École Polytechnique Fédérale de Lausanne 15 mai 2024
Semestre de printemps 2024
Prof. Laurent Villard
Dr Giovanni Di Giannatale

Physique Numérique – Exercice 6

à rendre jusqu'au mercredi 29 mai 2024 sur le site
https://moodle.epfl.ch/mod/assign/view.php?id=1174657

6 Schéma de Crank-Nicolson. Equation de Schrödinger. Effet tunnel.

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

$$V(x) = \frac{1}{2} V_0 \left(1 + \cos\left(2\pi n_V \frac{x - x_L}{x_R - x_L}\right)\right) \tag{1}$$

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, et n_V sont des nombres donnés. On pose $L = x_R - x_L$.

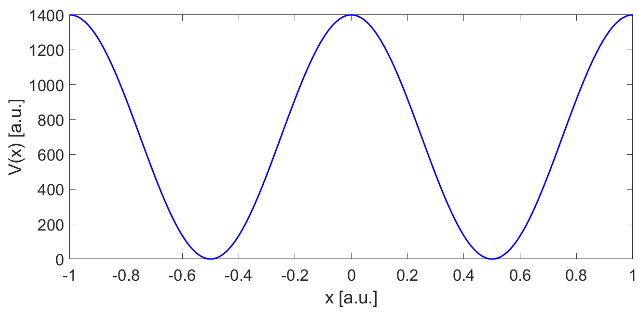

Figure 1 – Potentiel $V(x)$.

La particule est initialement décrite par un paquet d'onde d'enveloppe Gaussienne, Eq.(4.116) des notes de cours :

$$\psi(x, 0) = C \exp(ik_0 x) \exp[-(x - x_0)^2/(2\sigma^2)] \ , \quad k_0 = n2\pi/L \ , \tag{2}$$

centrée en $x = x_0$, d'écart-type $\sigma = \sigma_{norm} L$, et avec un nombre d'onde central $k_0 = 2\pi n/L$, où x_0, σ_{norm} et n sont des nombres donnés. La constante C sera calculée numériquement de telle sorte que la probabilité initiale totale soit égale à 1 :

$$\int_{x_L}^{x_R} |\psi(x, 0)|^2 dx = 1 \ , \tag{3}$$

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_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.(4.79) du cours, en se basant sur le schéma semi-implicite, Eq.(4.90), discrétisé avec des différences finies spatiales sur un maillage régulier, voir Eqs.(A.7) et (4.99-4.100).

6.1 Formulation et Programmation [10pts]

Télécharger et étudier le code Exercice6_2024_student.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, définissant le domaine ; V_0, n_V définissant le potentiel ; x_0, σ_{norm} et n définissant la fonction d'onde initiale ; le nombre d'intervalles du maillage n_x, le pas de temps Δt, et le temps final t_{fin}, définissant les paramètres numériques.

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, Eqs.(2, 3) ;

(iii) le calcul des probabilités qu'on trouve la particule à gauche $P_{x<x_c}(t)$, respectivement à droite de la barrière $P_{x>x_c}(t)$, avec x_c le maximum local du potentiel ;

(iv) le calcul de l'énergie de la particule, moyenne de l'Hamiltonien :

$$E(t) = \langle H \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x,t) H(x) \psi(x,t) \mathrm{d}x \ ; \tag{4}$$

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

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

$$\langle x \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x,t) x \psi(x,t) \mathrm{d}x \ ; \tag{5}$$

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

$$\langle x^2 \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x,t) x^2 \psi(x,t) \mathrm{d}x \ ; \tag{6}$$

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

$$\langle p \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} \right) \mathrm{d}x \ ; \tag{7}$$

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 $\langle p^2 \rangle(t)$:

$$\langle p^2 \rangle(t) = \int_{x_L}^{x_R} \psi^*(x,t) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \right) \mathrm{d}x \ ; \tag{8}$$

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 :

$$\langle\Delta x\rangle(t) = \sqrt{\langle x^2\rangle(t) - \langle x\rangle^2(t)}\ ; \tag{9}$$

$$\langle\Delta p\rangle(t) = \sqrt{\langle p^2\rangle(t) - \langle p\rangle^2(t)}\ . \tag{10}$$

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

La résolution du système algébrique linéaire $A\Psi_{t+\Delta t} = B\Psi_t$ (voir Notes de Cours après l'Eq.(4.100)), est déjà programmée dans le code C++.

