

MÉTHODE PSEUDO-SPECTRALE : PROPAGATION D'UN PAQUET D'ONDE

par

Jordan Charest (526 761 706)
Benjamin Claveau (536 772 700)

Remis à

Prof. Philippe Després

pour le cours

PHY-3500 PHYSIQUE NUMÉRIQUE

27 avril 2022

Abrégé

La méthode pseudo-spectrale, qui consiste à appliquer les opérateurs de potentiel et d'énergie cinétique dans des espaces différents, permet de résoudre simplement et rapidement l'équation de Schrödinger avec une puissance de calcul réduite. Cette méthode a donc été appliquée à l'évolution temporelle d'un paquet d'onde représentant un électron ainsi qu'une particule alpha dans différentes situations physiques afin de déterminer si les résultats produits concordent avec le comportement physique attendu. Les résultats produits par les simulations, présentés dans des animations, concordent avec les résultats attendus pour les situations où il n'y a pas de discontinuité dans le potentiel. Dans les situations où des discontinuités sont présentes, les résultats sont conformes aux attentes loin des discontinuités. Ces limitations de la méthode pseudo-spectrale sont dues au manque de hautes fréquences dans le domaine de Fourier imposé par une limitation dans la puissance de calcul et dans la mémoire disponible. Il serait donc pertinent de reprendre les simulations avec une puissance de calcul significativement plus élevée, ce qui permettrait de mieux observer le comportement aux discontinuités.

Introduction

L'étude du comportement d'une particule dans diverses situations est au coeur de la physique quantique. Comme l'information liée à ce comportement est contenue dans la fonction d'onde de la particule, il est important de pouvoir bien caractériser ces fonctions ainsi que leur évolution dans le temps. On sait que, dans la limite non-relativiste, l'évolution temporelle et spatiale de la fonction d'onde d'une particule est décrite par l'équation de Schrödinger, qui est une équation différentielle partielle connue depuis 1926 [4]. Toutefois, la résolution de celle-ci est non-triviale dans la plupart des cas, car l'application des opérateurs présents dans l'équation ne peut pas toujours être effectuée simplement. Pour remédier à la situation, de nombreuses méthodes approximatives ont été développées afin de tenter de résoudre et d'appliquer plus facilement l'équation de Schrödinger. Parmi ces avancées, on retrouve la méthode pseudo-spectrale, une méthode simple à implémenter qui génère des résultats avec un temps et une puissance de calcul réduits. Le fondement de cette démarche consiste à traiter les opérateurs de potentiel et d'énergie cinétique dans des espaces différents, qui sont l'espace des coordonnées spatiales et l'espace de Fourier respectivement. On utilise donc des transformées de Fourier successives afin de considérer chaque opérateur dans un espace où son application est simple. Le but du projet est d'appliquer cette méthode à plusieurs situations afin de déterminer si les résultats obtenus concordent avec le comportement physique attendu. Les situations étudiées comprennent un paquet d'onde gaussien représentant la fonction d'onde d'un électron ainsi qu'une particule alpha. On s'intéresse alors à l'évolution temporelle du paquet d'onde dans divers potentiels. On s'intéresse également à l'impact de la variation de certains paramètres initiaux sur l'évolution du paquet d'onde, ainsi qu'au comportement de la fonction d'onde dans les cas où le potentiel est discontinu.

Méthodes analytiques

Séparation d'opérateurs

Afin de pouvoir résoudre l'équation de Schrödinger par méthode pseudo-spectrale, il est nécessaire de pouvoir traiter séparément les opérateurs d'énergie cinétique et d'énergie potentielle. On peut arriver à ce but par la méthode de séparation d'opérateurs (*split-operator approach*). Tout d'abord, l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour la propagation d'une particule correspond à :

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t_0) + V(x) \psi(x, t_0)$$

où m est la masse de la particule et $V(x)$ le potentiel dans lequel elle se trouve. On définit l'opérateur d'énergie cinétique \hat{T} et l'opérateur d'énergie potentielle \hat{V} :

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \\ \hat{V} &= V(x) \end{aligned}$$

On remarque que \hat{T} est un opérateur différentiel et que \hat{V} est un opérateur scalaire. En insérant les opérateurs dans l'équation de Schrödinger, on obtient l'équation suivante :

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = [\hat{T} + \hat{V}] \psi(x, t_0)$$

En résolvant l'équation différentielle temporelle pour obtenir l'évolution de la fonction d'onde de t_0 à t , on obtient une solution de la forme suivante :

$$\psi(x, t) = \exp \left[-i \left(\hat{T} + \hat{V} \right) (t - t_0) / \hbar \right] \psi(x, t_0)$$

On pose $\delta t = t - t_0$:

$$\psi(x, t) = \exp \left[-i \left(\hat{T} + \hat{V} \right) \delta t / \hbar \right] \psi(x, t_0)$$

On obtient donc une exponentielle de l'addition de deux opérateurs. Afin de déterminer quelles manipulations sont possibles avec une solution de cette forme, considérons la série de Taylor de l'exponentielle suivante, où \hat{A} et \hat{B} sont des opérateurs :

$$e^{(\hat{A} + \hat{B})x} = \sum_0^\infty \frac{(\hat{A} + \hat{B})^n x^n}{n!}$$

En développant la série :

$$e^{(\hat{A} + \hat{B})x} = 1 + (\hat{A}x + \hat{B})x + \frac{\hat{A}^2 + \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2}{2} x^2 + \dots$$

On observe que l'exponentielle ne peut être séparée en deux exponentielles que si les opérateurs \hat{A} et \hat{B} commutent, donc si $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Ce n'est pas généralement le cas avec \hat{T} et \hat{V} , mais, pour des petites valeurs de δt , on peut utiliser l'approximation suivante :

$$e^{-i(\hat{T} + \hat{V})\delta t / \hbar} \approx e^{-i\hat{V}\delta t / 2\hbar} e^{-i\hat{T}\delta t / \hbar} e^{-i\hat{V}\delta t / 2\hbar} + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

La séparation des opérateurs facilite grandement la résolution du problème en permettant de traiter les deux opérateurs dans des espaces différents où ceux-ci ont une forme plus pratique. De cette façon, le potentiel \hat{V} sera traité dans l'espace des coordonnées spatiales, tandis que l'énergie cinétique \hat{T} sera traitée dans l'espace de Fourier.

