à 1 en tout temps.

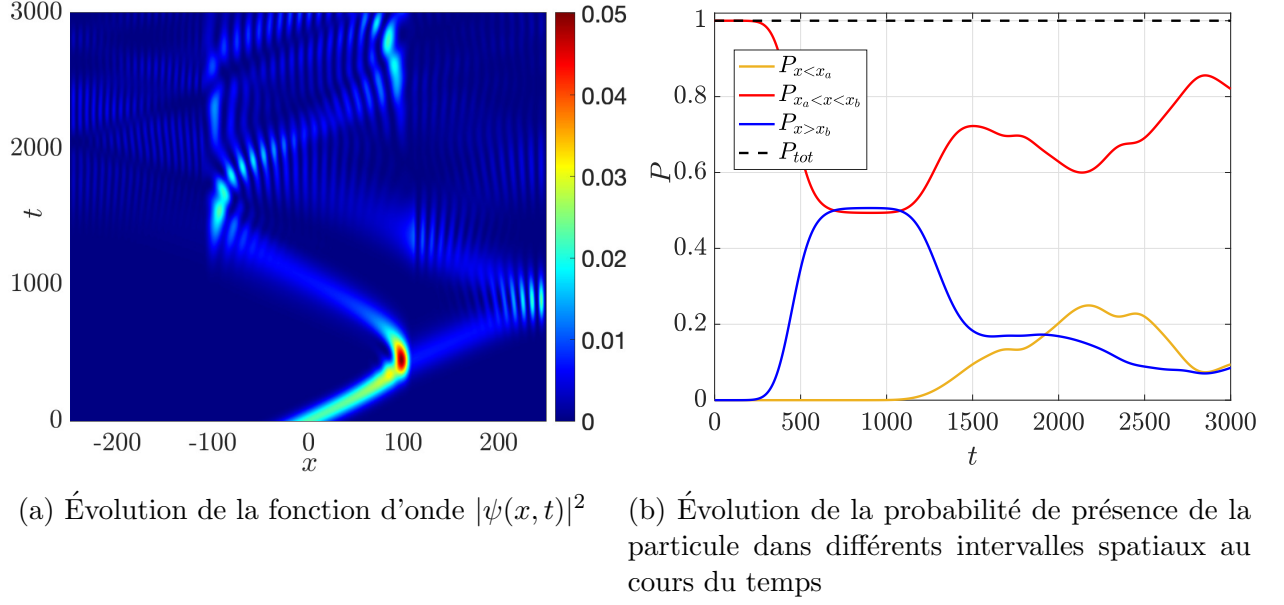


FIGURE 8 – Particule simulée numériquement pour $n = 24$

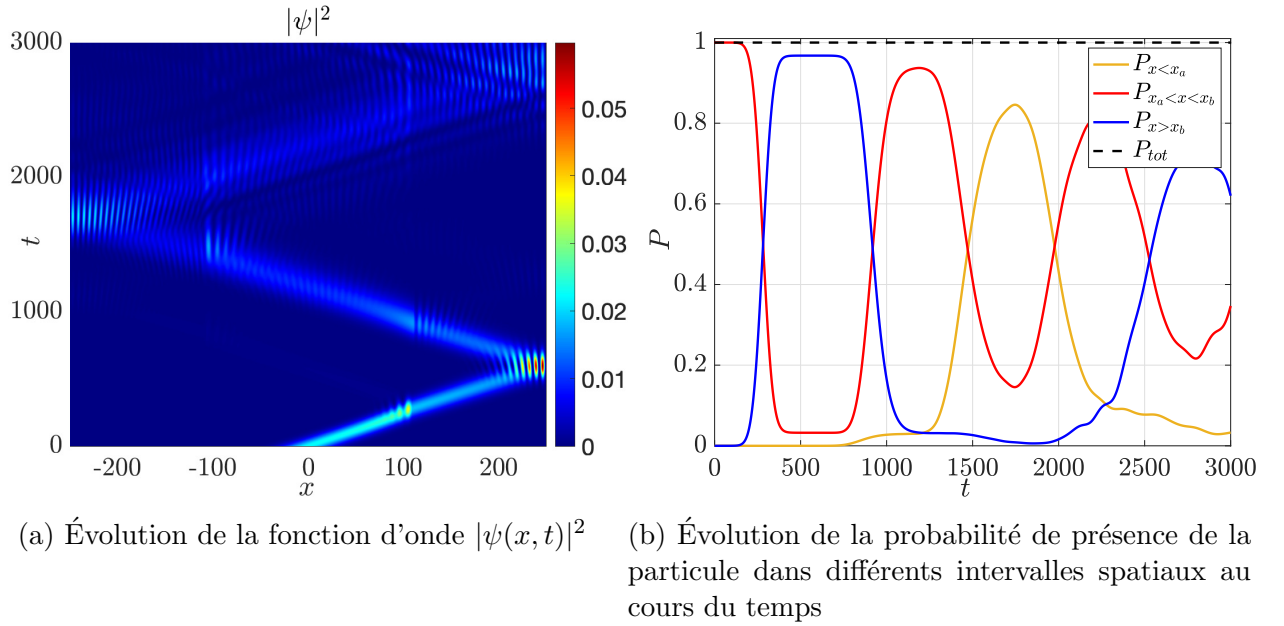


FIGURE 9 – Particule simulée numériquement pour $n = 30$

Dans un deuxième temps, en effectuant un scan sur les valeurs de n , l'évolution de la probabilité de transmission en fonction de $\frac{E}{V}$ est étudiée.

La Fig.10 permet d'illustrer la probabilité que la particule franchisse la barrière de potentiel en fonction de son énergie. Cette figure montre que même avec une énergie inférieure à \hat{V} , la particule est capable de franchir la