



POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

Étude de la diffraction d'électrons à l'aide de l'équation de Schrödinger dépendante du temps

RAPPORT FINAL

Équipe 10 :

Félix Desrochers
Paul Xing
Raphaël Thibault

Matricules :

1847002
1601559
1850938

Remis à
Jérémie Villeneuve et Étienne Boulais

4 mai 2019

Table des matières

1	Introduction	1
2	Modélisation théorique du problème	1
2.1	Paquet d'onde gaussien	2
2.2	Propagation du paquet d'onde	3
2.3	Paquet d'onde en 2 dimensions	3
2.4	Diffraction d'un paquet d'onde gaussien à travers une fente	4
2.4.1	Cas limite : Paquet d'onde large spatialement	5
2.4.2	Cas limite : Paquet d'onde étroit spatialement	6
2.5	Diffraction d'un paquet d'onde gaussien à travers deux fentes	6
2.6	Unités atomiques	7
2.7	Conditions aux frontières	7
2.8	Application au problème	8
3	Analyse des méthodes numériques	8
3.1	Méthode Spectrale	8
3.2	Différences finies	9
3.3	Éléments finis	9
3.4	Volumes finis	10
4	Choix de la méthode	10
5	Mise en oeuvre de la méthode numérique	11
6	Évaluation détaillée de la performance	12
6.1	Limitation en temps	12
6.2	Limitation en mémoire	13
6.3	Effet de la discrétisation	14
7	Résultats	15
7.1	Diffraction à travers une fente	15
7.1.1	Paquet d'onde large spatialement	15
7.1.2	Paquet d'onde étroit spatialement	16
7.2	Diffraction à travers deux fentes	17
7.3	Diffraction à travers N fentes	19
8	Évaluation de la qualité des résultats	20
8.1	Définition de l'erreur	20
8.2	Analyse de l'ordre de convergence	21
8.2.1	Ordre de convergence spatiale	21
8.2.2	Ordre de convergence temporelle	21
8.3	Analyse de la conservation de la norme	21
9	Travail futur et conclusion	22
9.1	Simulations complémentaires	22
9.2	Analyses supplémentaires	23
9.3	Conclusion	23
	Bibliographie	24

A Analyse des méthodes de différences finies	27
A.1 Euler explicite	27
A.1.1 Ordre de convergence	27
A.1.2 Critère de stabilité	28
A.1.3 Unitarité	28
A.2 Euler implicite	28
A.2.1 Ordre de convergence	28
A.2.2 Critère de stabilité	29
A.2.3 Unitarité	29
A.3 Crank-Nicolson	29
A.3.1 Ordre de convergence	29
A.3.2 Critère de stabilité	30
A.3.3 Unitarité	30
A.4 Askar-Cakmak	31
A.4.1 Ordre de convergence	31
A.4.2 Critère de stabilité	31
A.4.3 Unitarité	31
B Forme explicite des matrices M_1 et M_2	32

Étude de la diffraction d'électrons à l'aide de l'équation de Schrödinger dépendante du temps

Félix Desrochers, Paul Xing et Raphaël Thibault
 Département de génie physique, École Polytechnique de Montréal.

Sommaire exécutif

Dans le présent travail, la diffraction d'un électron unique à travers deux fentes a été étudiée numériquement à l'aide de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Un modèle théorique est d'abord développé pour traiter de la diffraction d'un paquet d'onde gaussien à travers une et deux fentes. De ce modèle, des formes explicites de la densité de probabilité de l'électron sont dérivées pour les cas limites d'un paquet d'onde large et étroit spatialement. Un programme numérique utilisant la méthode de Crank-Nicolson a été mis en place et, après l'avoir présenté et avoir discuté de ces limitations, les résultats obtenus avec celui-ci sont comparés avec les prédictions du modèle théorique dans les deux cas limites. Le comportement obtenu dans le cas avec une seule fente correspond aux prédictions théoriques, tandis que pour deux fentes, même si la forme générale du patron de diffraction obtenue est la même, le comportement en fonction des paramètres ne semble pas correspondre. L'étude de la diffraction a également été généralisée au cas de fentes multiples avec $N=4$. Les résultats montrent que la forme du patron de diffraction semble être bien décrit par le modèle classique de diffraction de Franhofer à travers plusieurs fentes. Finalement, la validité des performances du programme est confirmée en comparant ses résultats avec la formule analytique pour la propagation d'un paquet d'onde libre, en évaluant son ordre de convergence et en confirmant l'unitarité de la méthode à l'aide de l'évolution de la norme.

1 Introduction

La diffraction est le comportement d'un système ondulatoire lors de la rencontre d'un obstacle ayant une dimension du même ordre de grandeur que sa longueur d'onde caractéristique. La démonstration que des particules massives comme des électrons présentent un tel comportement lors du passage à travers deux fentes, qui n'était à l'origine qu'une expérience de pensée proposée par Richard Feynman¹, est un point central du fondement conceptuel de la mécanique quantique dont la réalisation expérimentale n'est que très récente². Effectivement, la démonstration qu'un seul électron puisse interférer avec lui-même³ est une des illustrations les plus marquantes de la dualité onde-corpuscule et de l'interprétation de la fonction d'onde. Vu son importance conceptuelle et historique, la compréhension de la diffraction d'électrons revêt un grand intérêt scientifique. Au même titre, la compréhension d'un tel phénomène est essentielle dans plusieurs applications scientifiques qui tirent avantage de la nature ondulatoire de la matière comme l'étude cristallographique par diffraction de neutrons⁴ ou encore la microscopie électronique⁵. L'objectif de ce travail est de résoudre numériquement l'équation de Schrö-

dinger dépendante du temps appliquée au problème des fentes de Young afin d'étudier les paramètres du dispositif (largeur, position et épaisseur des fentes) permettant l'obtention d'un patron d'interférence. Ce rapport présente d'abord la théorie relative à l'interférence d'un paquet d'onde gaussien à travers une et deux fentes. Après considération des différentes méthodes numériques qui ont déjà été utilisées pour résoudre ce genre de problèmes, la méthode des différences finies de Crank-Nicolson a été choisie pour résoudre l'équation de Schrödinger. Après avoir analysé les limites et performances du programme, celui-ci a été utilisé pour analyser et comparer les résultats des simulations pour les cas limites de paquet large et étroit spatialement avec la théorie. Finalement, la qualité du programme a été évaluée en considérant les différents aspects associés aux méthodes de différences finies.

2 Modélisation théorique du problème

L'objectif général de ce projet est de résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du

temps

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi\rangle, \quad (1)$$

en deux dimensions pour un paquet d'onde passant à travers des fentes. L'équation de Schrödinger peut être réécrite dans la base des positions $\{|\vec{r}\rangle\}$ comme

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

Avant de s'attaquer à la résolution de ce problème complexe, il peut être instructif de résoudre le problème de la propagation d'un paquet d'onde dans le vide ($V(\vec{r}) = 0$) afin de bien saisir l'interprétation du paquet d'onde et de son évolution temporelle. La résolution ne sera d'abord que présentée pour le cas unidimensionnel. D'abord, les ondes planes

$$\phi_k(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} \quad (3)$$

(où k est le vecteur d'onde et ω la fréquence angulaire) sont des fonctions propres de l'opérateur quantité de mouvement⁶ :

$$\hat{P}\phi_k(x) = -i\hbar \frac{\partial \phi_k}{\partial x} = (\hbar k)\phi_k(x). \quad (4)$$

Les ondes planes ont donc une quantité de mouvement bien définie de valeur $p_k = \hbar k$. À partir de ce résultat, il peut être déduit que les ondes planes seront aussi les fonctions propres de l'hamiltonien dans le vide :

$$\hat{H}\phi_k(x) = \frac{\hat{P}^2}{2m}\phi_k(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\phi_k(x). \quad (5)$$

L'énergie d'une onde plane est donc

$$E_k = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (6)$$

D'où la relation de dispersion suivante pour une particule massive en mécanique quantique

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (7)$$

La vitesse de phase et de groupe peuvent être déterminées à partir de ce résultat important⁷

$$\left\{ \begin{array}{l} v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} \\ v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m}. \end{array} \right. \quad (8a)$$

Or, la densité de probabilité $|\psi|^2$ des ondes planes est constante sur tout le domaine des positions. Les ondes planes sont donc impossibles à normaliser et représentent des particules complètement délocalisées dans l'espace. Cependant, même si ces solutions ne représentent aucun état physique, elles peuvent servir de base : considérant que l'équation de Schrödinger est linéaire et que l'hamiltonien et l'opérateur quantité de mouvement sont hermitiens, leurs fonctions propres doivent former une base complète orthogonale⁶. Alors, toute fonction d'onde dans le vide peut être exprimée comme une superposition linéaire d'ondes planes. Une fonction d'onde générale peut donc s'écrire

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} A(k)\phi_k(x, t) dk \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} A(k)e^{i(kx - \omega t)} dk, \end{aligned} \quad (9)$$

où $A(k)$ est l'amplitude de probabilité que la particule ait un certain vecteur d'onde k . On peut donc représenter une particule localisée dans l'espace en superposant un grand nombre d'ondes planes. Il s'agit exactement de la définition d'un paquet d'onde : une enveloppe localisée contenant une infinité de composantes fréquentielles. En fait, les paquets d'onde peuvent de façon équivalente être représentés dans la base des positions ou des quantités de mouvement. Ces représentations sont simplement reliées par une transformée de Fourier⁸ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k)e^{ikx} dk \\ \tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)e^{-ikx} dx. \end{array} \right. \quad (10a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\Delta x^2\pi}} e^{ik_0 x} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\Delta x^2}}. \end{array} \right. \quad (11)$$

La densité de probabilité pour la position de la particule associée à cette fonction d'onde est

$$|\psi(x, 0)|^2 = \frac{1}{\Delta x \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x-x_0}{\Delta x} \right)^2}. \quad (12)$$

Il s'agit donc d'une gaussienne centrée en x_0 , ayant un vecteur d'onde central k_0 et un écart-type Δx . En utilisant l'équation (10a), on trouve

que la représentation dans l'espace des quantités de mouvement est

$$\tilde{\psi}(k) = \sqrt{\frac{1}{2\Delta k^2 \pi}} e^{ikx_0} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\Delta k^2}}, \quad (13)$$

où $\Delta k = \frac{1}{2\Delta x}$, et la densité de probabilité associée est

$$|\tilde{\psi}(k)|^2 = \frac{1}{\Delta k \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{(k-k_0)}{4\Delta k} \right)^2}. \quad (14)$$

Il s'agit donc aussi d'une gaussienne dont le vecteur d'onde le plus probable est k_0 et l'écart type Δk . On peut aussi remarquer qu'une telle fonction d'onde satisfait exactement le principe d'incertitude de Heisenberg⁹ :

$$\Delta x \Delta k = \frac{1}{2}. \quad (15)$$

Il s'agit donc du paquet d'onde ayant l'incertitude minimale.

2.2 Propagation du paquet d'onde

L'évolution temporelle du paquet d'onde gaussien peut ensuite être étudiée. La fonction d'onde à un temps t est donnée par

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ig(k)} dk, \quad (16)$$

où $g(k) = kx - \omega_0 t$ et $\tilde{\psi}(k)$ est donnée par (13). Comme $|\tilde{\psi}(k)|^2$ est centré en $k = k_0$ et décroît autour de cette valeur, il paraît raisonnable de faire le développement de Taylor de $g(k)$ autour de k_0 :

$$g(k) = g(k_0) + \left. \frac{dg}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 g}{dk^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 + \mathcal{O}(\Delta k^3). \quad (17)$$

Les différentes dérivées sont

$$g(k_0) = k_0 x - \omega_0 t \quad (18a)$$

$$\left. \frac{dg}{dk} \right|_{k_0} = x - v_g t \quad (18b)$$

$$\left. \frac{d^2 g}{dk^2} \right|_{k_0} = -\alpha t, \quad (18c)$$

où les constantes ω_0 , v_g et α valent respectivement (selon (7)) :

$$\omega_0 = \omega(k_0) = \frac{\hbar k_0^2}{2m} \quad (19a)$$

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (19b)$$

$$\alpha = \left. \frac{d^2 \omega}{dk^2} \right|_{k_0} = \frac{\hbar}{m}. \quad (19c)$$

Ici, v_g représente la vitesse de groupe du paquet d'onde. On remarque que la dérivée d'ordre 3 de $g(k)$ est nulle. Cela implique que le terme d'ordre 3 de l'équation (17) est nul et que le développement de Taylor d'ordre 2 n'est donc pas une approximation, mais une réécriture exacte. En remplaçant dans l'équation (16) et en évaluant, on trouve finalement⁶ :

$$\psi(x, t) = \frac{e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} e^{-\frac{(x-x_0-v_g t)^2(1-2i\alpha\Delta k^2 t)}{4\sigma^2}}}{(\sqrt[4]{\Delta x^2 2\pi})(\sqrt{1+2i\alpha\Delta k^2 t})} \quad (20)$$

où

$$\sigma^2(t) = \Delta x^2 + \frac{\alpha^2 t^2}{4\Delta x^2} \quad (21)$$

La densité de probabilité associée est donnée par

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sigma(t)\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x-x_0-v_g t}{\sigma(t)} \right)^2} \quad (22)$$

Il s'agit donc d'une gaussienne dont le maximum se déplace à la vitesse de groupe en suivant $x_0 - v_g t$ et dont l'écart type augmente avec le temps. Il est à remarquer que plus l'incertitude Δx sur la position est petite, plus l'étalement du paquet d'onde est rapide. Cet étalement peut être interprété à l'aide du principe d'incertitude : si l'incertitude sur la position est petite, l'incertitude sur la quantité de mouvement $\Delta p = \hbar \Delta k$ sera grande. Si la quantité de mouvement est très incertaine, il est tout à fait normal que l'incertitude sur la position augmente rapidement avec le temps.