Méthode pseudo-spectrale

Selon la démarche de la section précédente, l'opérateur d'évolution temporel d'une particule peut être approximé sur des petits intervalles temporels δt par l'expression suivante :

$$\psi(x, t) \approx e^{-i\hat{V}\delta t / 2\hbar} e^{-i\hat{T}\delta t / \hbar} e^{-i\hat{V}\delta t / 2\hbar} \psi(x, t_0)$$

Tout d'abord, afin de simplifier la notation, on peut définir et calculer les valeurs de la fonction suivante :

$$\phi(x) = e^{-i\hat{V}\delta t / 2\hbar} \psi(x, t_0)$$

Ce calcul est simple, car l'opérateur \hat{V} est un opérateur scalaire. Les choses se compliquent lorsqu'on tente de calculer la quantité suivante :

$$e^{-i\hat{T}\delta t / \hbar} \phi(x)$$

Comme l'opérateur \hat{T} est un opérateur vectoriel, le calcul est non trivial. On doit donc passer au domaine spectral afin de pouvoir effectuer le calcul. On passe donc d'abord au domaine spectral en effectuant la transformée de Fourier de $\phi(x)$:

$$\tilde{\phi}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) e^{-ikx} dx$$

Dans l'espace de Fourier, l'opérateur d'énergie cinétique a la forme suivante :

$$T(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Maintenant que \hat{T} est un opérateur scalaire, on peut simplement l'appliquer sur la transformée de Fourier de la fonction. On peut ensuite prendre la transformée de Fourier inverse (notée \mathcal{F}^{-1}) pour obtenir l'expression recherchée :

$$e^{-i\hat{T}\delta t/\hbar} \phi(x) = \mathcal{F}^{-1} \left[e^{-iT(k)\delta t/\hbar} \tilde{\phi}(x) \right]$$

Finalement, comme \hat{V} est un opérateur scalaire, on peut l'appliquer directement dans l'espace des coordonnées. On obtient donc la forme suivante pour la propagation d'un paquet d'onde sur un intervalle δt :

$$\psi(x,t) \approx e^{-i\hat{V}\delta t/2\hbar} \mathcal{F}^{-1} \left[e^{-iT(k)\delta t/\hbar} \mathcal{F} \left[e^{-i\hat{V}\delta t/2\hbar} \psi(x,t_0) \right] \right]$$

Il ne reste donc qu'à déterminer une condition initiale pour la fonction $\psi(x,t_0)$. Un choix typique pour un paquet d'onde représentant une particule est une onde plane modulée par une gaussienne. On a donc la forme suivante :

$$\psi(x,0) = \left[\frac{1}{2\pi(\Delta x)^2} \right]^{1/4} \exp \left[-ik_0 x - \frac{(x-x_0)^2}{4(\Delta x)^2} \right]$$

où Δx représente la largeur de la gaussienne centrée à $x = x_0$.

Méthodes numériques

L'entièreté du projet a été effectué en langage Python. Le code utilisé pour générer les résultats est disponible publiquement sur GitHub^[1]. Toutes les grandeurs et constantes physiques sont définies en unités SI.

Comme la transformée de Fourier est au coeur de la méthode pseudo-spectrale et que celle-ci ne peut pas toujours être effectuée de façon analytique, il est nécessaire de choisir une méthode de transformée de Fourier numérique bien adaptée à nos besoins. Afin de pouvoir effectuer le calcul de plusieurs transformées de Fourier dans un temps raisonnable, on souhaite choisir une méthode rapide. La méthode des transformées de Fourier rapides (*Fast Fourier Transform* ou *FFT*) est donc

[1]. <https://github.com/Jordan-Charest/PhysNum.git> ; le matériel se trouve dans le dossier "Projet"

un choix évident. Alors que le temps de calcul d'une transformée de Fourier effectuée de façon traditionnelle varie selon le nombre d'échantillons N comme N^2 , la transformée de Fourier rapide varie plutôt en $N \log N$ [3]. Cette différence est importante lorsqu'on traite un grand nombre d'échantillons et lorsqu'on effectue successivement un grand nombre de transformées de Fourier, ce qui est le cas pour la méthode pseudo-spectrale. De plus, au lieu d'implémenter directement un algorithme de transformées de Fourier rapides en Python, on peut utiliser directement des fonctions du module `numpy.fft`. Comme ce module est codé en langage C, qui est un langage compilé et non interprété comme Python, son exécution est significativement plus rapide. La fonction `numpy.fft.fft` effectue la transformée de Fourier d'une fonction par la méthode de la transformée de Fourier rapide, tandis que la fonction `numpy.fft.ifft` effectue la transformée de Fourier inverse par la même méthode. La fonction `numpy.fft.fftfreq` est également utile, car elle prend en argument le nombre N de points de la fonction à transformer ainsi que l'espacement entre deux points et retourne les fréquences correspondant aux coefficients de Fourier obtenus par `numpy.fft.fft`. La plage de fréquences retournée est inversement proportionnelle à l'espacement entre deux points précisé en entrée.

À partir des méthodes numériques choisies, les fonctions `iteration_temporelle` et `evolution_temporelle` ont été implémentées. La fonction `iteration_temporelle` prend en argument une condition initiale `psi_1`, qui correspond à $\psi(x, t_0)$, et un pas temporel `dt`, qui correspond à δt , et calcule la valeur de la fonction à $t = t_0 + \delta t$ d'après l'équation de la méthode pseudo-spectrale dérivée dans la section des méthodes analytiques. La fonction `evolution_temporelle` prend en argument un `array` initial `psi_init` correspondant au $\psi(x, 0)$ défini précédemment, un nombre d'itérations N et un pas temporel `dt` et calcule l'évolution de la fonction d'onde en appelant itérativement N fois la fonction `iteration_temporelle` avec un pas `dt` en considérant le résultat de l'itération précédente comme valeur initiale `psi_1` (on a donc $\delta t_{tot} = Ndt$). La fonction retourne ensuite une liste des valeurs de temps ainsi qu'un `array numpy` à 2 dimensions comprenant les valeurs de la fonction $\psi(x, t)$ où chaque rangée correspond à une valeur temporelle différente. On peut donc effectuer les calculs pour chaque situation en affectant les bonnes valeurs de Δx , x_0 , k_0 et $V(x)$ puis en appelant la fonction `evolution_temporelle` avec les valeurs de N et de `dt` désirées. On définit aussi la fonction `energie`, qui permet de retourner l'énergie en eV de la particule à partir de sa masse et son nombre d'onde afin de l'afficher au graphique.

Afin d'animer la fonction d'onde obtenue, la méthode `FuncAnimation` du module `matplotlib.animation` est utilisée dans la fonction nommée `generate_animation`. Elle prend en entrée la fonction `animate` propre à chaque situation, et itère sur les valeurs de la fonction d'onde à chaque pas temporel afin de l'afficher au graphique. Étant donné que la fonction d'onde est une fonction complexe, on graphique la probabilité de présence, soit $|\psi|^2$, qui correspond à la probabilité de retrouver la particule à une position donnée.