barrière de potentiel. De plus, elle permet de voir qu'avec une énergie supérieure à \hat{V} , elle ne la franchit pas obligatoirement. La Fig.10 illustre donc parfaitement l'effet tunnel.

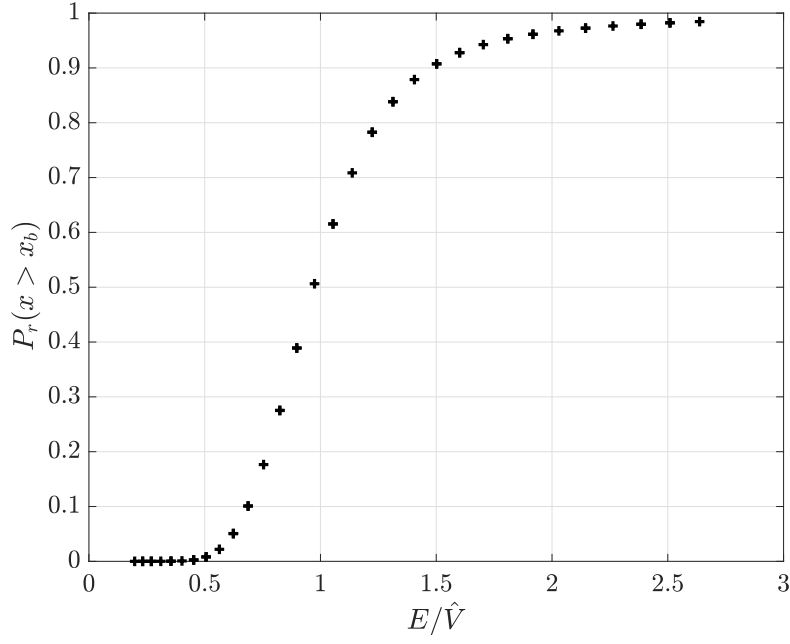


FIGURE 10 – Scan sur les valeurs de n de la probabilité maximum $P_r(x > x_b)$

Pour finir, le graphe tend asymptotiquement vers $P_{x>x_b} = 0$ lorsque $\frac{E}{\hat{V}}$ est inférieur à 0.5 (n est petit) et asymptotiquement vers $P_{x>x_b} = 1$ lorsque E est très grand. Ceci démontre bien qu'aux extrêmes, le comportement de la particule tend vers celui d'une particule classique.

