

Physique Numérique I-II – Exercice 8

à rendre jusqu'au **vendredi 31 mai 2019 à 23h55** sur le site
<http://moodle.epfl.ch/mod/assign/view.php?id=830169>

8 Mécanique Quantique : oscillateur harmonique, oscillateurs harmoniques couplés, effet tunnel, principe d'incertitude et détection de particule.

On étudie, dans le cadre de la mécanique quantique, la propagation d'une particule de masse m soumise à un potentiel V unidimensionnel donné par :

$$V(x) = \min \left(\frac{1}{2} m \omega^2 (x - \Delta)^2, \frac{1}{2} m \omega^2 (x + \Delta)^2 \right) \quad (1)$$

Le domaine est $x \in [x_L, x_R]$, avec des conditions aux limites de type bords fixes. Dans tout cet exercice, on choisira des unités normalisées de telle sorte que $\hbar = 1$ et $m = 1$. Les paramètres x_L , x_R , ω et Δ sont des nombres donnés.

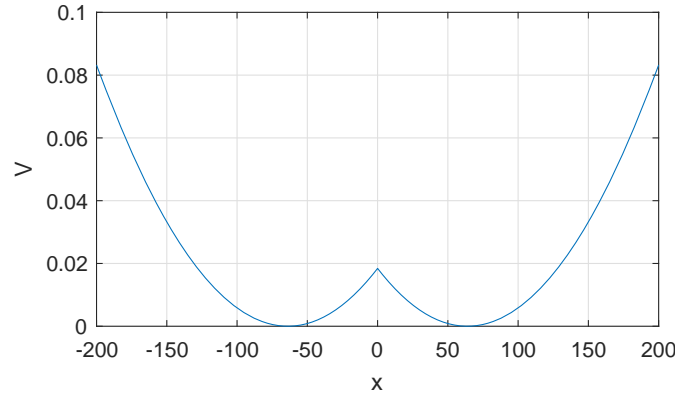


FIGURE 1 – Potentiel $V(x)$ avec $x_R = -x_L = 200$, $\omega = 0.003$, et $\Delta = 64$

La particule est initialement décrite par un paquet d'onde d'enveloppe Gaussienne (Eq.(4.107) des notes de cours), centrée en $x = x_0$, d'écart-type $\sigma_0 = \sigma_{norm}(x_R - x_L)$, et avec un nombre d'onde central $k_0 = 2\pi n/(x_R - x_L)$, où x_0 , σ_{norm} et n sont des nombres donnés.

Classiquement, on sait qu'une particule initialement située dans le creux de gauche ($x < 0$) va rester dans la partie gauche si son énergie est inférieure à la hauteur de la barrière $V(x = 0)$. Sinon, elle passe du creux de gauche au creux de droite et vice-versa au cours de son mouvement. Nous allons voir que la description quantique donne des résultats bien différents.

Le but de cet exercice est de résoudre numériquement l'équation de Schrödinger, Eq.(4.74) du cours, en se basant sur le schéma semi-implicite, Eq.(4.83), discrétisé avec des différences finies spatiales sur un maillage régulier, Eqs.(A.7) et (4.92-4.93).

8.1 Programmation et Simulations

1. [10pts]

Télécharger et étudier le code [Exercice8.zip](#). Pour faciliter le calcul avec des nombres complexes, la librairie `complex` de C++ est utilisée.

Le programme attend comme paramètres d'entrée x_L , x_R , ω et Δ définissant le potentiel, x_0 , σ_{norm} et n définissant la fonction d'onde initiale, le nombre d'intervalles du maillage N_{inters} , le pas de temps Δt , et le temps final t_{fin} .