Situations étudiées et paramètres physiques

Les situations physiques étudiées pour l'électron sont l'étalement stationnaire d'un paquet d'onde, la propagation libre, la propagation avec un saut de potentiel, un puits ou une barrière de potentiel ainsi qu'un potentiel harmonique. Tout d'abord, afin d'obtenir des comportements intéressants, on

doit déterminer des valeurs réalistes pour les paramètres de la gaussienne initiale $\psi(x,0)$ pour un électron. Pour ce qui est du nombre d'onde k_0 , on peut déduire sa valeur à partir de la longueur d'onde de de Broglie de l'électron pour une vitesse donnée. La longueur d'onde de de Broglie d'une particule est donnée par la relation suivante :

$$\lambda_0 = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{2\pi}{k_0}$$

où h est la constante de Planck, p est la quantité de mouvement de la particule, m est sa masse et v est sa vitesse. Il ne reste donc qu'à choisir une vitesse raisonnable pour un électron. La vitesse doit être assez grande pour que le comportement de l'électron soit observable sur une période de temps comparable au temps d'étalement, mais ne doit pas être trop grande étant donné que les effets relativistes sont négligés. Par tâtonnement, on détermine que les valeurs optimales de k_0 sont de l'ordre de 1×10^{10} rad/m, correspondant à une vitesse d'environ $0,005c$. On obtient une énergie cinétique d'environ $6,39$ eV pour l'électron. En ce qui concerne l'étalement Δx de la gaussienne de la fonction d'onde, un choix raisonnable est de considérer que l'électron est initialement confiné dans une zone du même ordre de grandeur que la taille d'un atome. On choisit donc de considérer un étalement initial Δx de l'ordre de $1 \text{ \AA} = 0,1 \text{ nm}$. Afin de bien pouvoir observer le comportement du paquet d'onde, la durée des simulations est de 80 fs, excepté pour la barrière de potentiel, qui a une durée de 160 fs. Elles comportent 8000 itérations avec un pas temporel de $0,01$ fs et la barrière de potentiel comporte $16\,000$ itérations avec le même pas. Spatialement, les simulations sont effectuées sur un domaine de -100 nm à 100 nm avec 5000 divisions. Ce domaine est plus grand que le domaine d'intérêt. Comme une fonction dont on effectue la transformée de Fourier est considérée comme périodique avec une période correspondant à la largeur du domaine, il est essentiel d'avoir un plus grand domaine afin d'éviter que les autres périodes aient un effet sur les résultats.

Pour la première situation observée, qui est l'étalement du paquet d'onde d'une particule stationnaire, on considère simplement un potentiel nul et, contrairement aux autres situations, un nombre d'onde nul, ce qui implique que la particule est au repos. La gaussienne initiale est également centrée à $x = 0$. Pour la propagation d'un paquet d'onde, on considère un potentiel nul avec une valeur non-nulle du nombre d'onde de l'ordre déterminé plus haut. La gaussienne initiale est alors centrée à $x = -50 \text{ \AA}$ afin de pouvoir mieux observer la propagation. Pour le saut de potentiel, on choisit un potentiel de la forme suivante :

$$V = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases}$$

où la valeur V_0 du potentiel a été choisie près de la valeur d'énergie de l'électron afin de pouvoir observer facilement les parties réfléchies et transmises du paquet d'onde. Comme pour la propagation libre, la gaussienne initiale est centrée à $x = -50 \text{ \AA}$. Pour la propagation dans un puits ou dans une barrière de potentiel, le potentiel suivant a été considéré :

$$V = \begin{cases} 0 & |x| > 50 \\ \pm V_0 & |x| \leq 50 \end{cases}$$

où la valeur positive correspond à une barrière et la valeur négative correspond à un puits, avec la même amplitude $V_0 = 6,24151 \text{ eV}$. Afin que la gaussienne initiale soit contenue dans la partie au potentiel nul, la gaussienne est centrée à $x = -80 \text{ Å}$ afin qu'elle se trouve initialement entièrement en dehors du puits ou de la barrière. Finalement, pour le potentiel harmonique, le potentiel utilisé est de la forme suivante :

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

où la valeur de ω optimale déterminée par tâtonnement afin que les oscillations soient facilement observables dans l'intervalle temporel de 80 fs. La valeur choisie est de $1 \times 10^{15} \text{ rad/s}$.

Finalement, une simulation a aussi été codée pour une particule alpha (un noyau d'hélium-4, soit deux protons et deux neutrons) se trouvant dans un noyau d'uranium-238. Cet isotope de l'uranium se décompose naturellement par désintégration α , et il est possible d'approximer le potentiel de la situation par un puits de potentiel sphérique de rayon $r \approx 1,2A^{1/3} \approx 7,44 \text{ fm}$, où A est le nombre de masse du noyau, suivi d'un potentiel coulombien de forme $V = k \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$, où k est la constante de Coulomb, e est la charge élémentaire et Z_n sont les nombres de protons des noyaux. On obtient donc un potentiel de la forme[1] :

$$V = \begin{cases} -1804,232 \text{ MeV} & |x| < 7,44 \text{ fm} \\ k \frac{2 \cdot 90 e^2}{x} \text{ MeV} & |x| \geq 7,44 \text{ fm} \end{cases}$$

Où $-1804,232 \text{ MeV}$ est l'énergie de liaison du noyau d'uranium 238 donnée par la formule semi-empirique [2] qu'on utilise comme approximation de la profondeur du puits de potentiel. Nous avons utilisé une valeur d'énergie d'environ 5 MeV pour la particule α , ce qui correspond environ à l'énergie de la particule lors d'une désintégration α [5]. Selon ces paramètres, il est possible en théorie que la particule α s'échappe par effet tunnel du noyau à une distance d'environ $|x| \approx 57,6 \text{ fm}$, puisque c'est à cette distance que le potentiel coulombien diminue en deçà de 5 MeV .

Résultats

Toutes les animations produites par les simulations des différentes situations sont disponibles sous format *.mp4* dans le dossier *animations* dans le même répertoire GitHub que le code.

Tout d'abord, pour l'étalement d'un paquet d'onde stationnaire, l'animation produite par la simulation pour une largeur initiale $\Delta x = 1 \text{ Å}$ est *etalement_1.mp4*. Des images tirées de l'animation sont présentées à la figure 1. On observe que la densité de probabilité consiste initialement en une gaussienne d'une largeur de 1 Å centrée en $x = 0$. La largeur de la gaussienne augmente ensuite avec le temps, en augmentant plus rapidement pour les petites valeurs de temps. La position du centre de la gaussienne reste à $x = 0$ pour toute la durée de la simulation. Ces résultats correspondent bien au comportement physique attendu d'un paquet d'onde représentant une particule immobile : la probabilité de présence domine à sa position initiale, mais étant donné l'incertitude sur la vitesse initiale la gaussienne s'étend spatialement. Une autre simulation d'étalement stationnaire a également été produite avec une largeur initiale $\Delta x = 5 \text{ Å}$. L'animation est disponible sous *etalement_2.mp4* et des images tirées de l'animation sont présentées à la figure 2. Le paquet d'onde a le

même comportement général que le paquet plus étroit, mais son étalement est significativement plus lent. Cela correspond aux prédictions, car, par le principe d'incertitude de Heisenberg, une incertitude spatiale plus élevée initialement permet une incertitude réduite sur la quantité de mouvement de la particule, ce qui causera un étalement plus lent de la densité de probabilité de présence. La méthode pseudo-spectrale génère donc les résultats attendus physiquement pour l'étalement d'un paquet d'onde stationnaire. Pour les simulations suivantes, une valeur de $\Delta x = 5 \text{ \AA}$ a été considérée, car un étalement moins rapide permet de mieux observer le comportement lié à la propagation du paquet d'onde.