3.4 Détecteur de particules

Dans cette sous-section, l'objectif est d'installer un "détecteur de particules" sur la partie droite ($x_b < x < x_R$) du domaine. Ce dernier détecte à un instant donné $t = t_{\text{detect}}$ la présence de la particule. Ceci transforme instantanément la fonction d'onde de sorte à ce qu'elle multiplie la fonction d'onde préexistante par $\omega(x)$ définie à l'éq.(33). Le détecteur de particules est implémenté dans le code C++ où l'onde est donc modifiée puis normalisée de telle sorte à ce que la probabilité totale soit de nouveau égale à 1 après transformation par la détection. Les mêmes conditions initiales qu'à la Section 3.3 sont implémentées.

$$\omega(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < x_b \\ 0.5 \cdot (1 + \operatorname{erf}(a\pi \frac{2x-x_b-x_{we}}{x_{we}-x_b})) & \text{si } x_b \leq x < x_{we} \\ 1 & \text{si } x_{we} \leq x < x_{wec} \\ 0.5 \cdot \operatorname{erfc}(a\pi \frac{2x-x_{wec}-x_R}{x_R-x_{wec}}) & \text{si } x_{wec} \leq x < x_R \end{cases} \quad (33)$$

erf et erfc sont la fonction d'erreur et la fonction d'erreur complémentaire respectivement. Elles sont disponibles dans la librairie C++ math.h. Les valeurs des paramètres utilisés sont $a = 2$, $x_{we} = 130$ et $x_{wec} = 230$. Il est important de préciser que cette expérience ne consiste pas à simuler un système entier avec un détecteur et d'observer comment le détecteur réagit, mais plutôt d'imaginer une situation où la particule a été mesurée à $t = t_{\text{detect}}$ et d'observer ce qu'il se passe dans la dynamique après la détection.

Les Fig.11 et 12 permettent de comparer le cas où la particule est détectée avec celui où elle ne l'est pas. La Fig.11 décrit l'évolution de la fonction d'onde. Avant $t = 1000$, les Fig.11b et 11a sont identiques puisque aucun changement n'a encore été réalisé sur la fonction d'onde. À $t = 1000$, la particule a été détectée sur la Fig.11a. Par les principes de la mécanique quantique, si une particule est détectée à un endroit cela signifie qu'elle ne peut pas se trouver autre part, il n'est donc pas possible d'observer des phénomènes d'interférences. C'est pourquoi la particule est placée en $x > x_b$ et que l'on observe un collapse de la fonction d'onde. La Fig.12b confirme ce déplacement puisque à $t = 1000$, on a $P(x > x_b) = 1$. Ensuite, la particule recommence sa dynamique en partant de l'état imposé. Après $t = 1000$, le faisceau d'onde ne suit absolument pas la même dynamique sur la Fig.11b et sur la Fig.11a. Ceci illustre le caractère irréversible de la mesure en mécanique quantique. On observe que lorsque la particule a été détectée à droite, elle a plus de probabilité de se trouver à droite par la suite. Il est aussi possible de remarquer que dans les deux situations, il y a une conservation de la probabilité totale.

Il serait intéressant de détecter la particule en tout temps, l'évolution de la particule obtenue ressemblerait alors à celle d'une particule classique puisque aucun phénomène d'interférence n'aurait lieu.

