Soit  $\vec{u}(r)$  la vitesse, indépendante de t, de la particule de fluide présente au point  $(r, \theta)$ , l'axe polaire étant défini suivant la direction asymptotique du fluide. Un modèle élémentaire prévoit pour  $\vec{u}$  les composantes polaires

$$u_r = \left(1 - \frac{1}{r^2}\right)\cos(\theta) \tag{13}$$

$$u_{\theta} = \frac{-2C}{r} - (1 + \frac{1}{r^2})\sin(\theta) \tag{14}$$

où C, paramètre positif, est proportionnel à la vitesse angulaire imposée au mât. Noter que C est le seul paramètre, cela résulte de l'utilisation de variables non-dimensionnées. On peut vérifier que les points de vitesse nulle sont donnés par

$$0 < C < 1: \quad r = 1 \\ C > 1: \quad r = C + \sqrt{C^2 - 1} \quad \theta \epsilon [\theta_0, -\pi - \theta_0] \quad \text{avec} \quad C = -\sin(\theta_0)$$
 (15)

On devra intégrer en premier lieu l'équation différentielle donnant les lignes de courant ou, ce qui revient au même pour un tel cas d'écoulement permanent, celles des trajectoires. Elles s'écrivent en coordonnées cartésiennes

$$\dot{x} = u_x(x, y) \tag{16}$$

$$\dot{y} = u_y(x, y) \tag{17}$$

On tracera:

la carte des lignes de courant. En particulier, on fera apparaître celles qui passent par les points de vitesse nulle

l'évolution d'un front de particules.

On étudiera l'évolution de ces profils en fonction du paramètre C. Etudier le cas particulier C > 1.

## Mécanique quantique

Résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension (\*)

On calcule les énergies et fonctions d'onde liées d'une particule dans un potentiel de forme quelconque. Application au potentiel  $-V_0/ch^2\frac{x}{a}$  dont on connaît la solution analytique pour l'état fondamental.

# Résolution numérique de l'équation de Schrödinger dépendant du temps à une dimension (\*)

On résoud numériquement l'équation de Schrödinger dépendant du temps pour une fonction d'onde initiale quelconque et un potentiel quelconque. Ce calcul illustre des phénomènes quantiques fondamentaux : diffusion par un potentiel, réflexion, transmission, résonances, loi de décroissance exponentielle des résonances.

#### 1. Discrétisation de l'équation de Schrödinger par la méthode de Crank-Nicholson

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

On pose

$$\alpha = -\frac{\hbar^2}{2mi\hbar} = \frac{i\hbar}{2m} \text{ et } v = \frac{V}{i\hbar}$$

$$\psi(x, t + \Delta t) = \psi(x, t) + \Delta t \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}(x, t)$$

$$\psi(x,t) = \psi(x,t + \Delta t - \Delta t) = \psi(x,t + \Delta t) - \Delta t \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} (x,t + \Delta t)$$

On pose

$$\psi_k^n = \psi(k\Delta x, n\Delta t)$$
 et  $v_k^n = v(k\Delta x, n\Delta t)$ 

 $\Delta x$  et  $\Delta t$  étant des pas choisis, k et n des entiers relatifs.

$$\frac{\psi_k^{n+1} - \psi_k^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}(x,t) + \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}(x,t + \Delta t) \right]$$

Expression approchée du Laplacien

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x,t) \simeq \frac{\psi_{k-1}^n - 2\psi_k^n + \psi_{k+1}^n}{(\Delta x)^2}$$

L'équation de Schrödinger se met alors sous la forme approchée

$$\frac{\psi_k^{n+1} - \psi_k^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left[ \alpha \frac{\psi_{k-1}^n - 2\psi_k^n + \psi_{k+1}^n}{(\Delta x)^2} + v_k^n \psi_k^n + \alpha \frac{\psi_{k-1}^{n+1} - 2\psi_k^{n+1} + \psi_{k+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + v_k^{n+1} \psi_k^{n+1} \right]$$