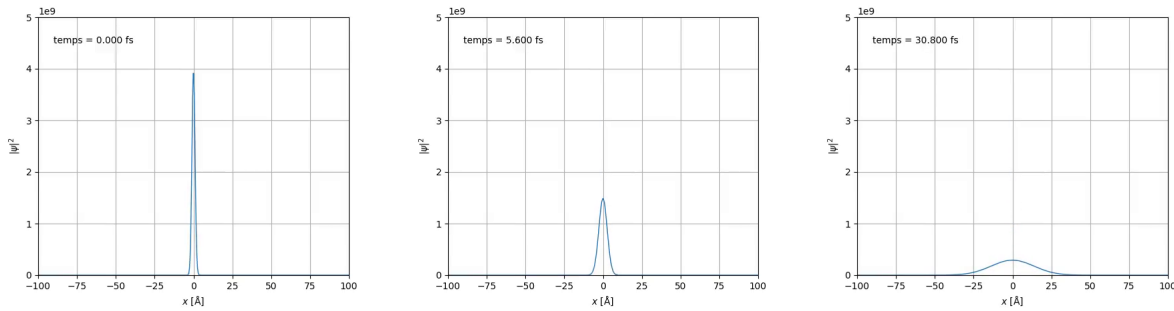


FIGURE 1 – Étalement d'un paquet d'onde stationnaire pour $x_0 = 1 \text{ \AA}$

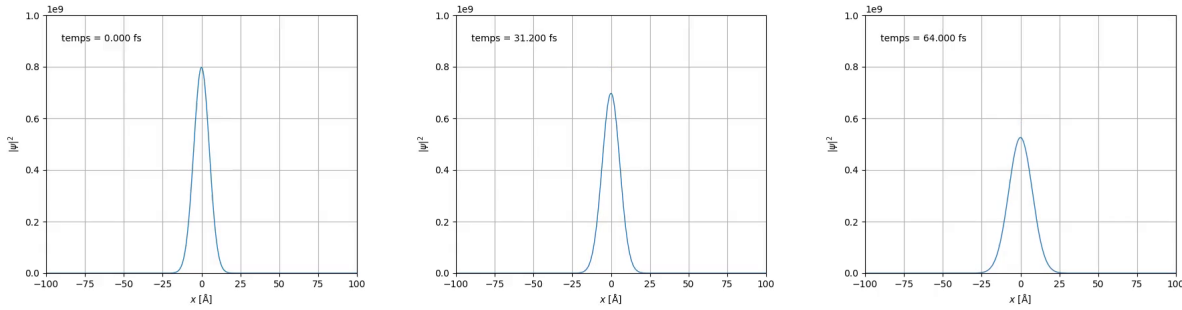


FIGURE 2 – Étalement d'un paquet d'onde stationnaire pour $x_0 = 5 \text{ \AA}$

Pour la propagation libre d'un paquet d'onde, l'animation générée par la simulation pour un nombre d'onde $k_0 = 1 \times 10 \text{ rad/m}$ est disponible sous le nom *propag_libre_1.mp4*. La figure 3 présente des images tirées de l'animation. Initialement, le paquet d'onde consiste en une gaussienne d'une largeur de 5 \AA centrée à $x = -50 \text{ \AA}$, ce qui correspond aux conditions initiales choisies pour cette situation. Le paquet d'onde s'étend ensuite de façon similaire au paquet d'onde stationnaire, mais le centre de la gaussienne se déplace à vitesse constante dans la direction des x positifs. La valeur constante et non-nulle de k_0 explique ce comportement, car celui-ci est directement relié à la vitesse de la particule par la longueur d'onde de de Broglie. Il est attendu qu'un paquet d'onde représentant la densité de probabilité de présence d'une particule qui se propage librement, donc à vitesse

constante, se déplace lui aussi à vitesse constante. La simulation de propagation libre a aussi été effectuée avec un nombre d'onde $k_0 = 5 \times 10$ rad/m. L'animation résultante est *propag_libre_2.mp4* et des images sont présentées à la figure 4. Le comportement général est similaire au paquet d'onde avec un nombre d'onde plus faible, mais le déplacement latéral est visiblement plus rapide. Cela correspond au comportement physique attendu, car un nombre d'onde plus grand représente une particule avec une vitesse plus grande, donc un déplacement latéral plus rapide du paquet d'onde. Les résultats générés par méthode pseudo-spectrale sont donc conformes aux attentes physiques liées à la propagation libre d'un paquet d'onde représentant une particule.