Compléter l'algorithme semi-implicite et implémenter quelques observables physiques. Cette partie inclut notamment les étapes suivantes :

- (i) la construction et l'écriture des matrices H , A et B en incluant les conditions aux limites $\psi(x_L, t) = \psi(x_R, t) = 0 \forall t$ dans les matrices A et B .
- (ii) l'écriture de la fonction d'onde initiale et sa normalisation (en intégrant numériquement la probabilité totale),
- (iii) le calcul des probabilités qu'on trouve la particule à gauche $P_{x<0}(t)$, respectivement à droite de la barrière $P_{x>0}(t)$,
- (iv) le calcul de l'énergie de la particule, moyenne de l'Hamiltonien :

$$E(t) = \langle H \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x, t) H(x) \psi(x, t) dx \quad (2)$$

Indication : pour toutes les intégrales selon x , utiliser la règle des trapèzes.

- (v) le calcul de la position moyenne de la particule $\langle x \rangle(t)$:

$$\langle x \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx \quad (3)$$

- (vi) le calcul du x^2 moyen de la particule $\langle x^2 \rangle(t)$:

$$\langle x^2 \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x, t) x^2 \psi(x, t) dx \quad (4)$$

- (vii) le calcul de la quantité de mouvement moyenne de la particule $\langle p \rangle(t)$:

$$\langle p \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right) dx \quad (5)$$

Indication : prendre les différences finies centrées, $(\partial \psi / \partial x)_i = (\psi_{i+1} - \psi_{i-1}) / (2\Delta x)$, où Δx est la distance entre deux points de maillage, pour tous les points intérieurs. Pour les points de maillage des extrémités gauche et droite du domaine, prendre les différences finies "forward" et "backward", respectivement.

- (viii) le calcul du p^2 moyen de la particule $\langle p^2 \rangle(t)$:

$$\langle p^2 \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x, t) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \right) dx \quad (6)$$

Indication : prendre les différences finies centrées, $(\partial^2 \psi / \partial x^2)_i = (\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}) / (\Delta x^2)$, pour tous les points intérieurs. Pour les points de maillage des extrémités gauche et droite du domaine, mettre 0.

(ix) le calcul des incertitudes de la position et de la quantité de mouvement :

$$\langle \Delta x \rangle(t) = \sqrt{\langle x^2 \rangle(t) - \langle x \rangle^2(t)} \quad (7)$$

$$\langle \Delta p \rangle(t) = \sqrt{\langle p^2 \rangle(t) - \langle p \rangle^2(t)} \quad (8)$$

N.B. : Votre rapport doit contenir une brève description de l'implémentation des points ci-dessus.

2. Ensuite, effectuer les simulations suivantes :

- (i) **[10pts] Test de l'algorithme dans le cas de l'oscillateur harmonique :** On prend $x_L = -200$, $x_R = 200$, $\omega = 0.003$, $\Delta = 0$, $x_0 = 0$, $\sigma_{norm} = 0.06$, $n = 14$, et $t_{fin} = 5000$.

Prendre $N_{inters} = 300$ et effectuer une étude de convergence en variant Δt . Regarder notamment la convergence de la position moyenne $\langle x \rangle(t)$, de la quantité de mouvement moyenne $\langle p \rangle(t)$ et des incertitudes $\langle \Delta x \rangle(t)$ et $\langle \Delta p \rangle(t)$.

Vérifier que la probabilité totale $P_{x<0}(t) + P_{x>0}(t)$ est bien égale à 1 au cours de la simulation.

Vérifier que l'énergie moyenne, $E(t)$, est conservée.

Vérifier que le principe d'incertitude de Heisenberg est satisfait :

$$\langle \Delta x \rangle(t) \cdot \langle \Delta p \rangle(t) \gtrsim \hbar/2 \quad \forall t \quad (9)$$

- (ii) **[5pts] Analyse du mouvement moyen de la particule et comparaison avec le cas classique :** Toujours pour le cas de l'oscillateur harmonique, $\Delta = 0$, comparer la position et de la quantité de mouvement moyennes de la particule, $\langle x \rangle(t)$ et $\langle p \rangle(t)$, avec le résultat classique qu'on obtient en résolvant les équations de la dynamique Newtonienne d'une particule d'énergie totale E dans le potentiel $V(x)$.