2.3 Paquet d'onde en 2 dimensions

En deux dimensions, pour le présent problème, il est possible de ne considérer que le cas simple où la fonction d'onde totale est le produit de deux paquets d'onde indépendants se propageant selon x et y respectivement, de sorte que la fonction d'onde est factorisable sous la forme

$$\psi(x, y, t) = \psi(x, t)\phi(y, t), \quad (23)$$

Ici, $\psi(x, t)$ et $\phi(y, t)$ sont des paquets d'onde de la forme générale (9). Dans le cas où les deux paquets d'onde en x et en y sont gaussiens, $\psi(x, t)$ et $\phi(y, t)$ sont tous les deux de la forme (20), mais avec des valeurs de vecteurs d'onde central k_0 , de vitesse de groupe v_g et d'étalement qui peuvent être différentes. Le profil et l'étalement de la gaussienne peut donc être asymétrique selon les deux axes. Dans le cas particulier où l'incertitude est la même en x et en y ($\Delta x = \Delta y = \Delta r$), l'incertitude sur la quantité de mouvement sera aussi la même dans les deux directions ($\Delta k_x = \Delta k_y = \Delta k$) selon l'équation (15). La fonction d'onde se réduit donc à

$$\psi(x, y, t) = \frac{e^{i(\vec{k}_0 \cdot \vec{r} - \omega_0 t)} e^{-\frac{(\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_g t)^2(1-2i\alpha\Delta k^2 t)}{4\sigma^2}}}{(\sqrt[4]{\Delta r^2 2\pi})(\sqrt{1+2i\alpha\Delta k^2 t})}, \quad (24)$$

où $\vec{r} = (x, y)$, $\vec{r}_0 = (x_0, y_0)$ est la position initiale, $\vec{v}_g = (v_{gx}, v_{gy})$ est la vitesse de groupe et $\vec{k}_0 = (k_{0x}, k_{0y})$ est le vecteur d'onde central. L'interprétation reste alors similaire : la densité de probabilité est représentée par une gaussienne dont le centre se déplace à la vitesse de groupe en suivant $\vec{r}_0 + \vec{v}_g t$ et dont l'étalement augmente en x et en y avec le temps.

2.4 Diffraction d'un paquet d'onde gaussien à travers une fente

Après avoir traité la propagation d'un paquet d'onde gaussien dans le vide, la diffraction à travers une fente peut être abordée. Le phénomène de diffraction à travers une ou plusieurs fente est un phénomène très complexe à traiter de manière analytique. En fait, la plupart des traitements classiques utilisent l'approximation de Kirchhoff qui peut ensuite, à l'aide d'approximations supplémentaires, mener au principe de Huygens-Fresnel pour lequel il existe des solutions analytiques simples bien connues¹⁰. Il est cependant à noter qu'il n'existe pas de solutions analytiques pour la diffraction d'un paquet d'onde à travers une ou plusieurs fentes épaisses. Au même titre, il n'existe pas de solutions analytiques pour la diffraction d'électrons à travers des fentes. Or, à l'aide de diverses considérations, des solutions approximatives peuvent être obtenues dans certains cas limites. Cette section présente un traitement possible basé sur les travaux de A. Zecca^{11;12;13;14;15}. Afin de résoudre ce problème, la fente est modélisée comme une

barrière de potentiel infinie dont l'épaisseur est négligeable et définie sur le domaine W suivant :

$$W = \{(x, y) : |x| < \epsilon, |y| > b, \epsilon \rightarrow 0\}, \quad (25)$$

où l'axe x correspond à la direction de propagation. Les différents paramètres sont illustrés à la figure 1. Comme le potentiel est infini, la fonction d'onde doit être nulle partout à l'intérieur et à l'interface du domaine V . La seule région en y où la particule peut se trouver lors de la rencontre avec la fente est donc le domaine $S = [-b, b]$. La présence du puits modifie grandement la forme du paquet d'onde : une partie est réfléchie dans la région d'incidence et l'autre partie est transmise. Nous ne considérerons que la partie transmise $\psi_{out}(x, y, t)$, car seule la forme de cette dernière nous intéresse. Il est à noter que ψ_{out} n'est pas normalisée étant donnée que la partie réfléchie a été ignorée et que la fonction de départ, elle, était normalisée. Sur la base que la barrière a une épaisseur négligeable, l'hypothèse que la fonction d'onde reste factorisable en x et en y et que la partie en x reste inchangée peut être faite. La fonction d'onde transmise est donc de la forme générale¹⁵ :

$$\psi_{out}(x, y, t) = \psi_{out}(x, t)\phi_I(y, t), \quad (26)$$

où $\psi_{out}(x, t)$ est encore de la forme (20). La fonction d'onde en y peut être approximée en considérant séparément deux effets de la barrière de potentiel. D'une part, l'effet principal de la barrière est de tronquer la fonction d'onde et de ne transmettre que la partie qui est située à l'intérieur du domaine S . La contribution de cet effet de troncature peut donc s'écrire comme la décomposition de la fonction d'onde tronquée sur les fonctions propres u_{p_y} d'une particule libre de masse m ($u_{p_y} = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp\{ip_y/\hbar\}$)¹⁵ :

$$\phi_{out}(y, t) = A \int dp_y u_{p_y}(y) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_y^2}{2m} t} \int_S d\eta u_{p_y}^*(\eta) \phi_0(\eta), \quad (27)$$

où A est une constante à ajuster (le modèle ne spécifie pas l'importance de chaque contribution, mais seulement leur forme générale) p_y est la quantité de mouvement en y et ϕ_0 est la partie de la fonction d'onde en y au moment où le paquet d'onde rencontre la barrière de potentiel. D'une autre part, un autre effet du potentiel est de confiner la particule à l'intérieur de la fente.

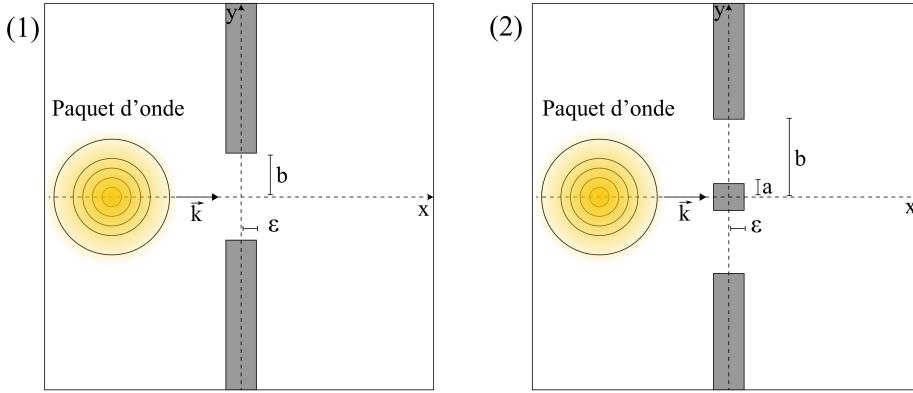


Figure 1 – Illustration d'un paquet d'onde passant à travers une (1) et deux fentes (2). Les fentes ont une épaisseur ϵ , une largeur totale b et, dans le cas à deux fentes, la largeur de la séparation centrale est a .

Ce confinement crée des «modes de cavité» à l'intérieur de la fente. Les modes propres d'un puits infini de largeur b sont¹⁵

$$v_{p_n} = \frac{1}{\sqrt{b}} \sin \left(\frac{p_n(y - b)}{\hbar} \right), \text{ où } p_n = \frac{n\hbar\pi}{2b} \quad (28)$$

pour $n \in \mathbb{N}$. La quantité de mouvement moyenne de ces fonctions est nulle, mais ces dernières peuvent être décomposées comme la somme de deux fonctions possédant une quantité de mouvement p_y et se propageant en direction opposée. De plus, afin de pouvoir effectuer les calculs, il est possible d'utiliser le fait que les valeurs de p_n sont très densément distribuées pour remplacer l'indice discret n par un indice continu. La contribution de confinement est alors donnée par la combinaison linéaire d'ondes planes dont les coefficients correspondent à la projection du paquet d'onde tronqué sur ces états propres continus confinés dans la cavité¹⁵

$$\phi_C(y, t) = \frac{B2i}{\sqrt{\pi\hbar}} \int dp_y u_{p_y}(y) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_y^2}{2m} t} \times \int_S d\eta \left[e^{-\frac{i}{\hbar} p_y(\eta-b)} - e^{\frac{i}{\hbar} p_y(\eta-b)} \right] \phi_0(\eta), \quad (29)$$

où B est une certaine constante à ajuster qui détermine le rapport entre l'importance de la contribution de confinement et de troncature. Dans ce modèle la fonction d'onde en y est alors simplement la somme de ces deux contributions $\phi_I(y, t) = \phi_{out}(y, t) + \phi_C(y, t)$ et le patron observé sur l'écran est donné par la densité de probabilité :

$$|\phi_I(y, t)|^2 = |\phi_{out}(y, t) + \phi_C(y, t)|^2 \quad (30)$$

Ce patron n'a bien sûr pas de forme analytique explicite simple, mais peut être évalué dans certains cas limites qui seront abordés dans les prochaines sections.

2.4.1 Cas limite : Paquet d'onde large spatialement

Si l'on suppose que la position du paquet d'onde est faiblement définie, alors l'incertitude sur la quantité de mouvement est très faible (Δp_x et Δp_y très petits). Cette situation s'apparente à la diffraction d'une onde plane délocalisée dont la quantité de mouvement est très bien définie. Pour un tel cas, certaines approximations peuvent être faites afin de trouver une solution aux équations de la section précédente. La densité de probabilité des deux contributions pour ces résultats est¹⁵

$$|\phi_{out}(y, t)|^2 = \frac{2A^2 m \beta b^2}{t \hbar \pi^{3/2}} \frac{\sin^2 \left(\frac{bm}{ht} y \right)}{\left(\frac{bm}{ht} y \right)^2} \quad (31)$$

$$|\phi_C(y, t)|^2 = 16B^2 \frac{m^3 b^4 \beta y^2}{\hbar t^3 \pi^{3/2}} \frac{\sin^4 \left(\frac{bm}{ht} y \right)}{\left(\frac{bm}{ht} y \right)^4}, \quad (32)$$

où $\beta = \sqrt{2}\Delta p_0 y / \hbar$. La contribution de troncature (31) donne la même forme que le patron d'interférence usuel pour la diffraction de Fraunhofer dans l'approximation de Huygens-Fresnel¹⁰, alors que l'équation (32) n'a pas de pic central, mais tous les autres pics secondaires sont aux mêmes positions et un peu plus larges. En ne considérant pas les termes croisés, le patron de diffraction est donc le même que dans le cas classique, mais avec des maxima secondaires amplifiés (voir figure 2a).

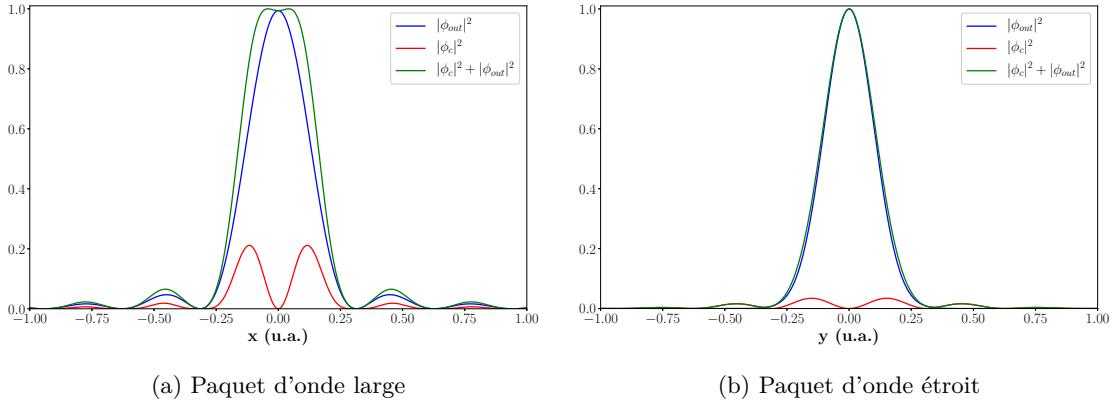


Figure 2 – Illustration des deux contributions et du patron de diffraction théorique à travers une fente pour un paquet d'onde large (a) et étroit (b) spatialement.

2.4.2 Cas limite : Paquet d'onde étroit spatialement

Si on suppose que la position du paquet d'onde est bien définie (Δx et Δy très petits), alors l'expression approximative du terme de troncature est¹⁵

$$|\phi_{out}(y, t)|^2 = \frac{A^2 m \beta \pi^{-3/2}}{\sqrt{m^2 + t^2 \hbar^2 \beta^4}} e^{\frac{-m \beta^2 y^2}{m^2 + t^2 \hbar^2 \beta^4}} \times \left(\frac{\operatorname{erfc} \left(\frac{\beta}{\sqrt{2} b} \right)}{\sqrt{\pi}} \right)^2 \quad (33)$$

et le terme de confinement est donné par

$$|\phi_C(y, t)|^2 = \frac{2B^2 m}{\hbar t \beta \pi^{1/2}} e^{-\frac{m^2}{\beta^2 t^2 \hbar^2} (y^2 + b^2)} \sin^2 \left(\frac{mb}{\hbar t} y \right). \quad (34)$$

Le paquet d'onde est plus étroit que les fentes dans ce cas, la contribution de troncature est donc simplement donnée par une gaussienne ne présentant aucun terme d'interférence. Le terme de confinement, lui, présente une oscillation spatiale de période $2\pi\hbar t/m b$ modulée par une gaussienne centrée en zéro ayant une largeur $\beta t \hbar / \sqrt{2} m$. Ainsi, même s'il aurait été raisonnable de s'attendre à ce que le paquet d'onde passe à travers les fentes sans être visiblement affecté, la contribution de confinement ajoute un terme d'interférence (voir figure 2b). Même dans ce cas limite, il devrait donc être possible d'observer de très faibles oscillations dans la densité de probabilité.

2.5 Diffraction d'un paquet d'onde gaussien à travers deux fentes

Les mêmes considérations faites dans la section précédente pour la diffraction à travers une

seule fente peuvent être étendues au cas où il y a deux fentes. Dans ce cas, la région inaccessible par la particule est définie comme étant :

$$\begin{aligned} W = & \{(x, y) | |y| < a, |x| < \epsilon \rightarrow 0\} \\ & \cup \{(x, y) | |y| > b, |x| < \epsilon \rightarrow 0\}. \end{aligned} \quad (35)$$

La seule différence dans le traitement avec la diffraction pour une seule fente est que le domaine S où la fonction d'onde peut exister lors de la rencontre avec la fente doit être redéfini comme $S = S_1 \cup S_2$, où $S_1 = [-b, -a]$ et $S_2 = [a, b]$. La contribution de troncature est toujours donnée par l'équation (27) et la contribution de confinement est analogue à l'équation (29), mais en traitant indépendamment les modes de cavité pour chaque fente¹³.