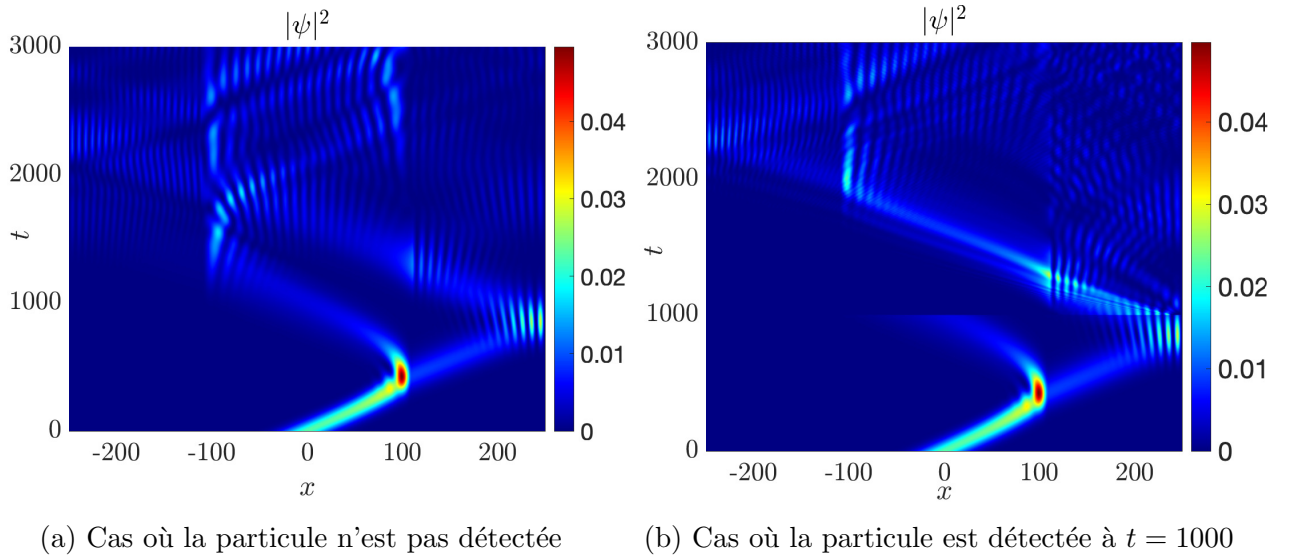


FIGURE 11 – Évolution de la fonction d'onde $|\psi(x, t)|^2$ pour $n = 25$

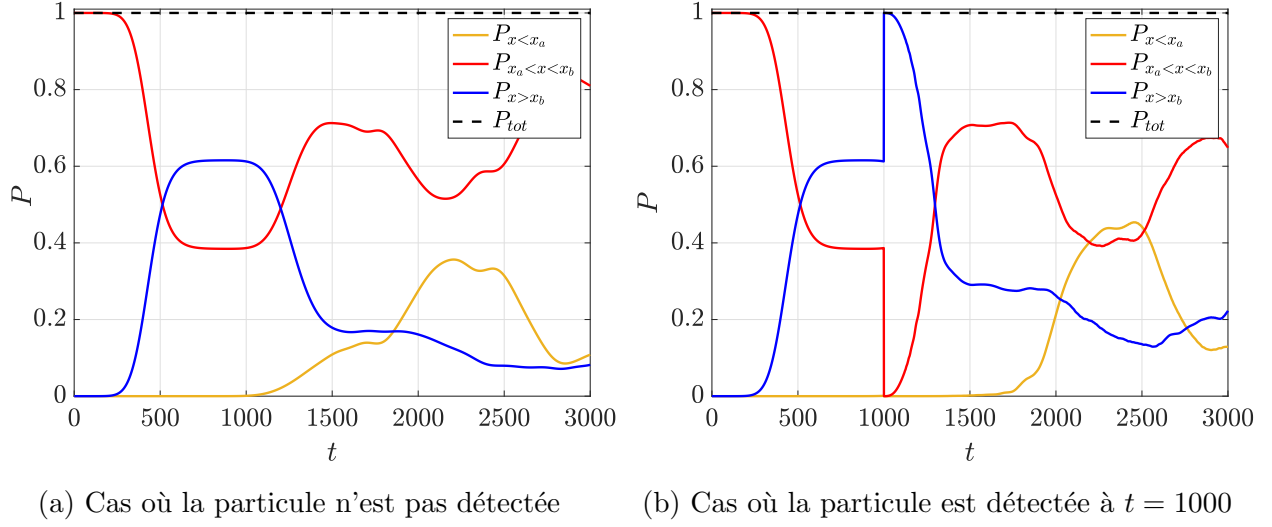


FIGURE 12 – Évolution de la probabilité de présence de la particule dans différents intervalles spatiaux au cours du temps