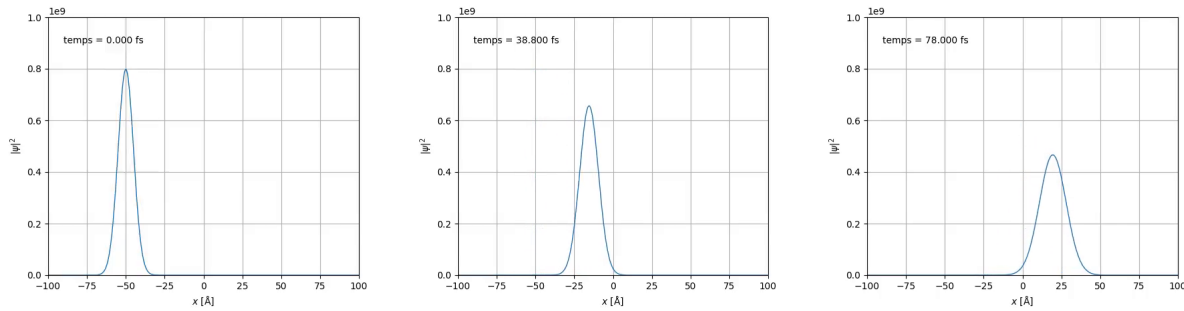


FIGURE 3 – Propagation libre d'un paquet d'onde pour $k_0 = 1 \times 10$ rad/m

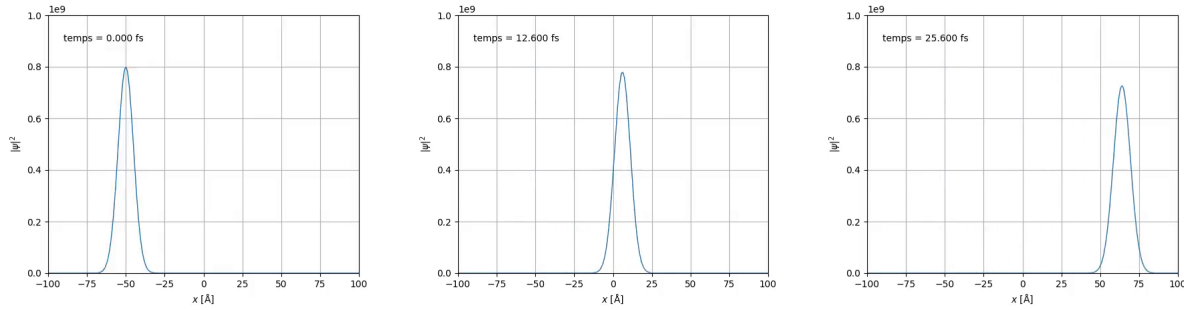
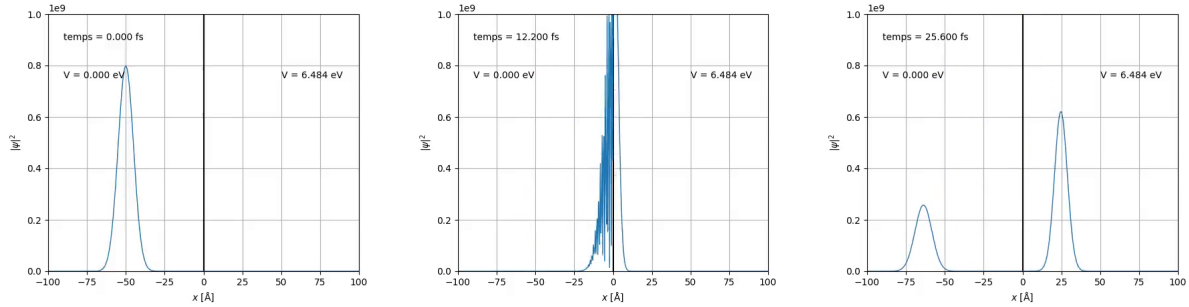
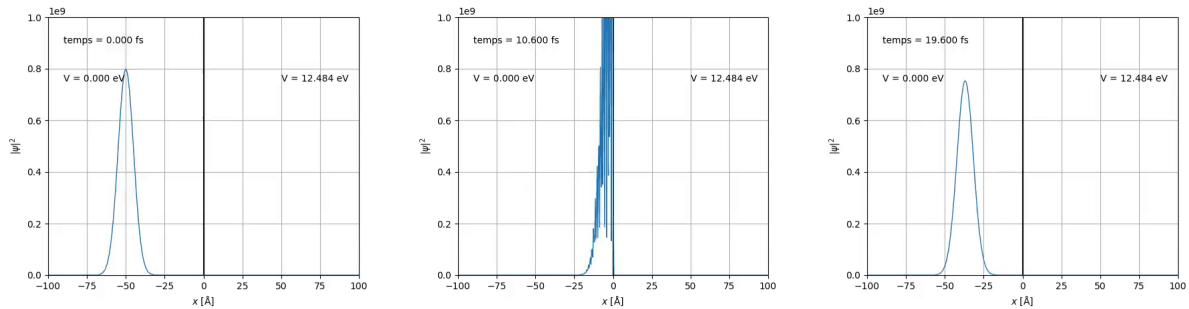


FIGURE 4 – Propagation libre d'un paquet d'onde pour $k_0 = 5 \times 10$ rad/m

En ce qui concerne la propagation vers un saut de potentiel, les simulations ont été effectuées avec un nombre d'onde $k_0 = 5 \times 10^{10}$ rad/m. L'animation générée par la simulation effectuée avec un potentiel $V_0 = 6,242$ eV est nommée *saut_pot_1.mp4* et des images tirées de l'animation sont présentées à la figure 5. Le comportement du paquet d'onde est initialement le même que dans le cas de la propagation libre. Lorsque celui-ci arrive à $x = 0$, il rencontre la marche de potentiel et se sépare en un paquet d'onde réfléchi et un paquet d'onde transmis. Lors de la séparation, de nombreuses et importantes oscillations non-physiques sont présentes. Ces oscillations sont dues au fait que la transformée de Fourier discrète ne comporte pas réellement une quantité infinie de fréquences afin de représenter l'évolution de la fonction. Les endroits où on retrouve une variation drastique

et rapide de la valeur de la fonction, comme à la séparation entre deux potentiels différents, ne peuvent donc pas être correctement représentés avec les fréquences disponibles. Pour remédier à ce problème, il faudrait donc effectuer la transformée de Fourier avec une plage de fréquences plus large et comprenant des fréquences plus élevées, mais cela implique un nombre de divisions spatiales plus grand puisque la plage de fréquence générée par *fftfreq* est inversement proportionnelle à l'espacement entre deux points, et requiert donc ultimement une puissance de calcul et une mémoire vive significativement plus grandes. Les simulations effectuées ici ne représentent donc pas bien le comportement à la limite entre les deux potentiels, mais représentent bien les ondes réfléchies et transmises. On peut donc calculer les coefficients de réflexion R et de transmission T en déterminant la proportion de la fonction qui est à gauche et à droite de $x = 0$. Pour $V_0 = 6,242$ eV, on obtient $R = 40,07\%$ et $T = 59,93\%$. La simulation a aussi été effectuée pour une marche de potentiel de $V_0 = 12,484$ eV. Le paquet d'onde incident semble alors être totalement réfléchi. On obtient bien un coefficient de réflexion $R \approx 100\%$ et $T \approx 10^{-13}\%$. Ces résultats concordent avec les résultats attendus physiquement, car, en augmentant la hauteur du saut de potentiel tout en gardant la même énergie cinétique de l'électron, celui-ci a moins de chances d'être transmis. Dans ce cas-ci, le potentiel est simplement trop haut et les chances que l'électron soit transmis sont pratiquement nulles. Somme toute, la méthode pseudo-spectrale représente donc bien le comportement de la propagation d'un paquet d'onde vers une marche de potentiel, mais seulement loin de la discontinuité de potentiel.

FIGURE 5 – Propagation vers un saut de potentiel pour $V_0 = 6,242$ eVFIGURE 6 – Propagation vers un saut de potentiel pour $V_0 = 12,484$ eV

Pour le puits de potentiel, l'animation générée par la simulation est disponible sous *puit_pot_1.mp4* et des images sont présentées à la figure 7. Comme pour le saut de potentiel, une valeur de $k_0 = 5 \times 10^{10}$ rad/m a été choisie. Le puits de potentiel possède un potentiel $V_0 = -6,242$ eV. Cette valeur a été choisie par tâtonnement afin que les parties transmises et réfléchies de chaque interface soient observables. Évidemment, le comportement du paquet d'onde est initialement celui de la propagation libre. Lorsque celui-ci rencontre le puits de potentiel, une partie du paquet d'onde est réfléchi et une partie du paquet d'onde est transmise. Le comportement est le même que dans le cas de la marche de potentiel. Le paquet d'onde transmis parcourt ensuite le puits de potentiel et rencontre la fin du puits, où une portion est réfléchi et reste dans le puits, tandis qu'un autre partie est transmise. Le paquet d'onde réfléchi effectue ensuite des réflexions consécutives sur les parois du puits en transmettant à chaque fois une partie à l'extérieur du puits. À chaque fois qu'un paquet d'onde rencontre une paroi du puits, les oscillations non physiques dues au manque de hautes fréquences dans l'espace Fourier sont observables. Excepté ces oscillations, les résultats concordent avec le comportement physique attendu, car un puits de potentiel n'est en fait que deux marches de potentiel successives.