Dans le premier cas limite d'un paquet d'onde large spatialement, la contribution de troncature est¹³

$$|\phi_S(y, t)|^2 = \frac{2A^2 \beta m (b-a)^2}{t \hbar \pi^{3/2}} \left[\frac{\sin \left(\frac{m(b-a)}{2t\hbar} y \right)}{\frac{m(b-a)}{2t\hbar} y} \right]^2 \times \cos^2 \left(\frac{m}{2t\hbar} (b+a)y \right) \quad (36)$$

et la contribution de confinement est nulle

$$|\phi_C(y, t)|^2 = 0. \quad (37)$$

Pour ce cas limite, le patron de diffraction donne exactement la même forme que celle pour la diffraction d'une onde plane à travers deux fentes en optique classique (voir 3)¹⁰.

Ce résultat est tout à fait sensé considérant qu'un paquet d'onde large spatialement est très étroit dans l'espace des quantités de mouvement et est donc assimilable à une onde plane. Une

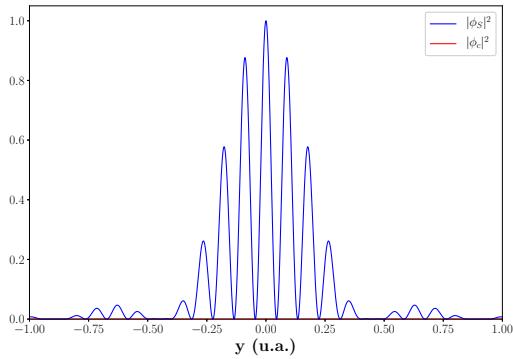


Figure 3 – Illustration d'un patron de diffraction à travers deux fentes pour un paquet d'onde large spatialement.

conclusion similaire avait aussi été obtenue pour la diffraction à une seule fente.

De même, pour un paquet d'onde étroit spatialement, si celui-ci est centré ($y_0 = 0$) et que sa vitesse est uniquement en x , les deux contributions sont nulles :

$$|\phi_S(y, t)|^2 = 0 \quad (38)$$

$$|\phi_C(y, t)|^2 = 0. \quad (39)$$

Dans ce cas, le paquet d'onde est tellement étroit que l'entièreté du paquet d'onde est simplement réfléchie par la barrière entre les deux fentes et aucune partie n'est transmise. Même si ce cas est trivial et n'est d'aucun intérêt pratique, il permet toutefois de confirmer que notre modèle théorique donne des prédictions sensées.

2.6 Unités atomiques

Afin d'éviter d'avoir à gérer des quantités très petites, le système d'unité le plus naturel à utiliser pour la diffraction d'électron semble être les unités atomiques (u.a.). Ce système d'unités est un système d'unités standard pour la résolution de problème de mécanique quantique où les valeurs de la charge élémentaire, de la masse de l'électron, de la constante de Planck réduite et de la constante de Coulomb sont prises comme références¹⁶ :

$$e = \hbar = m_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 1. \quad (40)$$

Dans ce système d'unités, l'équation de Schrödinger prend la forme simplifiée

$$i \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}). \quad (41)$$

Cette forme est beaucoup plus simple à traiter que dans le système international étant donné l'absence de terme très petit (comme \hbar^2 par exemple). Finalement, des unités dérivées de ce système peuvent être retrouvées. Entre autres, l'unité de longueur fondamentale est le rayon de Bohr $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(m_e e^2)$, l'unité d'énergie est le Hartree $E_H = m_e e^4/(4\pi\epsilon_0\hbar)^2$ et l'unité de temps est \hbar/E_H .

2.7 Conditions aux frontières

Dans un cas idéal où le domaine est infini, les conditions aux frontières sont simplement que la fonction d'onde doit tendre vers zéro à l'infini

$$\lim_{x, y \rightarrow \infty} \psi(x, y) = 0 \quad (42)$$

et qu'elle est nulle partout à l'intérieur de la barrière de potentiel (puits infini). Or, le domaine sur lequel le problème sera simulé est fini. Il est donc nécessaire de formuler le problème de manière équivalente sur un domaine fini avec de nouvelles conditions aux frontières répliquant l'équation (42). L'objectif principal est d'éviter d'avoir des réflexions de la fonction d'onde aux frontières qui viendrait compromettre la validité de la solution. Trois approches sont essentiellement disponibles.

La première approche consiste à fixer la fonction d'onde à zéro partout aux frontières du domaine. En supposant un domaine carré, on a :

$$\begin{cases} \psi(x, \pm L, t) = 0 \\ \psi(\pm L, y, t) = 0. \end{cases} \quad (43)$$

La frontière devient donc une barrière infinie réfléchissante. La norme de la fonction d'onde est donc conservée tout au long de la simulation, mais la partie réfléchie par la frontière peut avoir une incidence importante sur les résultats. Pour être valide, cette approche doit donc être implémentée sur un domaine très vaste afin de minimiser l'importance des réflexions.

La deuxième approche consiste à définir des conditions aux frontières transparentes^{17;18;19;20}. Afin d'établir une telle condition, il faut instaurer une certaine fonction aux frontières qui interfère destructivement avec la fonction d'onde incidente en ajustant certains paramètres. Il n'est toutefois pas aisés d'identifier les paramètres

nécessaires à ce que l'interférence soit totalement destructive. Cette approche, permet d'éviter tout problème de réflexion de la fonction d'onde. Cela revient donc à dire que le domaine simulé constitue une troncature d'un espace infini. Il est cependant à noter que cette méthode est beaucoup plus complexe que les deux autres.

Finalement, la dernière approche consiste à définir des conditions aux frontières périodiques :

$$\begin{cases} \psi(x, -L, t) = \psi(x, L, t) \\ \psi(-L, y, t) = \psi(L, y, t). \end{cases} \quad (44)$$

Cette approche est essentiellement la même que celle où la fonction d'onde est fixée à zéro aux frontières, sauf que dans ce cas, la fonction d'onde n'est pas réfléchie, mais réapparaît à l'autre extrémité du domaine. Elle ne règle donc pas le problème de réflexion à l'intérieur du domaine, mais permet de se débarrasser de réflexions dures aux frontières pouvant mener à des phénomènes d'interférence non désirés ou à des aberrations numériques²¹.

2.8 Application au problème

Il est maintenant possible de détailler les valeurs typiques des différents paramètres du montage (taille, séparation et épaisseur des fentes, vitesse des électrons et incertitude sur le paquet d'onde). Afin de trouver un ordre de grandeur, les paramètres utilisés dans l'expérience de Bach et al.² serviront de références. Effectivement, même si certaines mesures expérimentales de la diffraction d'électron ont été faites auparavant²², Bach et al. furent les premiers à observer la diffraction d'électrons individuels à travers deux fentes. Cette expérience semble donc être celle qui représente le mieux la situation que nous désirons simuler. Les paramètres suivants ont été utilisés dans cette expérience (u.a. désigne le système d'unité atomique)

$$\left\{ \begin{array}{l} a = 105 \text{ nm} = 1984 \text{ u.a.} \\ b = 167 \text{ nm} = 3157 \text{ u.a.} \\ \epsilon = 50 \text{ nm} = 945 \text{ u.a.} \\ E_k = 600 \text{ eV} = 22 \text{ u.a.}, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (45a) \\ (45b) \\ (45c) \\ (45d) \end{array}$$

où E_k est l'énergie cinétique d'un électron, ce qui correspond à une vitesse de

$$v_x = 1,46 \cdot 10^7 \text{ m/s} = 6,633 \text{ u.a.} \quad (46)$$

Le nombre d'onde associé est donc $k_x = 6,633$ (en unité atomique). La source utilisée est un filament thermionique de tungstène. Pour ce genre de source, l'incertitude sur l'énergie des électrons émis est d'environ 0,4 eV²³. En utilisant cette valeur de l'incertitude sur la distribution d'énergie ΔE , il est possible d'obtenir l'incertitude sur le vecteur d'onde dans la direction de propagation Δk_x (en supposant que la vitesse est purement perpendiculaire aux fentes $v_y = 0$) à partir de l'équation (6). On obtient alors

$$\Delta k_x = 4,184 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} = 0,00221 \text{ u.a.} \quad (47)$$

Afin de simplifier le problème, il est possible de supposer que l'étendue spatiale est le même en x et en y ($\Delta x = \Delta y$). Cela permet d'abord de trouver que $\Delta k_y = \Delta k_x$ et, ensuite, de déduire l'incertitude sur la position à l'aide du principe d'incertitude (15) :

$$\Delta x = \Delta y = 1,197 \cdot 10^{-8} \text{ m} = 226,2 \text{ u.a.} \quad (48)$$

3 Analyse des méthodes numériques

Cette section porte sur le choix d'une méthode de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps en deux dimensions. Afin de choisir la méthode la plus appropriée, différents critères ont été établis : la méthode sélectionnée se doit d'être précise (ordre de convergence élevé), suffisamment simple à implémenter et rapide à exécuter (faible complexité) et, finalement, la méthode devrait être répandue dans la littérature et reconnue (reconnaissance et fiabilité de la méthode). Différentes méthodes utilisées dans la littérature pour résoudre un problème similaire au nôtre sont présentées dans cette section et jugées sur la base des ces critères.

3.1 Méthode Spectrale

La méthode d'analyse spectrale appliquée à la résolution d'équations différentielles consiste à transformer le problème à la recherche des fonctions et valeurs propres d'un opérateur, dans notre cas, l'hamiltonien. En effectuant ce procédé, on détermine le spectre de cet opérateur, d'où le nom de la méthode.

La transformée de Fourier rapide, qui est simplement l'application d'une transformée de Fourier dans un espace discret, est alors un outil très puissant qui permet d'obtenir facilement l'ensemble des solutions recherchées. On parle alors d'une méthode pseudo-spectrale. Il s'avère donc qu'elle soit appropriée pour la résolution de l'équation de Schrödinger par sa nature de recherche de valeurs propres : il est simple d'appliquer la méthode pseudo-spectrale sans modification spécifique de la forme de l'équation différentielle. La méthode est d'ailleurs adéquate pour une variété de problèmes à potentiel en trois dimensions. Ainsi, a priori, peu importe le potentiel utilisé, un tel problème à potentiel à deux dimensions rend la méthode pertinente²⁴. Cependant, effectuer une transformée de Fourier rapide numériquement alourdit le temps de calcul. Une trop grande réduction du pas de temps rendrait alors la méthode peu efficace. En somme, bien que la méthode pseudo-spectrale ne soit pas autant documentée que d'autres méthodes, elle reste relativement simple à appliquer et offre une précision suffisante.

3.2 Différences finies

De par leur simplicité d'application, les méthodes de différences finies sont généralement privilégiées lors de la résolution numérique d'équations différentielles. Elles sont largement utilisées pour la résolution de l'équation de Schrödinger^{21;28;29}. Ces méthodes consistent essentiellement à former un maillage spatial et temporel en discrétisant les équations différentielles dans le domaine de l'espace ($\Delta x, \Delta y$) et du temps (Δt) en utilisant les formules aux différences finies. Ces dernières sont obtenues à l'aide du développement de Taylor des opérateurs présents dans l'équation différentielle. Cette méthode respecte donc à la fois nos critères de complexité et de fiabilité. Cependant, de très nombreuses méthodes utilisant les différences finies existent. Il est donc impératif d'examiner ces différentes méthodes afin de juger fidèlement de l'adéquation de l'utilisation de cette méthode au problème de diffraction d'électrons. Les caractéristiques pertinentes de plusieurs méthodes couramment utilisées sont présentées dans le tableau 1. Toutes ces caractéristiques ont été déterminées dans l'annexe A, mis à part pour les méthodes RK4 et TR-BDF2, où les caractéris-

tiques ont été trouvées dans la littérature^{30;25;26} (mis à part pour l'unicité du schéma numérique TR-BDF2 que nous n'avons pas été en mesure de trouver).

Les méthodes de différences finies peuvent être classées en deux grandes catégories : les méthodes explicites et implicites. Dans une méthode explicite, la solution à un temps ultérieur t_{n+1} est calculée directement à partir de l'état actuel du système au temps t_n , tandis que les méthodes implicites trouvent la solution ultérieure en résolvant une équation impliquant à la fois l'état actuel du système au temps t_n et le suivant au temps t_{n+1} . Les méthodes implicites sont donc plus lourdes à exécuter, car elles nécessitent la résolution d'un système linéaire à chaque itération. Elles ne sont généralement utilisées qu'en raison de leur meilleure stabilité numérique. De plus, une méthode idéale devrait aussi représenter une évolution unitaire dans le temps. Une évolution unitaire est assimilable au principe de conservation de l'information en mécanique quantique³¹, elle garantit donc que la fonction d'onde reste normalisée tout au long de l'évolution. Une méthode aux différences finies idéale posséderait donc les caractéristiques suivantes :

1. Explicite
2. Convergence inconditionnelle, ou critère de convergence très peu restrictif
3. Unitaire
4. Ordre de convergence élevé

En analysant le tableau 1, il est donc à conclure que les méthodes les plus adaptées sont Crank-Nicolson, TR-BDF2 ou Askar-Cakmak.

3.3 Éléments finis

La méthode des éléments finis est très répandue dans la résolution de problèmes numériques en science et en ingénierie. Elle a déjà été utilisée dans la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps et démontre un très bon accord avec la théorie^{32;33}. L'un de ces principaux avantages est la possibilité de définir une grille non uniforme. Elle permet donc de gérer des géométries complexes avec une relative facilité. Nous sommes donc en mesure d'augmenter la précision dans des domaines où le potentiel

Tableau 1 – Synthèse des méthodes de différences finies considérées

Méthode	Formulation	Critère de stabilité	Unitaire	Ordre de convergence
Euler explicite	explicite	Divergence inconditionnelle	Non	$\mathcal{O}(\Delta t + \Delta x^2)$
Runge-Kutta 4	explicite	Convergence conditionnelle	Non	$\mathcal{O}(\Delta t + \Delta x^4)$
Euler implicite	implicite	Convergence inconditionnelle	Non	$\mathcal{O}(\Delta t + \Delta x^2)$
Crank-Nicolson	implicite	Convergence inconditionnelle	Oui	$\mathcal{O}(\Delta t^2 + \Delta x^2)$
TR-BDF2	implicite	Convergence inconditionnelle ²⁵	—	$\mathcal{O}(\Delta t^2 + \Delta x^2)$ ²⁶
Askar-Cakmak ²⁷	explicite	Convergence inconditionnelle	Non	$\mathcal{O}(\Delta t^2 + \Delta x^2)$

varie rapidement. Dans notre cas, cette flexibilité permettrait de raffiner la grille où la fonction d'onde est susceptible de varier rapidement (près de la fente) et de la diluer dans des régions éloignées où la fonction d'onde est pratiquement nulle. Cependant, malgré sa bonne précision, sa flexibilité et sa fiabilité, la méthode des éléments finis est beaucoup plus complexe que d'autres méthodes comme les différences finies par exemple. Effectivement, cette méthode est non seulement très complexe à implémenter, elle est aussi généralement plus lente et lourde à exécuter que les différences finies pour une même précision^{34;35}. Ainsi, en raison de sa complexité et de sa lourdeur numérique, la méthode des éléments finis ne sera pas retenue.