6.2 Simulations

(i) **[15pts] Test de l'algorithme dans le cas $V_0 = 0$:** On prend $x_L = -1$, $x_R = 1$, $x_0 = -0.5$, $\sigma_{norm} = 0.04$, $n = 16$, et $t_{\text{fin}} = 0.1$. Pour les paramètres numériques, on prendra $n_x = 256$, $\Delta t = 10^{-4}$, sauf indication contraire

- **[6pts]** Illustrer la propagation de la particule : représenter les quantités suivantes : $\langle x\rangle(t)$, $\langle p\rangle(t)$, $\Delta x(t)$, $\Delta p(t)$, $Re(\psi(x,t))$ et $|\psi(x,t)|$. Décrire la différence entre vitesse de phase et vitesse de groupe, et ce qui se passe lorsque la particule arrive proche des extrémités.
- **[5pts]** Comparer $\langle x\rangle(t)$ avec le mouvement qu'aurait une particule classique de même énergie initiale. Faire de même, mais pour une particule classique de même quantité de mouvement initiale. (N.B. : plus exactement, l'égalité est avec les valeurs moyennes de la particule quantique).
- **[4pts]** Vérifier si la probabilité totale reste toujours égale à 1, et si la valeur moyenne de l'énergie (Hamiltonien) reste constante. Vérifier que le principe d'incertitude de Heisenberg est satisfait :

$$\langle\Delta x\rangle(t)\cdot\langle\Delta p\rangle(t) \gtrsim \hbar/2, \quad \forall t. \tag{11}$$

(ii) **[20pts] Effet tunnel :** Maintenant, on considère $V_0 \neq 0$ et $n_V = 2$. La fonction d'onde initiale est la même que dans la partie précédente.

- **[8pts]** Illuster l'évolution de la fonction d'onde $|\psi(x,t)|$ dans trois cas représentatifs suivants : $V_0 > \langle E\rangle$, $V_0 \approx \langle E\rangle$, et $V_0 < \langle E\rangle$. Tracer également $P_{x<0}(t)$ et $P_{x>0}(t)$ dans chacun des cas et discuter les résultats, notamment encomparant qualitativement avec le résultat qu'on attendrait de la mécanique classique.
- **[4pts]** Choisir $\Delta t = 10^{-4}$ et faire une étude de convergence numérique avec le nombre de points de maillage n_x pour la probabilité de transmission $P_{x>0}(t)$ au temps $t = 0.03$.
- **[4pts]** Choisir $n_x = 512$ et faire une étude de convergence numérique avec le pas de temps Δt pour la probabilité de transmission $P_{x>0}(t)$ au temps $t = 0.03$.
- **[4pts]** On définit la probabilité de transmission de la particule, $P_{x>0}(t_{\text{trans}})$, en choisissant un temps $t_{\text{trans}} \approx 0.03$ tel que le paquet d'onde initial se soit scindé en deux paquets distincts. Calculer P_{trans} pour différentes valeurs de V_0 et représenter les résultats en fonction de $\langle E\rangle/V_0$.

6.3 Suppléments facultatifs

- Détecteur de particule. On considère le cas $V_0 = 1400$. On place un détecteur de particules dans la partie droite du système. Si, en $t = t_{\text{detect}}$, celui-ci signale la présence de la particule, le paquet d'onde est alors instantanément “réduit” : la fonction d'onde $\psi(x, t_{\text{detect}})$

est alors subitement multiplié par un fonction $f(x)$: $\hat{\psi}(x, t_{\text{detect}}) = f(x)\psi(x, t_{\text{detect}})$, avec

$$f(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ \sin^2\left(\frac{\pi x}{2x_{da}}\right) & 0 \le x < x_{da} \\ 1 & x_{da} \le x < x_{db} \\ \cos^2\left(\frac{\pi(x-x_{db})}{2(x_R-x_{db})}\right) & x_{db} \le x < x_R \end{cases} \tag{12}$$

puis est renormalisée, i.e. multipliée par un facteur constant C, $\tilde{\psi}(x, t_{\text{detect}}) = C\hat{\psi}(x, t_{\text{detect}})$ tel que $\int_{x_L}^{x_R} |\tilde{\psi}(x, t_{\text{detect}})|^2 \mathrm{d}x = 1$. (La particule ne ne désintègre pas, elle existe avec une probabilité 1 après détection.)

Effectuer des simulations jusqu'à $t_{\text{fin}} = 0.1$:

(a) dans le cas où on ne détecte pas la particule,

(b) dans le cas où on détecte la particule en $t = t_{\text{detect}} = 0.03$.

Comparer les résultats des deux cas, en particulier, la position moyenne $\langle x\rangle(t)$, la quantité de mouvement moyenne $\langle p\rangle(t)$, l'énergie moyenne $\langle H\rangle(t)$, ainsi que les incertitudes $\langle \Delta x\rangle(t)$ et $\langle \Delta p\rangle(t)$. Décrire ce qui se passe lors de la détection.

Quelle est la probabilité de trouver la particule à gauche ou à droite de la barrière au temps $t = 1000$, dans les deux cas ci-dessus (sans, respectivement avec détection de la particule) ?

— 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.(4.124) des notes de cours) et vérifier que $\langle \Delta x\rangle(t)$ reste constant.

6.4 Rédaction du rapport en LaTeX

Rédiger un rapport de **maximum 10 pages, figures comprises,** répondant aux questions ci-dessus sont présentées et discutées.

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

(a) Préparer le fichier du rapport en format `pdf` `RapportExercice6_Nom1_Nom2.pdf`

(b) Préparer le fichier source C++ `Exercice6_Nom1_Nom2.cpp`

(c) Déposer les fichiers sur Moodle avec ce lien.

En plus des points attribués ci-dessus pour les différentes parties de l'exercice, **[5pts]** sont attribués à la qualité générale et la participation.