Pour la barrière de potentiel, l'animation générée par la simulation est nommée *barr_pot_1.mp4* et des images sont présentées à la figure 8. Le potentiel de la barrière est $V_0 = 6,242$ eV et le nombre d'onde est le même que pour le puits. Le comportement général est le même que dans le cas du puits, sauf que le paquet d'onde transmis au début de la barrière est plus lent que dans le cas du puits. Cela est attendu car, par conservation de l'énergie, une énergie potentielle plus élevée cause une énergie cinétique plus faible, donc une vitesse plus faible. La portion du paquet d'onde qui est réfléchi à la fin de la barrière est également beaucoup plus faible que dans le cas du puits. Cela concorde avec le comportement physique, car un électron aura généralement plus de chances de rester confiné dans un puits de potentiel que dans une barrière de potentiel ; il est plus probable pour une particule de passer d'un milieu de haut potentiel vers un milieu de bas potentiel que l'inverse. Toutefois, le paquet d'onde réfléchi est ensuite trop faible pour pouvoir être bien distingué au sein des oscillations non physiques. Une autre simulation de barrière de potentiel a donc été effectuée avec les mêmes paramètres, mais avec 50 000 divisions spatiales au lieu de 5000 afin de tenter de minimiser l'impact des oscillations non physiques en considérant plus de hautes fréquences. L'animation résultante est *saut_potentiel_50k.mp4* et des images sont présentées à la figure 9.

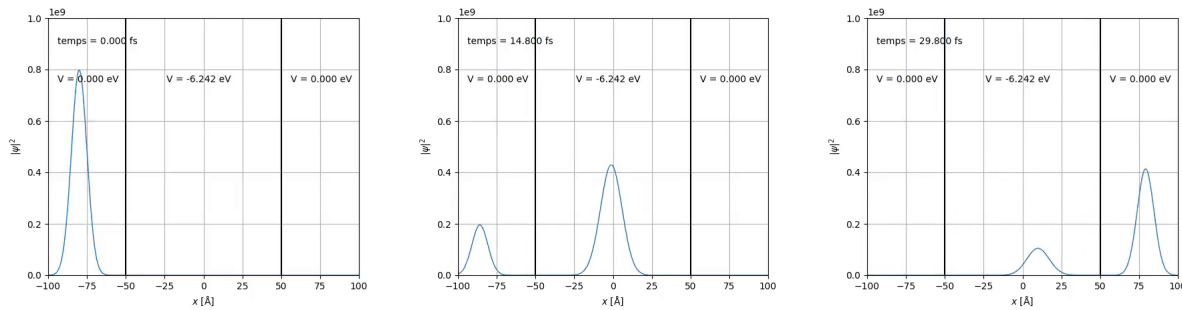


FIGURE 7 – Propagation vers un puits de potentiel

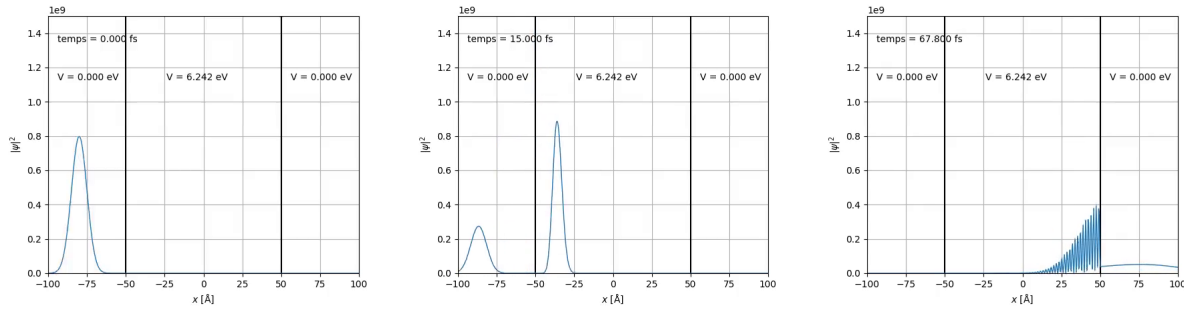


FIGURE 8 – Propagation vers une barrière de potentiel

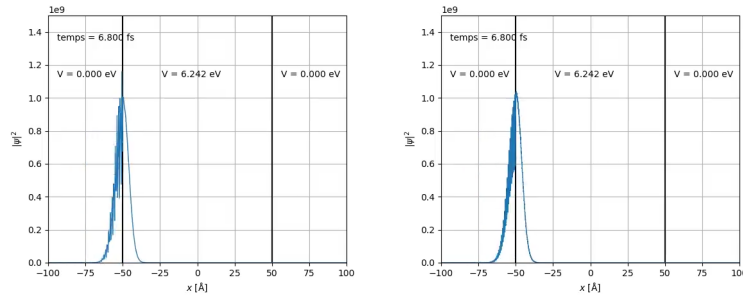


FIGURE 9 – Oscillations non physiques à 6,8 fs pour le cas avec 5000 divisions spatiales et le cas avec 50000 divisions spatiales

Comme mentionné, la plage de fréquences générée par *fftfreq* est inversement proportionnelle au nombre de divisions (pour un domaine identique), donc en générant un *linspace* avec 50000 divisions plutôt que 5000, nous avons accès à des fréquences jusqu'à 10 fois plus élevées dans le domaine de Fourier. Bien que la présence d'oscillations physiques soit toujours importante dans le cas avec 50000 divisions, les contours de la fonction d'onde semblent mieux définis et on remarque clairement la présence de fréquences plus élevées, comme attendu, comparativement au cas avec 5000 divisions où les oscillations non physiques semblent modulées par plusieurs fréquences distinctes. On serait donc porté à croire qu'augmenter la plage de fréquence nous permettrait éventuellement de disposer d'assez de fréquences élevées pour bien décrire la fonction d'onde à l'interface. Toutefois, ce calcul est long et nécessite une grande quantité de mémoire vive, donc il nous est impossible d'augmenter davantage le nombre de divisions. Lors de la génération de l'animation avec 50000 divisions, il faut au-dessus de 5 gigaoctets de mémoire vive seulement pour initialiser l'*array*, et jusqu'à plus de 15 gigaoctets au total pour générer l'animation, un processus qui dure généralement autour de 541 secondes alors qu'il n'en faut que 61 pour générer une animation à 5000 divisions. Il faut donc environ 9 fois plus de temps pour générer la seconde animation, ce qui est près du facteur 10 appliqué au nombre d'opérations. Étant donné que notre machine ne dispose que de 16 gigaoctets de mémoire vive, il serait difficile d'augmenter davantage le nombre de divisions sans faire augmenter drastiquement le temps de calcul. Généralement, les résultats obtenus pour un puits et une barrière de potentiel

concordent donc avec les attentes du comportement physique de la particule, excepté pour les oscillations causées par les variations discontinues de potentiel. Une plus grande puissance de calcul et une plus grande mémoire vive permettraient de minimiser grandement l'impact de ces oscillations.