4 Facultatif

4.1 Modification de la forme du potentiel

L'objectif de ce premier travail facultatif est de modifier la forme du potentiel afin d'étudier le comportement de la particule sous un potentiel différent. Le potentiel étudié est donné par :

$$V(x) = \begin{cases} V_L & x \in [x_L, x_a] \\ 4V_0x_a^2/(x_R - x_L)^2 = \hat{V} & x \in [x_L, x_{L+\epsilon}] \\ V_L & x \in [x_{L+\epsilon}, x_{b-\epsilon}] \\ 4V_0x_a^2/(x_R - x_L)^2 = \hat{V} & x \in [x_{b-\epsilon}, x_b] \\ V_L & x \in [x_b, x_R] \end{cases} \quad (34)$$

où ϵ est un paramètre variable qui représente la largeur des barrières de potentiel. La Fig.13 représente la probabilité de transmission en fonction de E/\hat{V} où le potentiel est donné par l'éq.(34). Une comparaison est réalisée pour différentes largeurs de la barrière de potentiel ($\epsilon = 1, 5, 10, 20$). Le cas où $\epsilon = 1$ est un cas extrême. En effet, la barrière de potentiel est si fine qu'elle est pratiquement absente. Lorsque $E/\hat{V} \ll 1$, la probabilité de transmission est supérieure à 0.6. On observe que plus la largeur des barrières de potentiel augmente, plus la probabilité de transmission est faible lorsque $E/\hat{V} < 1$. Ce phénomène est attendu puisqu'il est prédit par la théorie de la mécanique quantique. La Fig.14 illustre l'effet tunnel théorique dans le cas d'une barrière de potentiel. Lorsque la particule possède une énergie inférieure à l'énergie de la barrière de potentiel, une partie du faisceau d'onde est réfléchi et une partie est transmise. On observe une décroissance exponentielle de la probabilité de transmission en fonction de la largeur de la barrière de potentiel. Si la barrière est trop large, la fonction

d'onde a une amplitude nulle et n'est pas transmise.

Il est possible de comparer brièvement la probabilité de transmission dans le cas du potentiel donné par l'éq.(1) et par l'éq.(34). Dans les deux cas il est possible d'observer l'effet de tunnel et l'effet de tunnel inverse. Le comportement de la courbe dans le "Cas 1" est plus difficile à prédire et à expliquer.

