École Polytechnique Fédérale de Lausanne — 14 mai 2025
Semestre de printemps 2025
Prof. Laurent Villard
Dr Giovanni Di Giannatale

Physique Numérique – Exercice 6

à rendre jusqu'au mercredi 28 mai 2025 sur le site
https://moodle.epfl.ch/mod/assign/view.php?id=1174657

6 Schéma de Crank-Nicolson. Equation de Schrödinger. Oscillateur harmonique. Barrière et 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 (voir Fig. 1) :

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega_0^2 \left(\frac{x-x_a}{x_L-x_a}\right)^2 & x \in [x_L, x_a] \\ V_0 \sin^2\left(\frac{\pi(x-x_a)}{x_b-x_a}\right) & x \in [x_a, x_b] \\ \frac{1}{2}m\omega_0^2 \left(\frac{x-x_b}{x_R-x_b}\right)^2 & x \in [x_b, x_R] \end{cases} \tag{1}$$

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, x_a, x_b, V_0 et ω_0 sont les donnés physiques du problème. Cette forme de potentiel permet d'étudier un oscillateur harmonique (en posant $V_0 = 0, x_a = x_b = 0,$) et une barrière de potentiel (en posant $x_a \neq 0, x_b \neq 0, V_0 > 0$).

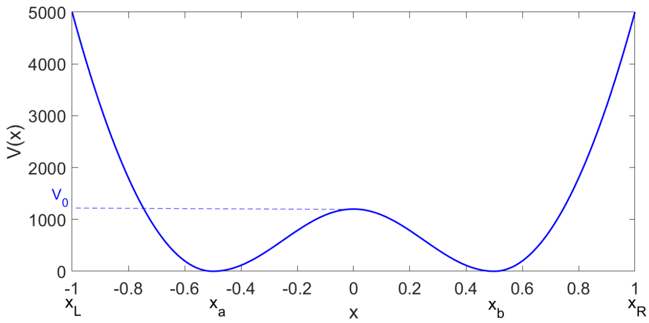

Figure 1 – Potentiel $V(x)$.

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 et $L = x_R - x_L$. La constante C sera calculée numériquement de telle sorte que la probabilité initiale totale soit égale à 1 :

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

Du point de vue physique, les buts de cet exercice sont (1) d'illustrer le mouvement quantique d'une particule dans un potentiel harmonique, et de le comparer avec celui qu'aurait une particule classique ; (2) d'illustrer et quantifier le comportement fondamentalement différent d'une particule quantique lors de certaines situations, comme le franchissement d'une barrière de potentiel par effet tunnel.

Du point de vue numérique, le but de cet exercice est de résoudre 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 Calculs Analytiques [4pts]

Dans le cas d'un oscillateur harmonique ($V_0 = 0, x_a = x_b = 0$), calculer le mouvement $x_{\text{class}}(t)$ et la quantité de mouvement $p_{\text{class}}(t)$ qu'aurait une particule classique placée initialement ($t = 0$) à la position $x = x_0$ et avec la quantité de mouvement $p = p_0$, avec x_0 et p_0 donnés.

6.2 Formulation et Programmation [5pts]

Télécharger et étudier le code Exercice6_2025_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, x_a, x_b, ω_0 définissant le potentiel ; x_0, σ_{norm} et n définissant la fonction d'onde initiale ; le nombre d'intervalles du maillage n_x, le nombre de pas de temps n_{steps} 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 $P_{x<0}(t)$, respectivement à droite de la barrière $P_{x>0}(t)$;

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

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

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, $(\partial\psi/\partial x)_i = (\psi_{i+1} - \psi_{i-1})/(2h_x)$, où h_x 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, $(\partial^2\psi/\partial x^2)_i = (\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1})/h_x^2$, 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++.

6.3 Oscillateur Harmonique [20pts]

On prend $x_L = -1, x_R = 1, V_0 = 0, x_a = 0, x_b = 0, \omega_0 = 100$, $x_0 = -0.5$, $\sigma_{norm} = 0.04$, $n = 16$, et $t_{\text{fin}} = 0.08$.

(i) **Mouvement quantique et comparaison avec mouvement classique [8pts]** On prend les paramètres numériques $n_x = 512$, $n_{\text{steps}} = 800$. Effectuer une simulation et illustrer le résultat obtenu : $|\psi(x,t)|, Re(\psi(x,t))$, ainsi que les graphes de la position moyenne $\langle x\rangle(t)$ et de la quantité de mouvement moyenne $\langle p\rangle(t)$, comparés au mouvement de la particule classique $x_{\text{class}}(t)$, repsectivement $p_{\text{class}}(t)$.

(ii) **Vérification des propriétés physiques [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 :

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

(iii) **Convergence numérique [8pts]**. Faire deux études de convergence numérique. La première, avec $n_x = 512$ fixé, en variant n_{steps}, pour illustrer la convergence avec Δt. La deuxième, avec $n_{\text{steps}} = 800$ fixé, en variant n_x, pour illustrer la convergence avec h_x. On prendra comme quantité dont on étudie la convergence, la position moyenne au temps final, $\langle x\rangle(t_{\text{fin}})$.

6.4 Barrière de Potentiel et Effet Tunnel [16pts]

Maintenant, on considère $V_0 \neq 0$, $x_a = -0.5$, $x_b = 0.5$. La fonction d'onde initiale est la même que dans la partie précédente ($x_0 = -0.5$, $\sigma_{norm} = 0.04$, $n = 16$).

(i) **[8pts]** On définit la probabilité de transmission de la particule, $P_{x>0}(t_{\text{trans}})$, en choisissant un temps $t_{\text{trans}} \approx 0.035$ 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 $\langle E\rangle/V_0$.

(ii) **[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.

6.5 Suppléments facultatifs

— Changer la forme du potentiel.

— Changer la fonction d'onde initiale. En particulier, dans le cas de l-oscillateur harmonique, 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.

— Détecteur de particule. 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 $f(x)$: $\hat{\psi}(x, t_{\text{detect}}) = Df(x)\psi(x, t_{\text{detect}})$, avec

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

avec x_{da} et x_{db} donnés, et D est tel que $\int_{x_L}^{x_R} |\hat{\psi}(x, t_{\text{detect}})|^2 \mathrm{d}x = 1$. Effectuer une paire de simulations (1) dans le cas où on ne détecte pas la particule, et (2) dans le cas où on détecte la particule en $t = t_{\text{detect}}$ donné, et comparer les résultats des deux cas.

6.6 Rédaction du rapport en LaTeX

Rédiger un rapport de **maximum 8-10 pages, figures comprises,** répondant aux questions ci-dessus sont présentées et discutées.

6.7 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.