Finalement, pour le potentiel quadratique, la simulation a d'abord été effectuée avec un nombre d'onde $k_0 = 1 \times 10^{10}$ rad/m. Aussi, comme l'étalement peut être intéressant à observer dans cette situation, une largeur initiale $\Delta x = 1$ Å a été utilisée. L'animation produite est *parabolique_1.mp4* et des images sont présentées à la figure 10. Le comportement général est une oscillation harmonique du paquet d'onde avec un plus grand étalement lorsque celui-ci s'éloigne de $x = 0$. L'oscillation harmonique est évidemment le comportement attendu pour une particule dans un puits quadratique. La variation d'étalement du paquet d'onde est due au fait que, comme les différentes valeurs de quantité de mouvement vont toutes osciller à la même fréquence dans le puits de potentiel quadratique, les différentes trajectoires vont être plus rapprochées entre elles au centre du puits. C'est pourquoi on retrouve exactement la forme de la gaussienne initiale au centre du puits à chaque oscillation et que celle-ci est plus étendue aux extrémités du mouvement. On peut aussi expliquer cette variation simplement par le principe d'incertitude de Heisenberg, car l'incertitude sur la quantité de mouvement sera plus petite loin du centre du puits. Contrairement aux situations où on retrouvait un saut discontinu de potentiel, les oscillations non physiques ne sont pas présentes dans le cas du puits quadratique. Comme il n'y a pas de discontinuité dans le potentiel, moins de hautes fréquences sont nécessaires dans l'espace de Fourier afin de bien représenter la fonction. De plus, comme le puits quadratique est infini, aucune portion du paquet d'onde ne peut s'échapper du puits, ce qui concorde avec le comportement obtenu. La simulation a également été effectuée pour une valeur de nombre d'onde $k_0 = 5 \times 10^{10}$ rad/m. L'animation produite est *parabolique_2* et les images sont présentées à la figure 11. Comparé au cas où k_0 est plus faible, on observe que l'oscillation du paquet d'onde a la même fréquence, mais son amplitude est plus grande. C'est bien le comportement attendu pour une particule, car, en augmentant k_0 , on augmente son énergie cinétique et donc son énergie totale. L'amplitude de son mouvement est donc plus grande, mais sa fréquence reste constante. La méthode pseudo-spectrale génère donc les résultats attendus physiquement dans le cas d'une particule dans un potentiel quadratique.

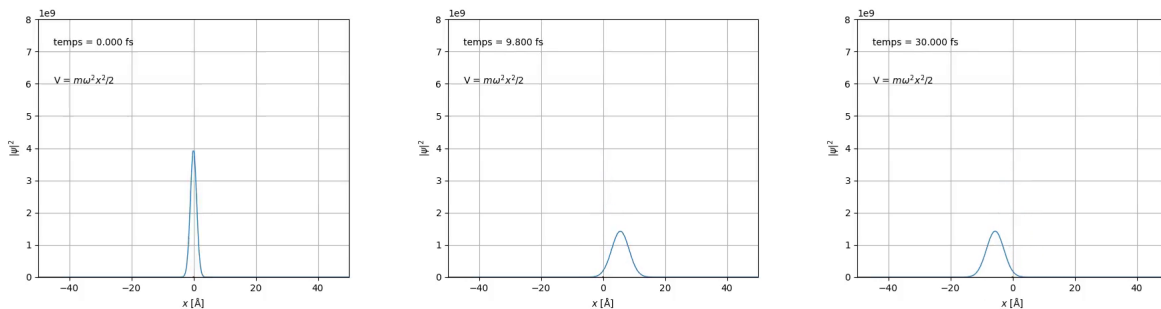
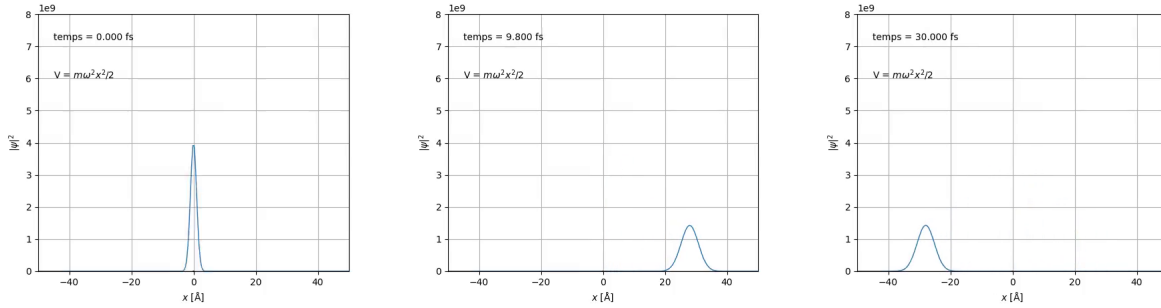


FIGURE 10 – Puits de potentiel quadratique avec $k_0 = 1 \times 10^{10}$ rad/m

FIGURE 11 – Puits de potentiel quadratique avec $k_0 = 5 \times 10^{10}$ rad/m

Un essai a été fait pour la particule alpha avec les paramètres décrits plus haut afin de simuler le comportement d'une désintégration alpha. la particule alpha s'étale initialement dans le potentiel potentiel sphérique sans problème, mais énormément d'oscillations non physiques apparaissent dès qu'elle touche la discontinuité, et la fonction d'onde diverge très rapidement ; il faut moins d'une attoseconde pour que la fonction d'onde n'ait plus l'air que de bruit, et il n'y a à peu près pas d'oscillation transmise visible. L'animation produite est disponible sous *alpha_5k.mp4* et des images tirées de celle-ci sont présentées à la figure 12.