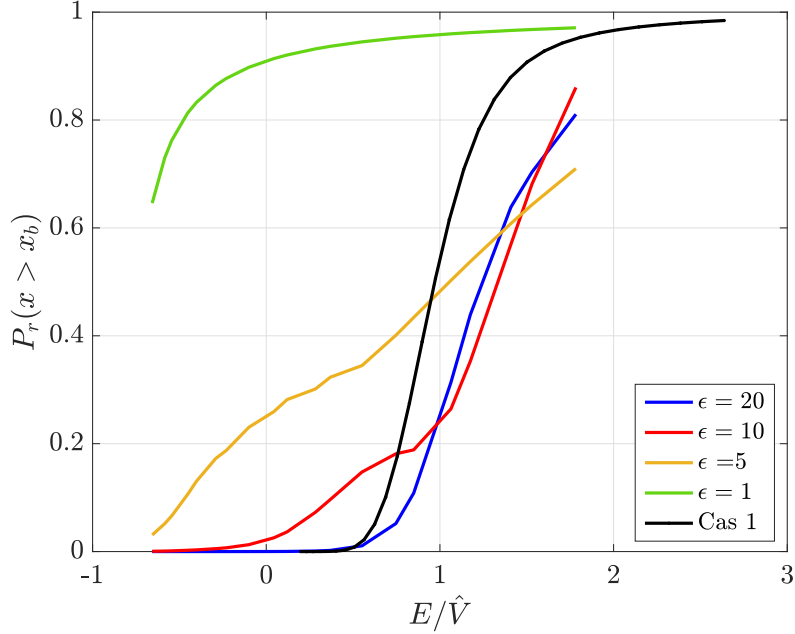


FIGURE 13 – Scan sur les valeurs de n de la probabilité maximum $P_r(x > x_b)$ lorsque le potentiel est donné par l'éq.(34) en variant le paramètre ϵ . La courbe noire, "Cas 1", représente le scan sur les valeurs de n de la probabilité maximum $P_r(x > x_b)$ lorsque le potentiel est donné par l'éq.(1).

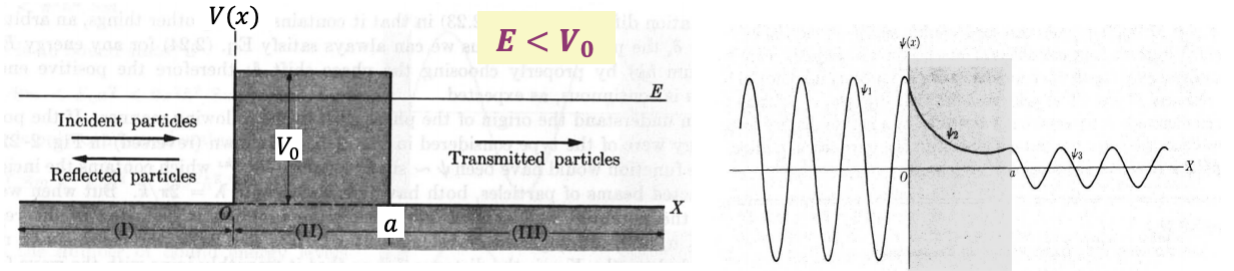


FIGURE 14 – Barrière de potentiel : effet tunneling dans le cas $E < V_0$ et décroissance exponentiel de la fonction d'onde. Figure tiré de [3].

4.2 Trois détecteurs de particule

L'objectif de ce second travail facultatif est de programmer trois détecteurs, un dans chaque partie : un détecteur à gauche $x_L < x < x_a$, un détecteur au centre $x_a < x < x_b$ et un

détecteur à droite $x_b < x < x_R$. Quatre simulations sont réalisées : une où la particule est détectée par le détecteur de gauche, une autre où elle l'est par le détecteur central, une où la particule est détectée par le détecteur de droite et une simulation où la particule n'est pas détectée. Afin de réaliser cela, les détecteurs à gauche et au centre sont implémentés dans le code C++ de la manière suivante¹ :

Détecteur de gauche

À $t = t_{\text{detect}}$, la fonction d'onde est instantanément transformée de sorte à ce qu'elle multiplie la fonction d'onde préexistante par $\beta(x)$ définie à l'éq.(35).

$$\beta(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x > x_a \\ 0.5 \cdot (1 + \operatorname{erf}(a\pi \frac{2x - x_L - x_1}{x_1 - x_L})) & \text{si } x_L \leq x < x_1 \\ 1 & \text{si } x_1 \leq x < x_2 \\ 0.5 \cdot \operatorname{erfc}(a\pi \frac{2x - x_2 - x_a}{x_a - x_2}) & \text{si } x_2 \leq x < x_a \end{cases} \quad (35)$$

où $a = 2$, $x_1 = -230$ et $x_2 = -130$.