On ré-ordonne en posant

$$\beta = \frac{\alpha}{2(\Delta x)^2}$$

$$-\beta\psi_{k-1}^{n+1} + \left(\frac{1}{\Delta t} + 2\beta - \frac{v_k^{n+1}}{2}\right)\psi_k^{n+1} - \beta\psi_{k+1}^{n+1} = \beta\psi_{k-1}^n + \left(\frac{1}{\Delta t} - 2\beta + \frac{v_k^n}{2}\right)\psi_k^n + \beta\psi_{k+1}^n \tag{1}$$

On suppose que, quelque soit n, il existe deux valeurs de k, k' et k'', indépendantes de n, telles que

$$\psi_{k'}^n = \psi_{k''}^n = 0 \qquad (2)$$

et on fait un changement d'origine de l'indice k de telle manière que

$$\psi_{-1}^n = \psi_p^n = 0$$
 avec  $p = k'' - k' - 1$ 

En posant

$$\lambda_k^n = \frac{1}{\Delta t} + 2\beta - \frac{v_k^n}{2} \quad \text{et} \quad \mu_k^n = \frac{1}{\Delta t} - 2\beta + \frac{v_k^n}{2}$$

Le système d'équations (1) s'écrit

$$\begin{array}{lll} -\beta.0 + \lambda_0^{n+1} \psi_0^{n+1} - \beta \psi_1^{n+1} & = & \beta.0 + \mu_0^n \psi_0^n + \beta \psi_1^n \\ \\ -\beta \psi_0^{n+1} + \lambda_1^{n+1} \psi_1^{n+1} - \beta \psi_2^{n+1} & = & \beta \psi_0^n + \mu_1^n \psi_1^n + \beta \psi_2^n \\ \\ & \cdots & = & \cdots \\ \\ -\beta \psi_{p-3}^{n+1} + \lambda_{p-2}^{n+1} \psi_{p-2}^{n+1} - \beta \psi_{p-1}^{n+1} & = & \beta \psi_{p-3}^n + \mu_{p-2}^n \psi_{p-2}^n + \beta \psi_{p-1}^n \\ \\ -\beta \psi_{p-2}^{n+1} + \lambda_{p-1}^{n+1} \psi_{p-1}^{n+1} - \beta.0 & = & \beta \psi_{p-2}^n + \mu_{p-1}^n \psi_{p-1}^n + \beta.0 \end{array}$$

ce qui peut être mis sous forme matricielle

Avec

$$\begin{split} u_0^n &= \mu_0^n \psi_0^n + \beta \psi_1^n \\ u_k^n &= \beta \psi_{k-1}^n + \mu_k^n \psi_k^n + \beta \psi_{k+1}^n \quad \text{ pour } \quad 1 \leq k \leq p-2 \\ u_{p-1}^n &= \beta \psi_{p-2}^n + \mu_{p-1}^n \psi_{p-1}^n \end{split}$$

L'équation matricielle permet de calculer les valeurs  $\psi_k^{n+1}$  de la fonction d'onde à l'instant  $t+\Delta t$  en fonction des valeurs  $\psi_k^n$  de la fonction d'onde à l'instant t. C'est un système tri-diagonal résoluble par la méthode de Choleski. Les fonctions choleski\_complex ou choleski\_complex\_vector de la bibliothèque bibli\_fonctions.h résolvent cette équation.

On se place dans le cas où la particule est confinée dans le segment  $[x_{\min} - \Delta x, x_{\max} + \Delta x]$  en écrivant

$$\psi(x_{\min} - \Delta x, t) = \psi(x_{\max} + \Delta x, t) = 0 \quad \forall t$$

ce qui assure la condition (2) et on a

$$\psi_k^n = \psi(k\Delta x + x_{\min}, n\Delta t) \quad \text{avec} \quad \Delta x = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{p-1} \quad p \text{ étant le nombre de points du réseau en } x$$