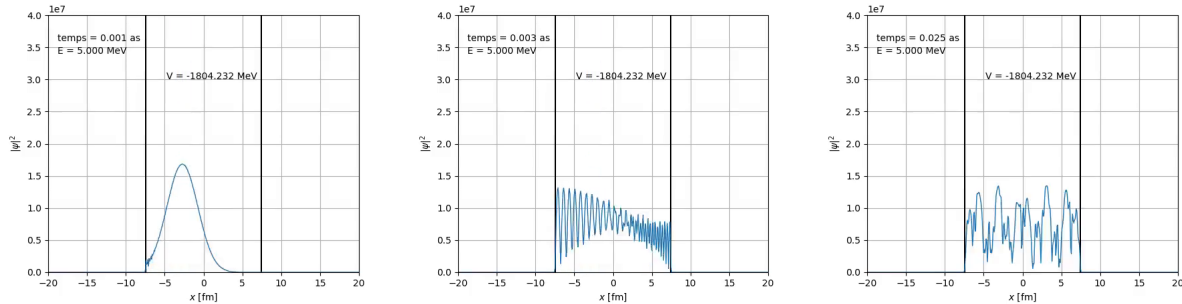


FIGURE 12 – Particule alpha dans un noyau d'uranium 238

Même lorsqu'on approche le puits de potentiel et la barrière de Coulomb de la valeur d'énergie de 5 MeV, les résultats ne sont pas beaucoup meilleurs ; on constate bien quelques petites oscillations transmises à l'extérieur du noyau, mais elles sont minimales et la fonction d'onde diverge tout de même très rapidement. Nous avons aussi tenté de générer l'animation avec 50000 divisions spatiales comme précédemment, mais cette fois le résultat est pire : beaucoup d'oscillations non physiques sont présentes à l'extérieur du noyau dès que la fonction d'onde approche le potentiel coulombien. L'animation est disponible sous *alpha_50k.mp4*.

On retire plusieurs conclusions de cet échec de la méthode pseudo-spectrale. D'abord, elle n'est pas appropriée pour les problèmes comme ceux de la désintégration alpha où il y a des différences

drastiques de potentiel. Dans les cas précédents, des oscillations non physiques apparaissaient aux discontinuités de potentiel même avec une différence de quelques eV . Ici, alors qu'il y a une différence de quelques milliers d' eV au moins et plus d'un millier de MeV au plus, on constate que le changement est si drastique que la solution devient très rapidement envahie par les oscillations non physiques. Il faudrait ici diviser notre espace encore plus finement que pour les cas précédents, ce qui, comme mentionné, demanderait une grande puissance de calcul dont nous ne disposons pas. La simulation aurait potentiellement donné des résultats plus cohérents avec un noyau léger étant donné que la marche de potentiel aurait été plus basse, mais l'intérêt de cette simulation aurait été limitée étant donné que seules les particules lourdes se désintègrent par désintégration alpha. De plus, le fait de travailler ici à très petite échelle fait ressortir l'un des inconvénients inhérent à la transformée de Fourier, soit le calcul de celle-ci en période. Comme nous avons mentionné, étant donné que la transformée de Fourier "périodise" le signal afin d'effectuer les calculs, on doit s'assurer de faire la démarche sur un domaine large même si nous nous intéressons seulement à une petite partie de celui-ci. Ici, ce problème était bien présent : il a fallu étudier un domaine très large par rapport à la zone où l'effet tunnel aurait pu se produire étant donné que les autres périodes avaient un effet considérable sur le domaine d'intérêt. On voyait en effet des oscillations à l'extérieur du noyau avant même que la fonction d'onde n'atteigne la discontinuité. Il a donc fallu augmenter le domaine de calcul, ce qui augmente évidemment le coût en puissance de calcul et le temps nécessaire considérablement, étant donné que pour conserver la même précision il faut augmenter proportionnellement le nombre de divisions de l'espace. Finalement, nous avons aussi précédemment mentionné que la méthode pseudo-spectrale est précise loin des discontinuités ; ici, étant donné que le noyau atomique est de l'ordre du femtomètre, tout comme la particule alpha, la fonction d'onde n'est jamais loin de la discontinuité. La méthode pseudo-spectrale ne semble donc pas tout à fait appropriée pour étudier une situation telle que la désintégration alpha.

Conclusion

Les résultats produits par les différentes simulations montrent que la méthode pseudo-spectrale produit généralement des comportements qui concordent avec les comportements physiques attendus. Toutefois, les simulations du projet ne comportaient pas assez de hautes fréquences dans le domaine de Fourier afin de pouvoir bien représenter les fonctions d'onde aux endroits où le potentiel est discontinu. Ce problème est observable par les oscillations non physiques présentes dans le saut de potentiel, le puits de potentiel, la barrière de potentiel et la particule alpha près des discontinuités. Augmenter le nombre de hautes fréquences dans l'espace de Fourier aurait nécessité d'augmenter de manière significative la densité de tranches spatiales, ce qui aurait nécessité une puissance de calcul significativement plus grande afin d'obtenir les résultats dans un temps raisonnable. Comme elles ne comportent pas de discontinuité, les simulations d'étalement stationnaire, de propagation libre et de potentiel quadratique représentent bien le comportement attendu en tout point. On peut donc conclure que la méthode pseudo-spectrale permet d'obtenir des résultats fiables loin des discontinuités à un faible coût computationnel et avec une implémentation simple. De plus, la méthode pseudo-spectrale est moins appropriée dans les situations où la taille de la fonction d'onde est de la même ordre que le puits de potentiel, que le puits de potentiel est très profond ou lorsque les périodes sont courtes, comme montré par le cas de la particule alpha.

Il serait pertinent de refaire le projet avec une puissance de calcul plus grande afin de déterminer à quel point la méthode pseudo-spectrale peut représenter correctement le comportement aux discontinuités. Il serait également pertinent d'étudier si la méthode pseudo-spectrale peut être appliquée à des cas plus complexes, comme des cas où les effets relativistes sont considérés ou des cas où le potentiel varie dans le temps.

Références

- ¹P. D'ALESSANDRIS, « Spiral Modern Physics », in (2021) chap. 7.1 : The Simplified Nuclear Potential Well, consulté en ligne : [https://phys.libretexts.org/Bookshelves/Modern_Physics/Book%3A_Spiral_Modern_Physics_\(D'Alessandris\)/7%3A_Nuclear_Physics/7.1%3A_The_Simplified_Nuclear_Potential_Well](https://phys.libretexts.org/Bookshelves/Modern_Physics/Book%3A_Spiral_Modern_Physics_(D'Alessandris)/7%3A_Nuclear_Physics/7.1%3A_The_Simplified_Nuclear_Potential_Well).
- ²H. MARTEL, *PHY-2007 — Module 20 - Noyaux complexes. Formule semi-empirique*, 2022.
- ³M. NEWMAN, *Computational Physics - Revised and Expanded* (2013).
- ⁴RADIO-CANADA, *Les grandes révolutions scientifiques : Quantique, le monde déroutant de l'infiniment petit*, https://ici.radio-canada.ca/actualite/decouverte/dossiers/revolutions/dossiers/quantique/5a_14.html.
- ⁵WIKIPEDIA, *Alpha particle* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*, <http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Plagiarism&oldid=1084150094>, [En ligne ; consulté le 23 avril 2022], 2022.