3.4 Volumes finis

Basé sur les principes de conservation, la méthode des volumes finis permet de calculer les propriétés de la fonction sur chacun des noeuds définis sur son domaine. En subdivisant l'espace du domaine étudié en volumes élémentaires, de façon à entourer un noeud principal, la résolution d'une équation différentielle à une dimension à l'aide des volumes finis consiste à intégrer l'équation dans chacun de ces volumes. Il suffit donc d'utiliser une fonction d'intégration numérique et la discréteriser sur son domaine d'étude afin d'obtenir une équation constituée par les valeurs nodales³⁶. Dans le cas de l'équation de Schrödinger, le principe de conservation à l'étude est la conservation du courant de probabilité

$$\frac{d|\psi|^2}{dt} + \nabla \cdot \vec{J} = 0, \quad (49)$$

où $\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right)$ est le courant de probabilité. La force de la méthode se trouve donc à seulement évaluer les flux à l'intérieur du domaine déterminé.

Tout comme la méthode des éléments finis, la méthode des volumes finis offre une solution générale pour un maillage non uniforme³⁷, ce qui permet une plus grande flexibilité. Toutefois, bien que la méthode soit suffisamment simple pour être appliquée dans la résolution de l'équation de Schrödinger, le manque d'information à ce sujet dans la littérature scientifique restreint notre capacité à analyser en détail le comportement de la méthode. La méthode des volumes finis ne sera donc pas retenue non plus.

4 Choix de la méthode

Après considération des avantages et inconvénients de chacune des méthodes de résolution, il a été décidé que l'utilisation d'une méthode aux différences finies serait la plus appropriée. En effet, en ayant une compréhension plus approfondie sur ces méthodes dû à leur simplicité, il est possible d'en tirer davantage d'information sur leur stabilité lors d'une analyse. De ce fait, les risques d'échec de la méthode lors de la résolution sont beaucoup plus faibles et les pas de discréttisation peuvent être optimisés afin de minimiser le temps de calcul, mais aussi afin de respecter le critère de convergence. Concernant le choix de la formule, les méthodes de Crank-Nicolson, TR-BDF2 et d'Askar-Cakmak semblent tous être des choix appropriés pour la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Le choix final a été d'opter pour la méthode de Crank-Nicolson. Cette méthode, en plus d'être largement documentée dans la littérature, permet d'éviter tout problème de stabilité et est la seule méthode considérée qui est unitaire. Même si Askar-Cakmak offre l'avantage d'être explicite tout en étant théoriquement inconditionnellement stable, des problèmes de stabilité ont été rencontrés lors de la mise en oeuvre de la méthode en une dimension. Pour cette rai-

son, cette méthode a été abandonnée.

Concernant les conditions aux frontières, l'instauration de conditions frontières transparentes semble trop complexe pour les avantages que ces conditions procurent dans notre cas. Ainsi, des conditions aux frontières réfléchissantes (caractérisée par l'équation (43)) ont été choisies en raison de leur simplicité. Ces conditions aux frontières offrent aussi l'avantage d'être très faciles à programmer et devraient permettre d'obtenir des résultats tout à fait valides si le domaine est simplement suffisamment étendu en y pour éviter toute réflexion de la fonction d'onde aux frontières.

5 Mise en oeuvre de la méthode numérique

Comme toute méthode de différences finies, la première étape nécessaire à la résolution est de discréteriser l'espace (dx, dy) et le temps (dt). Dans ce cas, la discréétisation est effectuée sur une grille rectangulaire ayant des pas constants en x et en y et comportant respectivement N_x points de discréétisation en x et N_y en y . Ainsi, la fonction d'onde au temps $t_n = n \cdot dt$ et à la position $(y_i = i \cdot dy, x_j = j \cdot dx)$ est dénotée $\psi_{i,j}^n$. Il est ensuite nécessaire de discréteriser l'équation de Schrödinger (41). La discréétisation de la dérivée temporelle est simplement donnée par le schéma numérique de Crank-Nicolson (voir annexe A.3). En ce qui a trait à la discréétisation du laplacien, plusieurs choix sont possibles. Effectivement, il serait possible de choisir une discréétisation d'ordre deux en croix, en «x» ou encore n'importe quelle combinaison linéaire des deux. Le laplacien en croix a été choisi arbitrairement dans notre cas. Les simulations avec ce laplacien donnaient des résultats satisfaisants. Une étude de résultats avec d'autres types de laplacien n'a donc pas été entreprise. En assumant que le pas d'espace est le même en x et en y ($dx = dy = h$), cette discréétisation en croix s'écrit comme

$$\nabla^2 \psi = \frac{\psi_{i-1,j} + \psi_{i,j-1} - 4\psi_{i,j} + \psi_{i+1,j} + \psi_{i,j+1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2). \quad (50)$$

En appliquant la méthode de Crank-Nicolson et un laplacien en croix d'ordre deux à l'équation de Schrödinger (41), les équations discréétisées suivantes sont obtenues

$$\begin{aligned} \beta_{i,j} \psi_{i,j}^{n+1} - \alpha (\psi_{i-1,j}^{n+1} + \psi_{i,j-1}^{n+1} + \psi_{i+1,j}^{n+1} + \psi_{i,j+1}^{n+1}) = \\ \gamma_{i,j} \psi_{i,j}^n + \alpha (\psi_{i-1,j}^n + \psi_{i,j-1}^n + \psi_{i+1,j}^n + \psi_{i,j+1}^n), \end{aligned} \quad (51)$$

où $\alpha = \frac{idt}{4h^2}$, $\beta_{i,j} = 1 + 4\alpha + iV_{i,j}$ et $\gamma_{i,j} = 1 - 4\alpha - iV_{i,j}$. Avec cette équation et la forme discréétisée des conditions aux frontières réfléchissantes (43)

$$\psi_{0,j}^n = \psi_{N_y,j}^n = \psi_{i,0}^n = \psi_{i,N_x}^n = 0 \quad \forall n, i, j, \quad (52)$$

l'évolution du système à l'intérieur de la grille est complètement déterminée. En outre, le potentiel $V_{i,j}$ a été défini comme étant un potentiel carré suffisamment élevé (sa hauteur a été fixée à 10^{10} u.a.) pour que son comportement soit similaire à celui d'un potentiel infini et que l'entièreté de la fonction d'onde incidente soit réfléchie lors de l'impact avec le mur. Sous forme discréétisée, on a

$$V_{i,j} = 10^{10} \text{ si } (x_j, y_i) \in W, \quad (53)$$

où W est défini par (25) dans le cas avec une seule fente et par (35) s'il y a deux fentes.

Ce groupe d'équations discréétisés peut être écrit de manière compacte sous la forme d'un système d'équations matriciel à l'aide de la méthode des matrices 2D. Cette méthode consiste essentiellement à écrire le domaine bidimensionnel où la fonction d'onde est définie comme un vecteur unidimensionnel en faisant correspondre le noeud (i, j) à la ligne $p_{i,j} = i + (j - 1)N_y$ du vecteur. Ce faisant, le problème consiste simplement à trouver la fonction d'onde au temps $n + 1$ à partir de celle au temps n en résolvant le système matriciel suivant :

$$\mathbf{M}_1 \vec{\psi}^{n+1} = \mathbf{M}_2 \vec{\psi}^n. \quad (54)$$

La forme explicite des matrices \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 est présentée dans l'annexe B. Il est à noter que comme le potentiel n'a aucune dépendance temporelle, les matrices \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 restent constantes pour toute la simulation et n'ont donc qu'à être définies une seule fois. L'algorithme que le programme exécute est donc très direct et est illustré à la figure 4. Celui-ci se décompose essentiellement en deux étapes : l'initialisation et les itérations. Lors de l'étape d'initialisation, les différents paramètres comme la taille de la grille (N_x, N_y), les pas (dx, dy, dt) et les dimensions du potentiel (ϵ, a, b) sont d'abord définis. À partir de

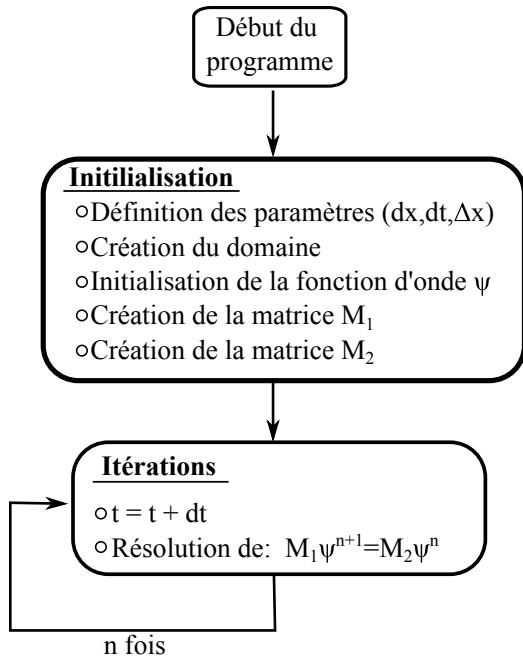


Figure 4 – Représentation schématique des étapes exécutées par le programme.

ces paramètres, les matrices \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 peuvent être initialisées et gardées en mémoire pour le reste de la simulation. La dernière étape de l'initialisation est de fixer les paramètres du paquet d'onde gaussien initial ($\Delta x, \Delta y, k_{0,x}, k_{0,y}, x_0, y_0$) qui est défini par l'équation (23). Ensuite, le système peut être actualisé. Pour ce faire, le temps est actualisé ($t = t + dt$) et la fonction d'onde est redéfinie en résolvant le système (54). Cette dernière étape d'actualisation est répétée un certain nombre de fois de manière itérative jusqu'à l'arrêt du programme.

Afin de pouvoir comparer leur efficacité, le code a été implémenté dans deux langages de programmation différents : MATLAB et Python. Dans les deux cas, l'étape la plus importante du programme est la résolution du système linéaire ($\mathbf{M}_1\vec{\psi}^{n+1} = \mathbf{M}_2\vec{\psi}^n$). Afin de diminuer le temps requis pour effectuer cette étape et pour optimiser la mémoire vive requise, des matrices creuses ont été utilisées pour définir \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 . L'étape de résolution était ensuite effectuée avec la commande $A \setminus b$ en MATLAB et `scipy.sparse.linalg.spsolve` en Python (de la bibliothèque de calcul scientifique Scipy). Ces deux fonctions sont spécialement optimisées pour la résolution de système linéaire avec des matrices creuses et emploient la méthode de résolution la plus adéquate selon la forme de la matrice. Or,

malgré l'utilisation de matrices creuses, il est certain que le temps de résolution du système et la mémoire utilisée pour garder en mémoire les matrices limitent le pas de discréétisation minimal pouvant être utilisé (pour une étude plus détaillée et les valeurs typiques de discréétisation voir section 6).

6 Évaluation détaillée de la performance

Pour pouvoir être en mesure d'analyser adéquatement les résultats obtenus par l'algorithme, il est nécessaire d'évaluer préalablement ses performances afin de bien identifier ces limites de fonctionnement. Cette section porte sur l'évaluation des deux limitations présentes dans le code, c'est-à-dire la limitation en temps et en mémoire. Toute l'analyse subséquente a été effectué avec un ordinateur Nitro N50-600 de Acer avec un processeur Intel Core i5-8400 2,81 GHz et 8,00 Go de RAM.

6.1 Limitation en temps

La première limitation du code est le temps nécessaire au programme pour compléter une exécution. Ce temps se décompose essentiellement en deux : le temps d'initialisation pour construire le système, et le temps de résolution où le système matriciel est résolu un certain nombre de fois. L'étape d'initialisation n'est exécutée qu'une seule fois. Le temps nécessaire pour compléter cette étape est donc beaucoup moins important que celui de résolution, où un système matriciel est résolu un très grand nombre de fois au cours d'une exécution complète du programme. C'est donc le temps nécessaire pour une seule itération qui a la plus grande importance et qu'il faut donc optimiser au maximum. Ce temps dépend de la taille de la grille (donc des pas spatiaux dx, dy), car la taille du système matriciel est $N^2 \times N^2$, où N est le nombre de noeuds en x et en y ($N = N_x = N_y$). Le pas de discréétisation en temps dt n'affecte pas le temps de résolution pour une itération. Celui-ci fait plutôt varier le nombre d'itérations nécessaires pour simuler le système pendant un certain temps t (en supposant que chaque itération prend en moyenne le même temps de résolution).