## 2. Cas particulier où le potentiel ne dépend pas du temps.

Les  $v_k^n$  sont alors indépendants du temps, donc de n, et on peut supprimer cet indice. De même pour  $\lambda_k^n$  et  $\mu_k^n$ . Le système d'équations (1) s'écrit alors :

$$-\beta \cdot 0 + \lambda_0 \psi_0^{n+1} - \beta \psi_1^{n+1} = \beta \cdot 0 + \mu_0 \psi_0^n + \beta \psi_1^n 
-\beta \psi_0^{n+1} + \lambda_1 \psi_1^{n+1} - \beta \psi_2^{n+1} = \beta \psi_0^n + \mu_1 \psi_1^n + \beta \psi_2^n 
\dots = \dots 
-\beta \psi_{p-3}^{n+1} + \lambda_{p-2} \psi_{p-2}^{n+1} - \beta \psi_{p-1}^{n+1} = \beta \psi_{p-3}^n + \mu_{p-2} \psi_{p-2}^n + \beta \psi_{p-1}^n 
-\beta \psi_{p-2}^{n+1} + \lambda_{p-1} \psi_{p-1}^{n+1} - \beta \cdot 0 = \beta \psi_{p-2}^n + \mu_{p-1} \psi_{p-1}^n + \beta \cdot 0$$

ce qui peut être mis sous forme matricielle

Avec

$$u_0^n = \mu_0 \psi_0^n + \beta \psi_1^n$$
 
$$u_k^n = \beta \psi_{k-1}^n + \mu_k \psi_k^n + \beta \psi_{k+1}^n \quad \text{pour} \quad 1 \le k \le p - 2$$
 
$$u_{p-1}^n = \beta \psi_{p-2}^n + \mu_{p-1} \psi_{p-1}^n$$

## 3. Potentiels, conditions initiales, valeurs des paramètres

Potentiel attractif ou barrière, carré ou :  $\frac{V_0}{\cosh^2 \frac{x}{\tau}}$ 

Fonction d'onde initiale loin du potentiel :  $\psi(x,0)=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{a_0}}e^{ik_0x}e^{-\left(\frac{x-x_0}{a_0}\right)^2}$  Exemple de valeurs des paramètres (en SI) :

$$\begin{array}{l} \hbar = 1.055 \text{e-}34 \\ V_0 = -1.6 \text{e-}9 \\ \tau = 1 \text{e-}15 \\ a_0 = 1 \text{e-}15 \\ m = 2000 \times 9.11 \text{e-}31 \\ k_0 = \frac{\sqrt{2m|V_0|}}{\hbar} \\ x_0 = -30 \text{e-}15 \end{array}$$

Etudier ensuite les résonances d'un puits et d'une barrière carrés.

## Optique géométrique

### Réflexion par un miroir hémisphérique

Une source ponctuelle est placée de façon quelconque par rapport à un miroir hémisphérique. Tracer les points d'intersection entre les rayons et la surface du miroir pour une distribution régulière de n rayons issus de la source ponctuelle.

### RÉFLEXION SUR UNE SPHÈRE

Une source ponctuelle est placée de façon quelconque à l'extérieur d'une sphère de métal poli. Tracé des rayons réfléchis, étude des images.

# RAYON LUMINEUX DANS UN MILIEU D'INDICE VARIABLE (\*)

On calcule le rayon lumineux par l'équation

$$\frac{d}{ds}(n\vec{t}) = \vec{\nabla}n$$

 $\vec{t}$  étant le vecteur unitaire tangent au rayon lumineux au point M(x,y,z) d'abscisse curviligne s, défini par

$$\vec{t} = \frac{d\vec{OM}}{ds}$$

On traite une des applications suivantes au choix :

fibres optiques propagation dans un liquide soumis à une onde acoustique effets de mirage œil de poisson de Maxwell

## ABERRATIONS D'UNE LENTILLE RÉELLE

On calcule l'image exacte d'un objet donnée par une lentille en appliquant la loi de la réfraction  $n_1 \sin i_1 = n_2 \sin i_2$ . On compare le résultat avec l'approximation de Gauss en plaçant un diaphragme de taille variable devant la lentille. On traite l'un des cas :

lentille sphérique lentille hémisphérique lentille quelconque

#### OPTIQUE MATRICIELLE

Calcul des éléments d'un système centré quelconque à partir de la série de dioptres qui le compose par la méthode matricielle (approximation de Gauss).

## Optique ondulatoire

#### DIFFRACTION DE FRESNEL PAR UNE PUPILLE CIRCULAIRE

On calcule et on représente graphiquement l'intensité de l'onde lumineuse diffractée en tout point òu la formule de Fresnel-Kirchoff est valable.