Détecteur central

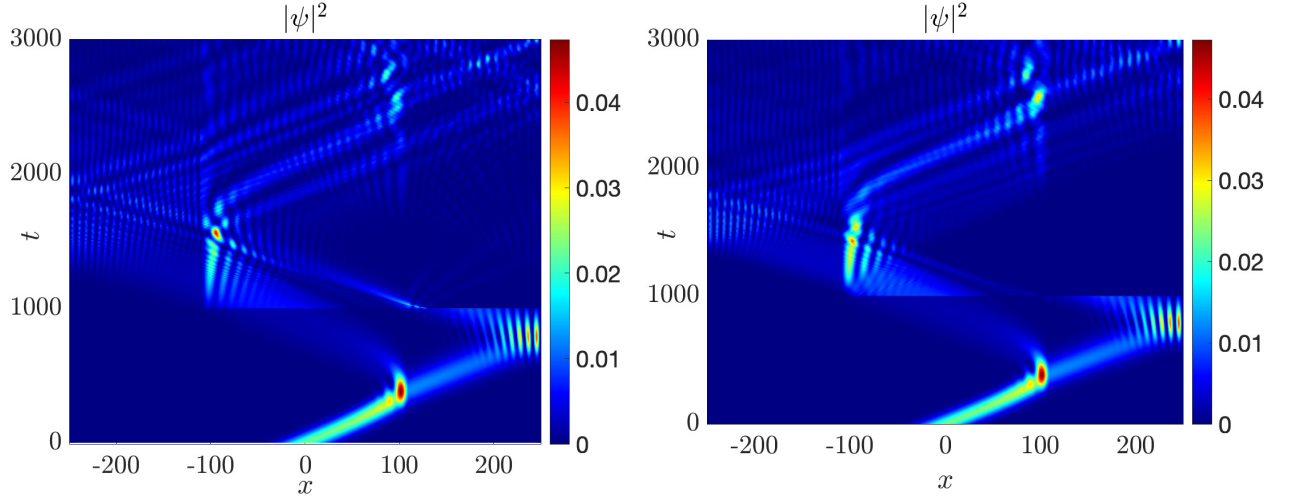
À $t = t_{\text{detect}}$, la fonction d'onde est instantanément transformée de sorte à ce qu'elle multiplie la fonction d'onde préexistante par $\gamma(x)$ définie à l'éq.(36).

$$\gamma(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < x_a \\ 0.5 \cdot (1 + \operatorname{erf}(a\pi \frac{2x - x_a - x_3}{x_3 - x_a})) & \text{si } x_a \leq x < x_3 \\ 1 & \text{si } x_3 \leq x < x_4 \\ 0.5 \cdot \operatorname{erfc}(a\pi \frac{2x - x_4 - x_b}{x_b - x_4}) & \text{si } x_4 \leq x < x_b \\ 0 & \text{si } x > x_b \end{cases} \quad (36)$$

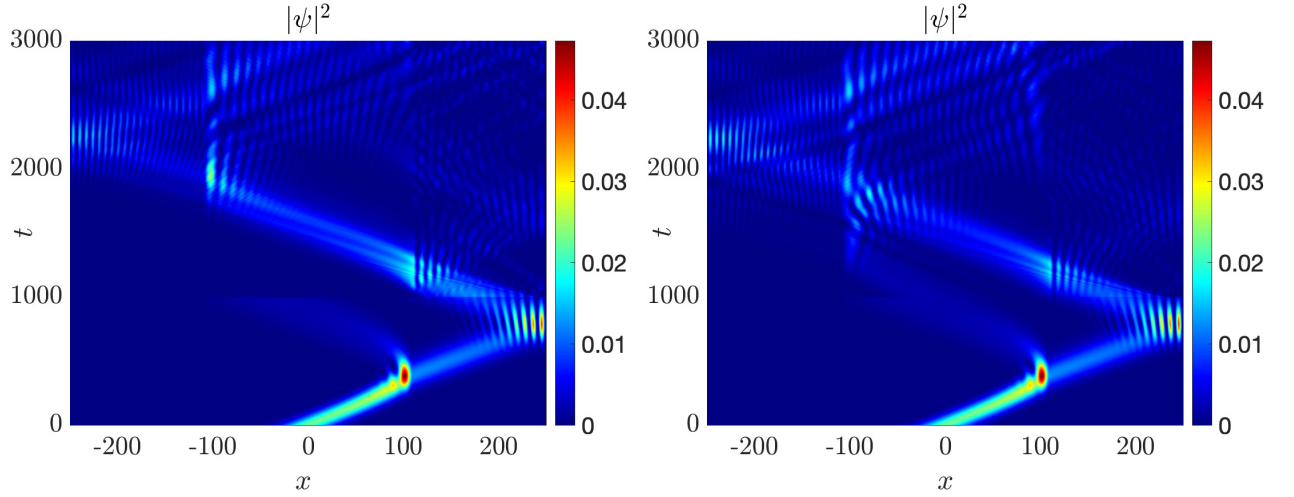
où $a = 2$, $x_3 = -90$ et $x_4 = 90$.