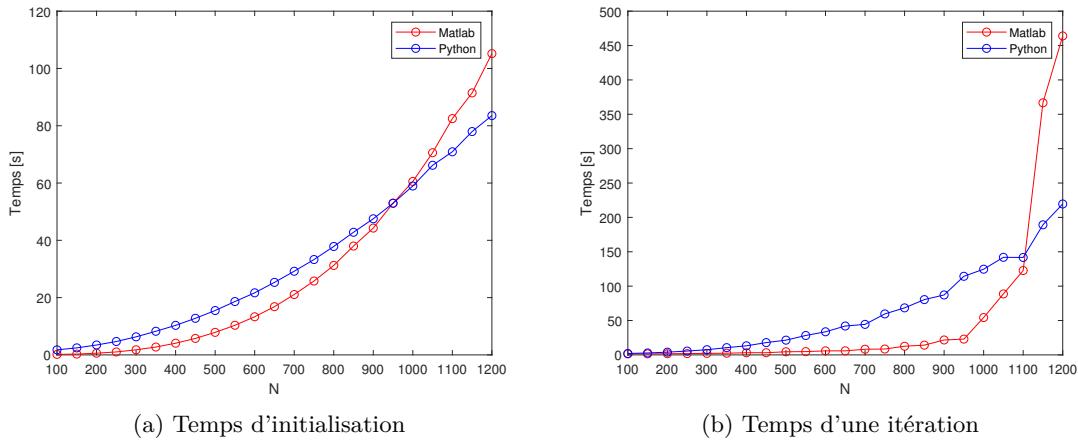


Figure 5 – Comparaison entre les temps nécessaires pour les étapes d'initialisation et d'itération entre les langages de programmation MATLAB et Python

Comme il a été mentionné précédemment, de façon à pouvoir comparer l'efficacité de l'algorithme, celui-ci a été implémenté sous deux langages, soit MATLAB et Python. La figure 5 montre les temps des étapes d'initialisation et d'itération en fonction de N . En observant cette figure, on constate que l'algorithme sous MATLAB semble être plus efficace si N est inférieur à environ 1000, alors que le même algorithme sous Python semble mieux performer pour des N plus élevés. Il est à noter que la figure 5b ne représente que le temps nécessaire à l'exécution d'une seule itération. Pour effectuer notre simulation avec un domaine très large, il semble donc a priori préférable de sélectionner le langage Python afin de minimiser le temps de calcul. Or, considérant qu'une simulation moyenne compte environ 300 itérations et qu'on fixe raisonnablement comme temps de simulation maximal acceptable 8 heures, le temps maximal acceptable pour une seule itération (en négligeant le temps d'initialisation) est d'environ 100 secondes. Un tel temps correspond à une taille maximale de $N \approx 1050$ en MATLAB et $N \approx 900$ en Python. Nous verrons par la suite que ce maillage n'est pas suffisant avec l'insertion des paramètres de l'expérience de Bach et al.

6.2 Limitation en mémoire

En plus d'une certaine limitation en temps, le programme est aussi limité par la mémoire disponible de l'ordinateur utilisé. En effet, le programme MATLAB/Python requiert une certaine quantité de mémoire vive de la part de l'ordinateur pour exécuter l'algorithme. La figure 6 pré-

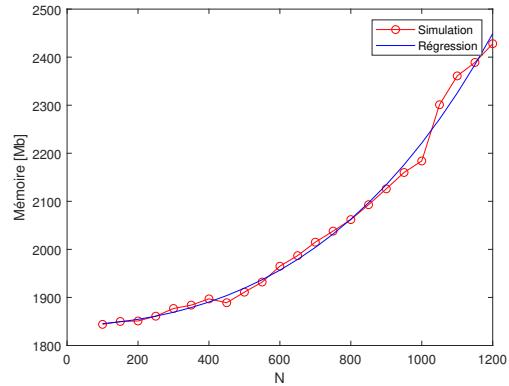


Figure 6 – Mémoire nécessaire afin d'exécuter une itération sous MATLAB

sente la mémoire que demande le programme à l'ordinateur pour effectuer une seule itération de l'algorithme.

Pour toutes les tailles de grilles évaluées sur la figure, la mémoire utilisée n'est pas un problème : la mémoire maximale nécessaire à MATLAB est d'environ 2,43 Gb, mais la grande majorité des ordinateurs actuels possèdent une mémoire vive supérieur à cette valeur. Cependant, cette mémoire requise semble croître exponentiellement. En extrapolant la courbe obtenue, on trouve qu'un ordinateur de 8 Gb de RAM ne pourrait exécuter un code que pour des valeurs plus petites que d'environ $N = 2480$. Cette limitation en mémoire est moins restrictive que celle en temps qui a été établie plus haut et semble donc superficielle dans notre cas.

6.3 Effet de la discréétisation

En plus de ces limitations en temps et en mémoire, certaines conditions sur la discréétisations doivent être respectées pour assurer le bon fonctionnement du programme. Une condition très importante sur le pas d'espace émerge de la considération qu'un signal présentant des oscillations très rapides (la fonction d'onde) est simulé sur un domaine discret. Il est très important de bien résoudre ces oscillations, car la fréquence spatiale d'une fonction d'onde correspond conceptuellement à sa quantité de mouvement par l'équation (8b). Or, tel qu'illustré à la figure 7, si la discréétisation spatiale est trop grossière, la fréquence spatiale du paquet d'onde est modifiée de manière importante et, donc, la quantité de mouvement du paquet d'onde simulé n'est plus la bonne.

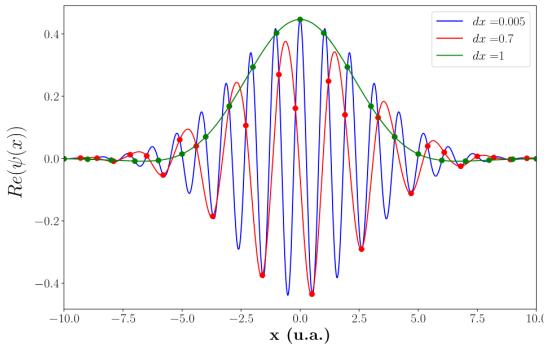


Figure 7 – Variation de la fréquence spatiale simulée en fonction pour différents pas de discréétisation spatiales.

Cet effet de la discréétisation peut avoir des conséquences importantes. Par exemple, le [vidéo 1](#) présente la propagation d'un paquet d'onde qui a théoriquement une quantité de mouvement très élevée en x (vers l'axe des x positif) avec trois valeurs de dx très près les unes des autres, mais étant trop grossières pour résoudre complètement la fréquence spatiale du paquet d'onde. Il en résulte trois comportement totalement différents et aberrants : un qui se propage très lentement vers la droite, un qui reste immobile et le dernier qui se propage selon l'axe des x négatif. Ainsi, le comportement change drastiquement pour des variations minimes de dx .

Afin d'éviter ce problème, il peut être utile de faire appel à un résultat du théorème d'échantillonage.

Le théorème d'échantillonage, ou théorème de Shannon, implique que pour représenter adéquatement par échantillonage une fréquence contenue dans un signal, la fréquence d'échantillonage doit être au moins le double de celle-ci³⁸. Dans notre cas, considérant que la fréquence spatiale que l'on souhaite échantillonner adéquatement est celle du vecteur d'onde central k_x , cette condition se traduit par :

$$dx \leq \frac{\pi}{k_x}. \quad (55)$$

En appliquant cette conditions aux valeurs expérimentales citées dans la section 2.8, on a que $dx \leq 0,47$ u.a.. Avec une telle condition, il est impossible d'effectuer une simulation avec les autres paramètres expérimentaux tout en respectant les limitations de temps et de mémoire. Par exemple, pour ne simuler que la largeur du potentiel central $2a$ pour le cas à deux fentes avec les valeurs expérimentales, il serait nécessaire d'avoir 3968 points en x avec $dx = 0,47$ u.a.. Un tel nombre de noeuds est déjà supérieur aux conditions sur le temps et la mémoire énumérées précédemment. Nul va sans dire que la simulation d'une grille complète est irréalisable avec une telle condition et les paramètres expérimentaux.

De ce fait, il a été nécessaire de redéfinir les paramètres arbitrairement pour obtenir des résultats de simulation phénoménologiquement valides en dépit de paramètres physiquement invalides. Afin de réduire notre espace de simulation et d'avoir une fréquence spatiale k_x d'un ordre de grandeur similaire aux fentes et permettant donc la présence de phénomènes d'interférence, les nouveaux paramètres suivants ont été définis (ou ont été définis dans les intervalles suivants) :

$$\left\{ \begin{array}{l} dx = dy \in [0, 025, 0, 08] \text{ u.a.} \\ dt \in [0, 005, 0, 01] \text{ u.a.} \end{array} \right. \quad (56a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \epsilon \in [0, 1, 0, 3] \text{ u.a.} \\ k_x = 20 \text{ u.a.} \end{array} \right. \quad (56b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \epsilon \in [0, 1, 0, 3] \text{ u.a.} \\ k_x = 20 \text{ u.a.} \end{array} \right. \quad (56c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \epsilon \in [0, 1, 0, 3] \text{ u.a.} \\ k_x = 20 \text{ u.a.} \end{array} \right. \quad (56d)$$

La condition (55), devient alors $dx \leq 0,15$ u.a. et est respectée pour toutes les valeurs de dx dans l'intervalle mentionné.

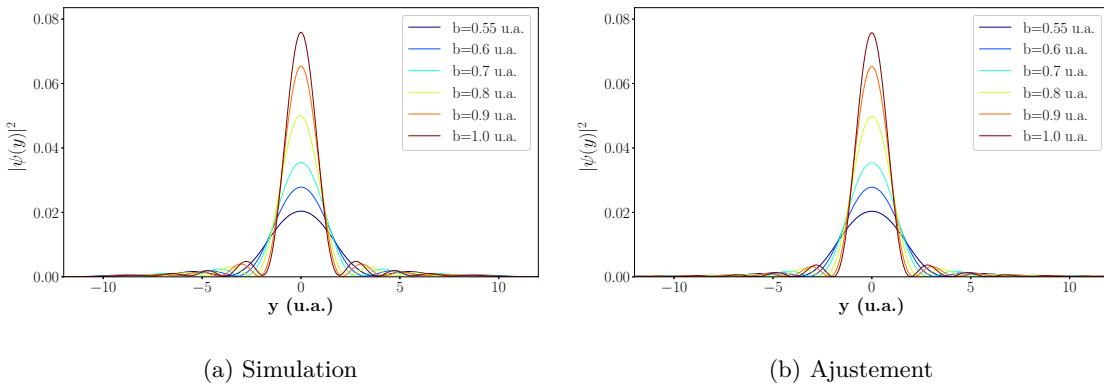


Figure 8 – Patron de diffraction obtenu pour la simulation d'un paquet d'onde large avec une seule fente (a) et ajustement de ce patron avec le modèle théorique (b).

7 Résultats

7.1 Diffraction à travers une fente

À l'aide du programme présenté dans les sections précédentes, la diffraction d'un électron à travers une et deux fentes a été simulée. Dans le cas avec une seule fente, les deux cas limites (paquet d'onde large et étroit) ont été étudiés et comparés avec la forme analytique prédictive par notre modélisation. En négligeant les termes croisés dans l'expression de la densité de probabilité, cette forme analytique est donnée par la somme des équations (31) et (32) pour un paquet d'onde large et par la somme de (33) et (34) pour un paquet d'onde étroit. Or, dans ces équations, plusieurs paramètres ne sont pas définis ou sont difficiles à déterminer. Par exemple, les paramètres A et B décrivant l'importance relative de la contribution de troncature et de confinement ne sont pas définis et le temps t entre le moment où le paquet d'onde franchit la fente et le moment où le patron de diffraction est mesuré est difficile à évaluer, ou du moins très imprécis, considérant l'étendue spatiale du paquet d'onde et l'épaisseur des fentes. Par conséquent, pour comparer les résultats numériques obtenus et les prédictions théoriques, les patrons de diffraction simulés ont été ajustés à l'aide des équations théoriques où tous les coefficients sont remplacés par des paramètres à ajuster. La similitude entre les résultats théoriques et numériques peut alors être analysée en observant si l'ajustement de courbe reproduit bien la forme générale du patron simulé, mais aussi en observant si les paramètres d'ajustement varient de la même façon que dans le modèle théorique en fonction de paramètres fixes de la simulation comme la taille des fentes ou l'étendue du paquet d'onde.

7.1.1 Paquet d'onde large spatialement

Pour un paquet d'onde large spatialement, le modèle théorique est donné par la somme des contributions de troncature et de confinement qui sont respectivement

$$|\phi_{out}(y, t)|^2 = A \frac{\sin^2(Cy)}{(Cy)^2} \quad (57)$$

$$|\phi_C(y, t)|^2 = By^2 \frac{\sin^4(Cy)}{(Cy)^4}. \quad (58)$$

Ici, les paramètres A et B définissent l'amplitude relative des deux contributions alors que le paramètre $C = \frac{bm}{ht}$ définit la dispersion angulaire du paquet d'onde. Cette simulation a été effectuée sur un domaine carré de 30 u.a par 30 u.a. avec des pas $dx = dy = 0,08$ u.a. et $dt = 0,005$ u.a., un paquet d'onde asymétrique avec $\Delta x = 1$ et $\Delta y = 2$ et une épaisseur de fente ϵ de 0,3 u.a.. La largeur des fentes b a été variée entre 0,55 et 1,0 u.a. afin d'étudier la variation du patron en fonction de la largeur de la fente. Selon notre modèle, le patron de diffraction obtenu devrait être un sinus cardinal avec des pics secondaires amplifiés par la contribution de confinement. Le **vidéo 2** présente une animation de la diffraction d'un paquet d'onde large à travers une fente pour laquelle $b = 0,9$ u.a. Avec cette animation, on voit que le patron de diffraction théorique est assez bien reproduit avec un maximum central et des maxima secondaires distribués de manière symétrique de part et d'autre de la fente. Les patrons de diffractions obtenus de même que l'ajustement des patrons à l'aide des équations (57) et (58) sont présentés à la figure 8. En analysant la figure, il est d'une part possible de remarquer que le modèle théorique semble très bien reproduire le patron de diffraction simulé : l'ajustement de

courbe semble très bien reproduire la forme du patron simulé pour toutes les largeurs de fentes. Plus quantitativement, si l'on définit l'erreur sur l'ajustement de courbe comme la moyenne quadratique de l'erreur sur chaque point de l'ajustement

$$Err = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n \left(|\psi_{i,num}|^2 - |\psi_{i,regr}|^2 \right)^2, \quad (59)$$

on obtient une valeur de l'erreur sur l'ajustement qui est assez constante pour toutes les largeurs de fente. La valeur de cette erreur est $(1,3 \pm 0,2) \cdot 10^{-7}$ et est donc très minime. Sa constance semble indiquer que l'approximation du paquet d'onde large est valide pour toutes ces largeurs de fente. D'autre part, le comportement du patron en fonction de la largeur des fentes reproduit le comportement théorique. Effectivement, le paramètre C est directement proportionnel à b . Donc, plus la largeur des fentes est petite plus le patron doit être étendu spatialement. En fait, en étudiant la variation du paramètre C en fonction de b illustré à la figure 9, le comportement linéaire attendue est bel et bien observé. La théorie et les résultats numériques pour la diffraction à travers une seule fente pour un paquet d'onde large semblent donc très bien correspondre.