- (iii) **[10pts] Effet tunnel :** Maintenant, on regarde ce qui se passe quand on modifie la hauteur de la barrière de potentiel $V_0 = V(x = 0)$ par rapport à l'énergie de la particule E . En faisant varier le paramètre Δ , tout en initialisant la particule avec $x_0 = -\Delta$, illustrer l'évolution de la fonction d'onde $|\psi(x, t)|^2$ dans les trois cas suivants : $E > V_0$, $E \approx V_0$, et $E < V_0$. Tracer également $P_{x<0}(t)$ et $P_{x>0}(t)$ dans chacun des cas et discuter les résultats.

Pour $\Delta = 64$, trouver la valeur de n pour que la probabilité de transmission (c'est-à-dire la probabilité que la particule passe de gauche à droite après un passage) soit le plus proche possible de $1/2$.

- (iv) **[10pts] Détection ou non de la particule :**

On place un détecteur de particules dans la partie droite ($0 \leq x \leq x_R$). Si, en $t = t_{detect}$, celui-ci signale la présence de la particule, le paquet d'onde est alors instantanément "réduit" : la fonction d'onde $\psi(x, t_{detect})$ est nulle partout où on sait qu'elle n'est pas présente ($x_L \leq x \leq 0$). La partie $0 \leq x \leq x_R$ garde la même forme, mais est renormalisée : $\int_0^{x_R} |\psi(x, t_{detect})|^2 dx = 1$, ce qui signifie que la particule est dans l'intervalle $[0, x_R]$ avec une probabilité 1.

En prenant $\Delta = 64$ et la valeur de n calculée à la question (iii) telle que la particule ait une probabilité de transmission de $1/2$, simuler jusqu'à $t_{fin} = 5000$:

- (a) dans le cas où on ne détecte pas la particule (ni à droite ni à gauche),
- (b) dans le cas où on détecte la particule en $t = t_{detect} = 1000$.

Calculer la probabilité de trouver la particule à gauche ou à droite de la barrière au temps $t = 3000$, dans les deux cas ci-dessus (sans, respectivement avec détection de la particule).

Observer et décrire ce qui se passe au moment de la détection, en particulier comment la position moyenne $\langle x \rangle$, la quantité de mouvement moyenne $\langle p \rangle$, l'énergie moyenne $\langle H \rangle$, ainsi que les incertitudes $\langle \Delta x \rangle$ et $\langle \Delta p \rangle$ changent (ou non).

3. Suppléments facultatifs :

- Changer la forme du potentiel.
- Changer la fonction d'onde initiale. En particulier, dans le cas $\Delta = 0$, choisir σ de sorte à initialiser un état quasi-classique (Eq.(4.122) des notes de cours) et vérifier que $\langle \Delta x \rangle(t)$ reste constant.
- Changer la taille et la position du détecteur de particules.
- Rajouter d'autres détecteurs de particules.

8.2 Rédaction du rapport en L^AT_EX

Rédiger un rapport dans lequel les résultats des calculs analytiques, des simulations ainsi que les réponses aux questions ci-dessus sont présentés et discutés en détail.

N.B. On trouve plusieurs documents L^AT_EX (introduction, exemples, références) dans un dossier spécifique sur Moodle ([Dossier L^AT_EX](#)).

8.3 Soumission du rapport en format pdf et du fichier source C++

- (a) Préparer le fichier source L^AT_EX du rapport [RapportExercice8_Nom1_Nom2.tex](#)
- (b) Préparer le fichier du rapport en format pdf [RapportExercice8_Nom1_Nom2.pdf](#)
- (c) Préparer le fichier source C++ [Exercice8_Nom1_Nom2.cpp](#)
- (d) Préparer le fichier source Matlab [AnalyseExercice8_Nom1_Nom2.m](#)
- (e) Déposer les fichiers sur Moodle avec [ce lien](#).