La Fig.15 représente l'évolution de la fonction d'onde pour $n = 27$. Elle permet de comparer l'évolution de la particule lorsqu'elle est détectée à gauche, au centre, à droite et lorsqu'elle n'est pas détectée. On peut tirer les mêmes conclusions qu'à la Section 3.4 : l'effondrement de la fonction d'onde lorsqu'elle est détectée à $t = 1000$ dans chaque situation et le changement de la dynamique du système lorsque la particule est détectée dans un intervalle spatial : une particule détectée au centre aura plus tendance à se trouver au centre après la détection et similairement pour une particule détectée à droite ou à gauche.

1. Le détecteur de droite est déjà implémenté (voir Section 3.4)



(a) Cas où la particule est détectée à $t = 1000$ par le détecteur gauche (b) Cas où la particule est détectée à $t = 1000$ par le détecteur central



(c) Cas où la particule est détectée à $t = 1000$ par le détecteur droite (d) Cas où la particule n'est pas détectée

FIGURE 15 – Évolution de la fonction d'onde $|\psi(x, t)|^2$ pour $n = 27$

5 Conclusion

Pour conclure, ce projet a permis d'étudier la propagation d'une particule soumise à un potentiel V en résolvant l'équation de Schrödinger numériquement. Cela a mené au schéma semi-implicite de Crank-Nicholson. Dans un premier temps, le schéma numérique a été testé dans le cas d'un oscillateur harmonique. Il a pu être vérifié que le schéma converge à l'ordre 2 temporellement et spatialement. De plus, ce schéma conserve la probabilité totale et l'énergie. Le principe d'incertitude d'Heisenberg est lui aussi respecté numériquement. Ensuite, les solutions dans le cas classique et numérique (quantique) ont été comparées. Les deux solutions sont similaires mais pas parfaitement identiques.

Dans un second temps, une propriété quantique du mouvement a été étudiée : l'effet tunnel. L'objectif était d'observer comment une particule réagit face à un obstacle, une barrière de potentiel, en fonction de son énergie. Il a pu être observé que la probabilité de transmission n'est pas nulle lorsque l'énergie de la particule est inférieure au potentiel et que cette probabilité croît asymptotiquement vers 1 pour des valeurs élevées de E .

Dans un troisième temps, un détecteur de particules a été installé sur la partie droite du domaine. Ceci a permis de mettre en exergue le caractère irréversible de la mesure en physique quantique. On a pu voir que le faisceau d'onde ne suit pas la même dynamique après détection.

Dans un travail supplémentaire, la forme du potentiel a été modifiée et le comportement de la particule a été étudié en variant la largeur de la barrière de potentiel. On a pu confirmer que l'effet tunnel est plus important lorsque la barrière est fine et que cet effet décroît exponentiellement. Pour finir, deux autres détecteurs ont été installés, au centre et à gauche du domaine. Il a pu être observé que suivant l'emplacement où la particule a été détectée, la probabilité de se trouver dans cet intervalle spatial par la suite est plus élevée.

6 Annexe

Références

- [1] Physique Numérique I-II, Laurent Villars, EPFL, 26 août 2019, Version 19.1
- [2] Wikipedia, Effet tunnel, Article modifié le 20 mai 2020, https://fr.wikipedia.org/wiki/Effet_tunnel
- [3] Physique IV, Lecture 19-20 : L'équation de Schrödinger : application, Marco Grioni, EPFL, Semestre de printemps 2019-2020