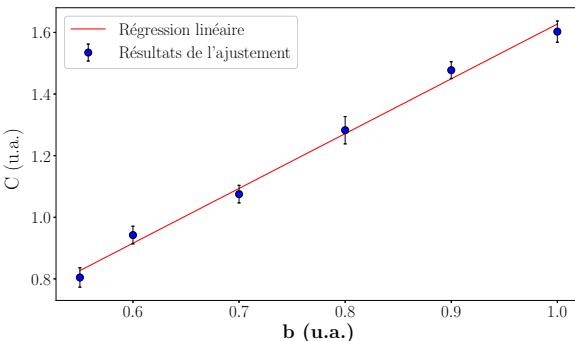


Figure 9 – Variation du paramètre C en fonction de la largeur des fentes pour un paquet d'onde large spatialement.

De plus, il peut aussi être intéressant d'observer comment varie l'amplitude des deux contributions. Le rapport entre l'effet de troncature et de confinement (A/B) est présenté à la figure 10. Avec cette figure, il est d'abord possible d'observer que l'amplitude de la contribution de troncature est beaucoup plus importante

que celle de confinement. Ce résultat est cohérent avec l'interprétation de la contribution de confinement qui se veut une correction à l'effet de troncature pour tenir en compte de l'épaisseur finie des fentes^{15;13}. Selon cette définition, il est donc tout à fait normal que cette contribution soit beaucoup plus faible. La variation du ratio semble aussi présenter une légère diminution en fonction de la largeur des fentes. Il apparaît raisonnable de supposer que, dans ce cas limite, plus une partie importante du paquet d'onde incident est tronquée, plus la contribution de troncature est importante. Cette interprétation semble en accord avec la diminution observée du ratio, car plus la fente est petite plus une petite partie du paquet d'onde initial est transmise et donc plus la troncature est importante.

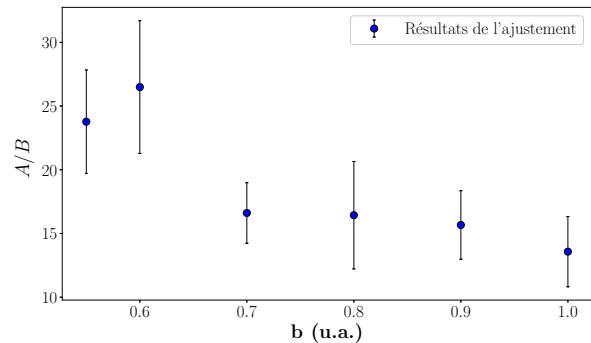


Figure 10 – Variation du ratio de l'amplitude de la contribution de troncature et de confinement en fonction de la largeur des fentes pour un paquet d'onde large spatialement.

7.1.2 Paquet d'onde étroit spatialement

Pour un paquet d'onde étroit spatialement transmis à travers une seule fente, le patron attendu est la somme d'une gaussienne centrale (contribution de troncature) et de maxima secondaires modulés par une gaussienne. Les équations utilisées pour ajuster les patrons d'interférence observés sont donc

$$|\phi_{out}(y, t)|^2 = Ae^{-By^2} \quad (60)$$

$$|\phi_C(y, t)|^2 = Ce^{-Dy^2} \sin^2(Ey). \quad (61)$$

Dans ce cas, la simulation a été effectué avec les mêmes paramètres de discréttisation que dans le cas précédent, mais le paquet d'onde a une largeur $\Delta x = \Delta y = 0,7$ et la fente a été variée

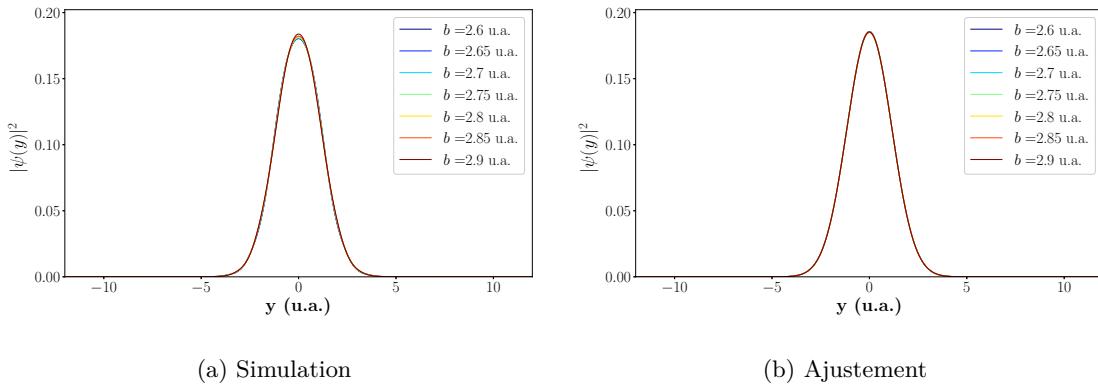


Figure 11 – Patron de diffraction obtenu pour la simulation d'un paquet d'onde étroit avec une seule fente (a) et ajustement de ce patron avec le modèle théorique (b).

entre 2,6 et 2,9 u.a.. Le **vidéo 3** présente une animation de la diffraction d'un paquet étroit à travers une seule fente ayant $b = 2,7$ u.a.. Avec cette animation, on constate que le paquet d'onde est essentiellement in affecté par la présence des fentes. Il est somme toute possible d'observer une légère perturbation dans sa forme lors de sa propagation, s'exprimant comme un certain élargissement de la gaussienne lors de la mesure du patron de diffraction. Tous les patrons de diffractions obtenus dans ce cas de même que leur ajustement sont présentés à la figure 11. Ce cas limite est beaucoup moins riche que le précédent. Tous les patrons de diffractions observés sont essentiellement des gaussiennes qui ne diffèrent que très peu entre elles. Le modèle théorique reproduit une fois de plus très bien l'allure générale du patron observé. On obtient encore une erreur quadratique moyenne presque constante pour toutes les largeurs de fentes de $(9,5 \pm 0,6) \cdot 10^{-7}$ u.a.. Cette erreur est encore très faible ce qui confirme la bonne concordance entre l'ajustement du modèle théorique et la simulation numérique. De plus, même si la contribution de confinement ne semble pas être présente à première vue, celle-ci contribue effectivement à l'ajustement. En fait, en observant le ratio de l'intensité de chaque contribution, on remarque que la contribution de confinement est encore environ un ordre de grandeur inférieur à la contribution de troncature. De plus, pour confirmer que le modèle fonctionne correctement, il est possible d'observer comment varie les paramètres avec la largeur des fentes. Notamment, le paramètre E de l'équation (61) devrait être linéaire avec la taille des fentes selon (34). La figure 12 confirme que cette relation linéaire entre E et b . Bref, autant pour le cas du paquet d'onde large

que le paquet d'onde étroit, les résultats numériques concordent avec la théorie autant au niveau de l'apparence du patron de diffraction que du comportement des paramètres. Cette concordance semble donc autant supporter la validité du modèle théorique que de nos résultats numériques.

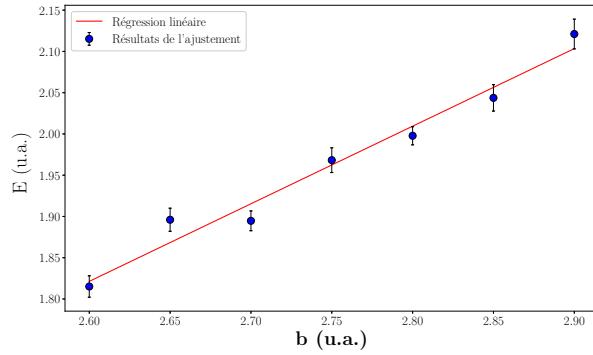


Figure 12 – Variation du paramètre E en fonction de la largeur des fentes pour un paquet d'onde étroit spatialement.

7.2 Diffraction à travers deux fentes

Le profil théorique de la diffraction à travers deux fentes pour un paquet d'onde large spatialement est donné par un cosinus au carré modulé par un sinus cardinal tel que décrit par l'équation (36). Il est donc possible d'établir la correspondance avec le modèle théorique en effectuant un ajustement de courbe à l'aide de trois paramètres :

$$|\psi|^2 = A \left[\frac{\sin((b' - a')y)}{(b' - a')y} \right]^2 \times \cos^2 [(b' + a')y], \quad (62)$$

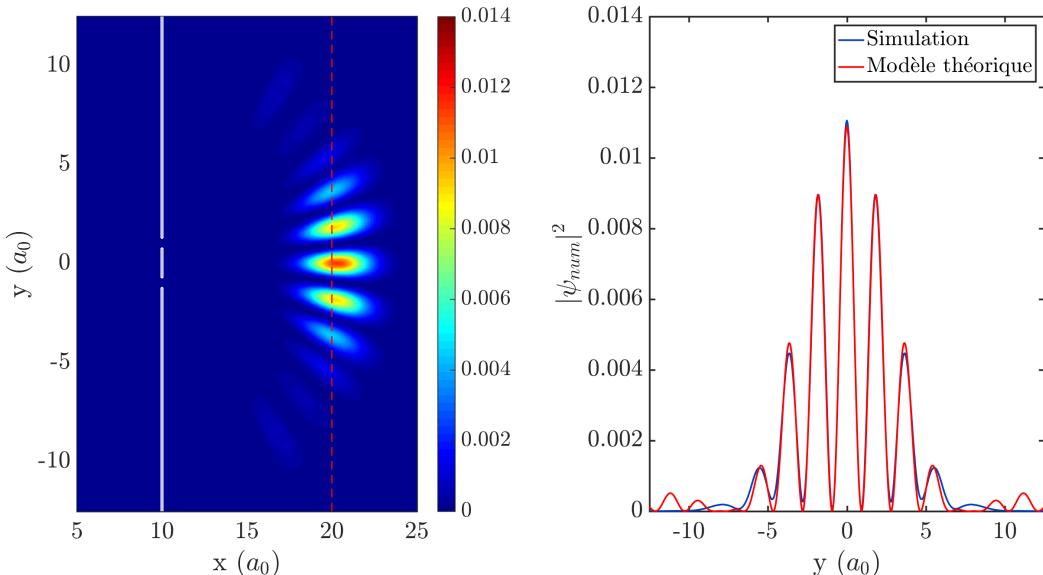


Figure 13 – Diffraction à deux fentes pour un paquet d’onde large spatialement. La simulation a été réalisée avec 170 itérations, $dx = 0,05$, $dt = 0,01$, $a = 0,75$, $b = 1,25$, $\epsilon = 0,1$, $\Delta x = 1,25$, $\Delta y = 3$ et $k = 20$. Les résultats des paramètres d’ajustement sont $A = 0,01088 \pm 0,00007$, $a' = 0,7771 \pm 0,0014$, $b' = 0,9070 \pm 0,014$. Le [vidéo 4](#) présente une animation complète de la simulation de la diffraction.

où A est un facteur d’amplitude, a' et b' correspondent aux paramètres de fentes à une constante près. Celle-ci est proportionnelle au temps après le passage des fentes du paquet d’onde. Cette forme permet donc d’étudier plus facilement la relation entre les paramètres à ajuster et les paramètres de la simulation. Par exemple, l’utilisation du ratio b'/a' est particulièrement pertinente dans cette analyse, car elle permet de s’affranchir du paramètre temporel de la simulation et de comparer directement à la valeur théorique avec les paramètres a et b de la simulation.

Afin de maintenir une correspondance avec les paramètres énoncés dans la section 2.8, un ratio d’environ 1,67 a été maintenu entre les paramètres b et a du modèle de la diffraction à travers deux fentes. Cependant, la largeur ϵ des fentes a été réduite afin d’être cohérent avec l’approximation émise dans le modèle théorique où celle-ci est considérée comme étant négligeable. Le [vidéo 4](#) présente une animation de la simulation de la diffraction à travers deux fentes avec $a = 0,75$ et $b = 1,25$ et pour un paquet d’onde de largeur $\Delta x = 1,25$ et $\Delta y = 3$. Le résultat final du patron de diffraction est présenté à la figure 13 et montre une bonne concordance avec le profil de diffraction rapporté expérimentalement². En effet, le même nombre de maxima peut être

observé entre notre simulation et les résultats expérimentaux de diffraction d’électron.

La figure 13 montre que les résultats reproduisent sensiblement bien le patron de diffraction prédit par le modèle théorique. Cependant, le ratio b'/a' ne correspond pas à celui de la simulation. En effet, nous obtenons un ratio de 1,16 plutôt que de 1,66. Les résultats obtenus semblent suggérer que les dimensions effectives des fentes ne sont pas les mêmes que les dimensions physiques imposées par la simulation. L’écart entre les résultats de la simulation et le modèle théorique pourrait partiellement être expliqué par le fait que la formule analytique n’est valide que dans l’approximation de Fraunhofer où l’observation du patron de diffraction se fait loin des fentes. Or, la figure 13 montre que le front d’onde est encore circulaire au moment de l’observation des fentes. On remarque également la présence de maxima secondaires qui n’ont pas encore atteint la ligne de projection en $x = 20a_0$, ce qui explique notamment la différence du modèle d’ajustement loin de la position du pic central.

Afin de vérifier une certaine correspondance entre le modèle théorique et numérique, il est possible de faire varier la proportion des fentes et d’étudier le comportement de l’évolution du ratio b/a et b'/a' . En effet, le modèle analytique

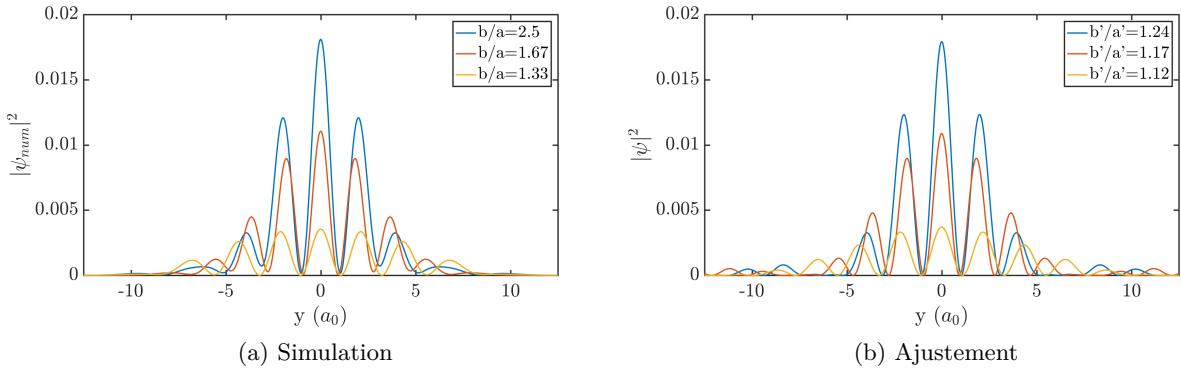


Figure 14 – Patron de diffraction obtenu pour la simulation d'un paquet d'onde large avec deux fentes (a) et ajustement de ce patron avec le modèle théorique (b).

montre que l'étalement du patron dépend du rapport de taille entre les paramètres a et b . La figure 14 montre l'impact de la dimension des fentes déterminée par le ratio b/a sur le profil de diffraction. On remarque que la réduction du ratio entraîne un étalement du profil de diffraction comme attendu théoriquement.

Malgré l'écart observé entre b'/a' et b/a , il est pertinent d'analyser si les deux ratios évoluent de la même façon. On remarque sur la figure 15 qu'il existe une relation linéaire entre ce ratio de la taille réelle des fentes et la valeur des paramètres de régression. Ainsi, le modèle numérique est à même de reproduire le comportement du patron de diffraction prévu par le modèle théorique.

rait donc intéressant d'étudier si c'est également le cas pour une diffraction d'un paquet d'onde large à travers des fentes multiples. En utilisant le modèle classique, on trouve, dans l'approximation de Fraunhofer, que le profil de diffraction à travers N fentes, où N est pair et est donné par¹⁰ :

$$|\psi|^2 \propto \left[\frac{\sin\left(\frac{m(b-a)}{2t\hbar}y\right)}{\frac{m(b-a)}{2t\hbar}y} \right]^2 \times \left[\sum_{p=1}^{N/2} \cos\left((2p-1)\frac{m}{2t\hbar}(b+a)y\right) \right]^2 \quad (63)$$

où la somme de $p = 1$ à $N/2$ tient compte de la contribution à la diffraction de chaque paire de fentes.

Le **vidéo 5** montre une animation de la diffraction d'un paquet d'onde de largeur $\Delta x = 1,25$ et $\Delta y = 3,75$ à travers $N = 4$ fentes avec comme paramètre de fentes $a = 0,75$ et $b = 1,25$. Le nombre de fentes a été limité à seulement 4 en raison des contraintes sur la taille du maillage et du temps de simulation. En effet, afin de maintenir le cas limite d'un paquet d'onde large spatialement par rapport au réseau de fentes, une grille sensiblement plus grande aurait été nécessaire pour les cas avec $N > 4$.

Pour 4 fentes, l'équation (63) prend alors simplement la forme

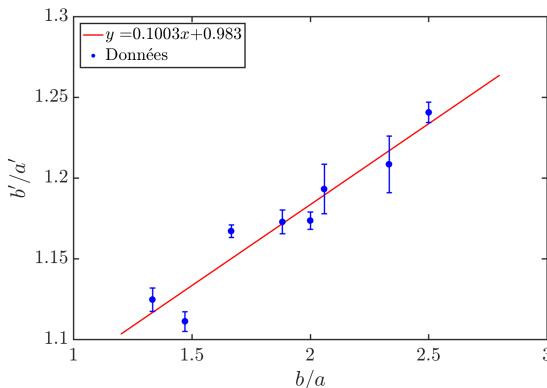


Figure 15 – Analyse des paramètres de régression a' et b' .

7.3 Diffraction à travers N fentes

Les résultats précédents ont montré que le patron de diffraction d'un paquet d'onde dans le cas limite d'un paquet d'onde large est très similaire aux cas classiques de la diffraction d'une onde plane à travers une ou deux fentes. Il se-

$$|\psi|^2 = A \left[\frac{\sin((b' - a')y)}{(b' - a')y} \right]^2 \times [\cos((b' + a')y) + \cos(3(b' + a')y)]^2 \quad (64)$$

Il est alors possible d'utiliser la même technique d'ajustement de courbe que pour la diffraction à deux fentes avec les paramètres a' , b' et A pour analyser la correspondance avec le modèle

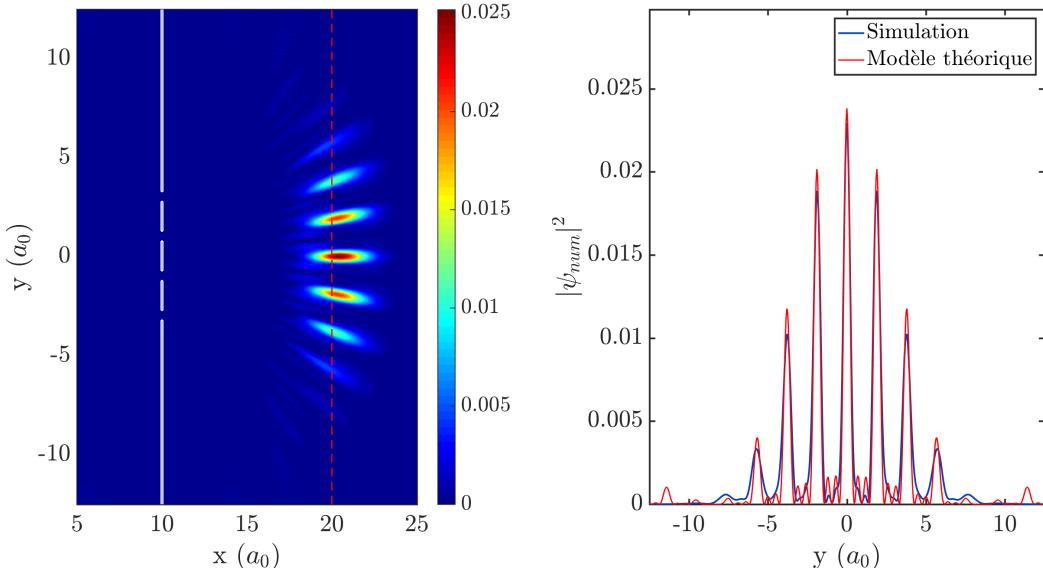


Figure 16 – Diffraction à travers N=4 fentes pour un paquet d’onde large spatialement. La simulation a été réalisée avec 160 itérations, $dx = 0,05$, $dt = 0,01$, $a = 0,75$, $b = 1,25$, $\epsilon = 0,1$, $\Delta x = 1,25$, $\Delta y = 3,75$ et $k = 20$. Les résultats des paramètres d’ajustement sont $a' = 0,7671 \pm 0,0019$, $b' = 0,8845 \pm 0,0019$ et $A = 0,00595 \pm 0,00011$. Le [vidéo 5](#) présente une animation complète de la simulation de la diffraction.

analytique proposé. La figure 16 montre que la position des maxima correspond bien au modèle théorique de la diffraction classique à travers 4 fentes. Cependant, l’intensité relative des pics et particulièrement celle des maxima secondaires ne correspond pas au profil théorique. Ce résultat peut facilement s’expliquer par le fait que le patron numérique de diffraction observé ne correspond pas tout à fait à l’approximation de Fraunhofer, car l’observation est réalisée trop près des fentes. Malgré les limites de calcul du programme, il semble qu’en première approximation, que le patron de diffraction d’un paquet d’onde large spatialement à travers N fentes soit bien modélisée par le modèle classique de diffraction.

8 Évaluation de la qualité des résultats

Les résultats précédents semblent indiquer une bonne correspondance entre les résultats numériques et théoriques autant pour le cas avec une seule fente que celui avec deux fentes. Cette concordance semble valider le bon fonctionnement de notre programme. Or, pour s’assurer de son bon fonctionnement, d’autres évaluations peuvent être entreprises : il est possible d’étudier l’ordre de convergence du schéma numérique

de différences finies ainsi que l’unitarité afin de vérifier si ceux-ci correspondent bel et bien aux valeurs théoriques.

8.1 Définition de l’erreur

Une définition rigoureuse de l’erreur numérique est nécessaire afin d’évaluer de manière cohérente et adéquate la qualité des résultats. Comme un modèle analytique de la propagation d’un paquet d’onde a pu être développé à la section 2.2, il est possible de définir l’erreur numérique comme étant la valeur absolue de la différence des densités de probabilité numérique et théorique intégrée sur tout le domaine de simulation :

$$\text{Erreur} = \iint \left| |\psi_{th}|^2 - |\psi_{num}|^2 \right| dx dy$$

où $|\psi_{th}|^2$ est défini par l’équation (22). Cette définition de l’erreur tient donc compte du chevauchement des fonctions d’ondes théoriques et numériques. En effet, un chevauchement parfait donnerait une erreur nulle tandis qu’aucun chevauchement donnerait une erreur maximale de 2.

Par exemple, le [vidéo 6](#) montre la différence du comportement du paquet d’onde numérique avec le modèle de propagation théorique. Il est a

noter que l'erreur n'a pas été intrégrée sur le domaine de simulation afin de voir l'étalement spatial de l'erreur au cours de la simulation. On remarque que le modèle numérique reproduit bien l'effet d'étalement de la densité de probabilité en fonction du temps. Cependant, les résultats montrent un léger retard systématique du modèle numérique avec le modèle analytique.

8.2 Analyse de l'ordre de convergence

Le schéma numérique de différences finies de Crank-Nicolson possède un ordre théorique de convergence de 2 pour dx et dt . Cet ordre correspond à la manière dont l'erreur devrait décroître selon la valeur de la discréétisation choisie. Un outil utile pour déterminer la qualité du programme consiste donc à analyser l'ordre de convergence afin de confirmer si celui-ci correspond bien à l'ordre théorique.

8.2.1 Ordre de convergence spatiale

L'ordre de convergence spatial peut être déterminé en calculant l'erreur pour différentes valeurs de pas dx pour un nombre fixe d'itérations et une valeur fixe de discréétisation temporelle dt . La figure 17a-b montre la propagation de l'erreur pour les pas $dx = \{0, 025, 0, 05, 0, 1, 0, 2\}$ avec un pas de temps $dt = 0, 005$. L'ordre de convergence correspond à la pente du graphique de l'erreur en fonction du pas dx sur des échelles logarithmiques. Cet ordre est d'environ 1.814, ce qui est très proche de la valeur théorique de 2. La faible différence entre les deux valeurs peut être expliquée par l'erreur occasionnée par le pas de temps sur la simulation. En effet, le calcul de l'erreur est affecté à la fois par le choix de la discréétisation spatiale et de la discréétisation temporelle. Si, par exemple, l'ordre de grandeur de l'erreur de la discréétisation temporelle est plus grand que celui de l'erreur de la discréétisation spatiale, il ne sera pas possible d'observer adéquatement le changement d'ordre de l'erreur causé par la modification du pas d'espace. Ainsi, une discréétisation plus petite du temps aurait sans doute permis d'avoir un ordre de convergence spatial plus proche de 2. Nous étions cependant limité par le temps de calcul du programme. En somme, il est possible de conclure que la simulation possède bel et bien un ordre de convergence d'ordre 2 selon dx .

8.2.2 Ordre de convergence temporelle

De manière similaire, il est possible de déterminer l'ordre de convergence temporel en fixant le pas de discréétisation spatial dx et en calculant l'erreur pour différents pas de temps dt après un temps fixe. Nos résultats présentés à la figure 17c-d) montrent que l'ordre de convergence temporelle est d'environ 1.709, ce qui est également proche de la valeur théorique de 2. L'explication de l'écart avec la valeur théorique est en tout point similaire à celle de la convergence spatiale, c'est-à-dire que l'erreur causée par le pas d'espace contribue également à l'erreur totale observée. Ainsi, nous pouvons conclure que la convergence temporelle est également d'ordre 2. La méthode de différences finies implémentée semble être de bonne qualité et fonctionnelle. Bref, l'ordre de convergence témoigne donc de la qualité du programme puisque ce dernier se comporte comme attendu.

8.3 Analyse de la conservation de la norme

La méthode de Crank-Nicolson est théoriquement unitaire (voir annexe A.3). L'unitarité d'une méthode numérique est un aspect important pour toute application à un système quantique, car il est analogue à la conservation de l'information. Cette caractéristique devrait donc garantir la conservation de la norme dans le temps dans notre cas, puisqu'avec des conditions aux frontières réfléchissantes, la fonction d'onde devrait rester confinée à l'intérieur du domaine d'intégration. Ainsi, l'unitarité de la méthode peut être vérifiée en calculant l'erreur sur la norme qui est définie par :

$$\text{erreur}_{\text{norme}} = \left| 1 - \iint |\psi_{\text{num}}|^2 dx dy \right|$$

Cette erreur peut être évaluée en propagation libre, puis en présence d'une barrière de potentiel infini. Cette comparaison est nécessaire afin d'assurer que le contact de la fonction d'onde sur une barrière ou des fentes de diffractions n'affecte pas la conservation de la norme.

Comme le montre le **vidéo 7**, le contact de la fonction d'onde avec la barrière de potentiel ne semble avoir aucun impact significatif sur la conservation de la norme. La figure 18 montre également que l'erreur sur la norme est de l'ordre

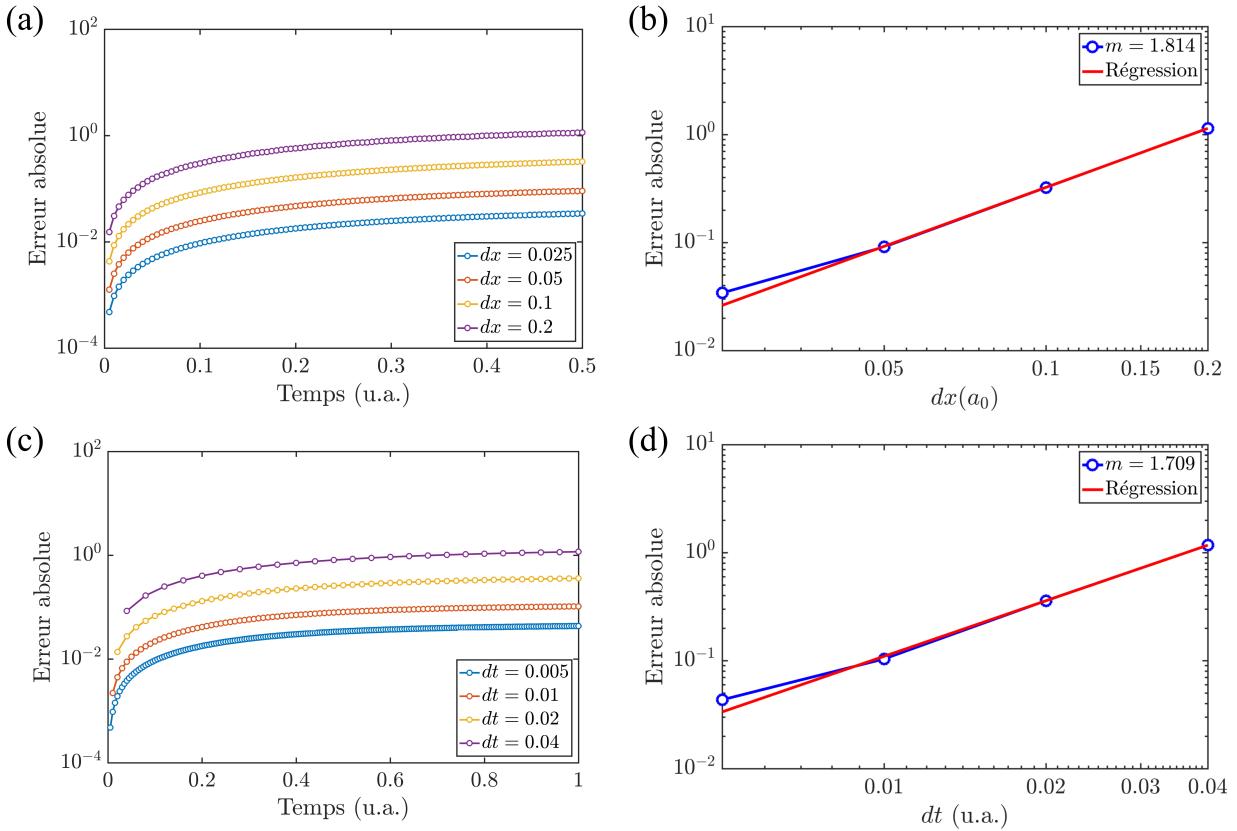


Figure 17 – Évolution de l'erreur pour les calculs de convergence spatiale (a-b) et temporelle (c-d) pour différents pas de même que les graphiques démontrant les ordres de convergence spatiaux de 1,814 (b) et temporels de 1,709 (d) obtenus. Les simulations ont été effectuées avec $k = 6,63$ et avec des pas temporels fixes de $dt = 0,005$ pour la convergence spatiale et $dx = 0,025$ pour la convergence temporelle.

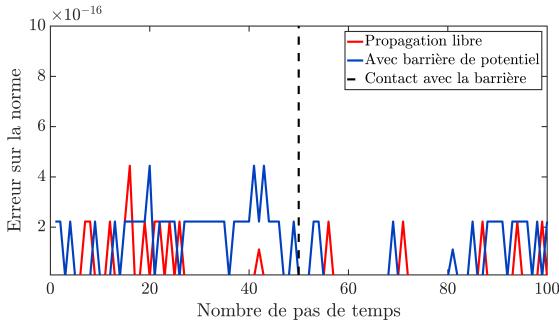


Figure 18 – Erreur sur la norme de la fonction d'onde

de 10^{-16} tout le long de la simulation dans les deux cas. Cette erreur correspond à la limite enregistrable possible en double représentation sous MATLAB. Il est donc possible de conclure que l'erreur sur la norme est essentiellement nulle et que la méthode de Crank-Nicolson est bel et bien unitaire. Il n'y a donc pas de perte d'information tout le long de la simulation, ce qui suggère un comportement adéquat de la fonction d'onde simulée après le passage des fentes

de diffraction.

9 Travail futur et conclusion

9.1 Simulations complémentaires

Nous avons pu établir une correspondance générale de patron de diffraction de la solution numérique avec le modèle analytique dans deux cas limites, bien que les résultats pour la diffraction à travers deux fentes ne correspondent pas aussi bien que la diffraction à travers une fente. Or, l'intérêt particulier d'une méthode numérique comme celle qui a été développée dans ce rapport est d'analyser des situations physiques pour lesquelles il n'existe pas de solution analytique. De ce fait, il est important de s'intéresser à des cas au-delà des cas limites que nous avons analysés jusqu'à présent. En effet, les cas où le paquet d'onde possède une dimension spatiale intermédiaire par rapport aux fentes semblent assez peu étudiés dans la littérature, puisque la grande majorité des articles scientifiques se consacrent aux

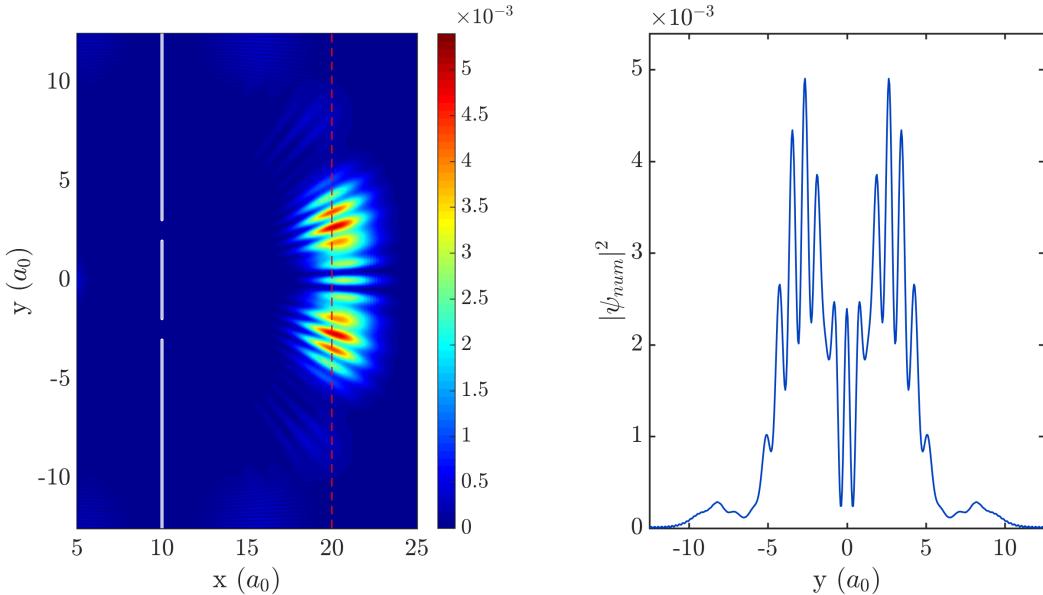


Figure 19 – Diffraction à deux fentes pour un paquet d’onde de largeur intermédiaire. La simulation a été réalisée avec 170 itérations, $dx = 0,05$, $dt = 0,01$, $a = 2$, $b = 3$, $\epsilon = 0,1$, $\Delta x = 1,25$, $\Delta y = 1,25$ et $k = 20$. Le **vidéo 8** présente une animation complète de la simulation de la diffraction.

deux cas limites présentés. Le **vidéo 8** présente une animation de la diffraction dans ce régime intermédiaire dont le patron final est également présenté à la figure 19. On remarque alors que ce patron de diffraction ne correspond ni à l’approximation du paquet d’onde étroit ou large. Il aurait donc été fort intéressant de se pencher sur ce cas intermédiaire numériquement et analytiquement.

La méthode de différences finies de Crank-Nicolson. La forme générale du patron de diffraction obtenu numériquement est en concordance avec les modèles théoriques proposés. L’analyse présentée dans ce rapport a permis d’avoir une meilleure compréhension du phénomène de diffraction et des différents paramètres impliqués.

9.2 Analyses supplémentaires

Considérant des limites de calcul des ordinateurs auxquels nous avons eu accès, nous nous sommes limité dans la taille de maillage. Comme mentionné à la section 7.2, l’approximation de Fraunhofer nécessite de se placer assez loin des fentes. Nous avons émis l’hypothèse que l’observation des patrons de diffraction à travers deux fentes était effectuée trop près des fentes, ce qui pourrait expliquer l’écart avec le modèle théorique. Ainsi, une analyse complémentaire qui serait nécessaire serait d’effectuer une simulation à beaucoup plus grande distance des fentes afin de voir si le profil de diffraction observé correspond davantage à celui prévu par l’équation (36).

9.3 Conclusion

Dans ce rapport, nous avons été en mesure de réaliser une étude numérique du patron de diffraction d’un paquet d’onde à l’aide de la mé-

Bibliographie

- [1] Richard P Feynman. Feynman lectures on physics. volume 3 : Quantum mechanics. Reading, Ma. : Addison-Wesley, 1965, edited by Feynman, Richard P.; Leighton, Robert B.; Sands, Matthew, 1965.
- [2] Roger Bach, Damian Pope, Sy-Hwang Liou, and Herman Batelaan. Controlled double-slit electron diffraction. New Journal of Physics, 15(3) :033018, 2013.
- [3] Paul Adrien Maurice Dirac. The principles of quantum mechanics. Number 27. Oxford university press, 1981.
- [4] Paula MB Piccoli, Thomas F Koetzle, and Arthur J Schultz. Single crystal neutron diffraction for the inorganic chemist—a practical guide. Comments on Inorganic Chemistry, 28(1-2) :3–38, 2007.
- [5] G Thomas. Practical operation of the tem. Transmission Electron Microscopy of Materials. Gareth Thomas and Michael J. Gorringe, eds. John Wiley & Sons, New York, page 27, 1979.
- [6] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Franck Laloë. Mécanique quantique. tome i. hermann, paris, 1977. Collection Enseignement des sciences, 16, 1977.
- [7] David Bohm. Quantum theory. NJ, 1951.
- [8] Eugen Merzbacher. Quantum mechanics. 1970. John Wiley & Sons, New York Zbl0102, 42701 (4), 1977.
- [9] Nouredine Zettili. Quantum mechanics : concepts and applications, 2003.
- [10] Eugene Hecht and A Zajac. Optics addison-wesley. Reading, Mass, 19872 :350–351, 1974.
- [11] Antonio Zecca. Two-slit diffraction pattern for gaussian wave packets. International journal of theoretical physics, 38(3) :911–918, 1999.
- [12] Antonio Zecca. Double slit diffraction pattern of gaussian wave packet interacting with the wall. Adv. Stud. Theor. Phys, 1 :539, 2007.
- [13] Antonio Zecca. Gaussian wave packets passing through two slits : contribution of confinement and tunneling to the diffraction pattern. Adv. Studies Theor. Phys, 7 :287, 2013.
- [14] Antonio Zecca and Giancarlo Cavalleri. Gaussian wave packets passing through a slit : a comparison between the predictions of the schrödinger qm and of stochastic electrodynamics with spin. Nuovo Cimento. B, 112(1) :1–9, 1997.
- [15] A Zecca. Diffraction of gaussian wave packets by a single slit. The European Physical Journal Plus, 126(2) :18, 2011.
- [16] H Shull and GG Hall. Atomic units. Nature, 184(4698) :1559, 1959.
- [17] Anton Arnold. Numerically absorbing boundary conditions for quantum evolution equations. VLSI design, 6(1-4) :313–319, 1998.
- [18] B Ducomet, A Zlotnik, et al. On stability of the crank-nicolson scheme with approximate transparent boundary conditions for the schrödinger equation. i. Communications in Mathematical Sciences, 4(4) :741–766, 2006.
- [19] Xavier Antoine, Christophe Besse, and Vincent Mouysset. Numerical schemes for the simulation of the two-dimensional schrödinger equation using non-reflecting boundary conditions. Mathematics of computation, 73(248) :1779–1799, 2004.

- [20] Xavier Antoine and Christophe Besse. Unconditionally stable discretization schemes of non-reflecting boundary conditions for the one-dimensional schrödinger equation. *Journal of Computational Physics*, 188(1) :157–175, 2003.
- [21] Loren Jørgensen, David Lopes Cardozo, and Etienne Thibierge. Numerical resolution of the schrödinger equation. 2011.
- [22] Clauss Jönsson. Electron diffraction at multiple slits. *American Journal of Physics*, 42(4) :11, 1974.
- [23] EGH-6210/EGPS-6210 Electron Gun/PowerSupply. Kimball Physics Inc., 2015.
- [24] A Chem. Solution of the schrödinger equation by a spectral method ii : Vibrational energy levels of triatoms molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 78 :301, 1983.
- [25] Ming Ma. Option pricing using tr-bdf 2 time stepping method. 2014.
- [26] Fabien Le Floc'h. *TR-BDF2 for Stable American Option Pricing*. Social Science Research Network, 2006.
- [27] Attila Askar and Ahmet S Cakmak. Explicit integration method for the time-dependent schrodinger equation for collision problems. *The Journal of Chemical Physics*, 68(6) :2794–2798, 1978.
- [28] R Becerril, FS Guzmán, A Rendón-Romero, and S Valdez-Alvarado. Solving the time-dependent schrödinger equation using finite difference methods. *Revista mexicana de física E*, 54(2) :120–132, 2008.
- [29] Anders Persson. Numerical methods for solving the time-dependent schrödinger equation. 2012.
- [30] Ronald M Caplan and Ricardo Carretero-González. Numerical stability of explicit runge-kutta finite-difference schemes for the nonlinear schrödinger equation. *Applied Numerical Mathematics*, 71 :24–40, 2013.
- [31] Leonard Susskind and Art Friedman. *Quantum mechanics : The theoretical minimum*. Basic Books, 2014.
- [32] FS Levin and J Shertzer. Finite-element solution of the schrödinger equation for the helium ground state. *Physical Review A*, 32(6) :3285, 1985.
- [33] Naoki Watanabe and Masaru Tsukada. Finite element approach for simulating quantum electron dynamics in a magnetic field. *Journal of the Physical Society of Japan*, 69(9) :2962–2968, 2000.
- [34] Simen Kvaal. *A Critical Study of the Finite Difference and Finite Element Methods for the Time Dependent Schrödinger Equation*. PhD thesis, PhD thesis, Dept. of Physics, University of Oslo, 2004.
- [35] Avtar S Sehra. Finite element analysis of the schrödinger equation. *arXiv preprint arXiv :0704.3240*, 2007.
- [36] Zoubir Becer. *Investigation de la concentration de gaz d'électrons à deux dimensions 2DEG dans les Hétérostructures n-Al_xGa_{1-x}As/In_yGa_{1-y}As/GaAs dopé sélectivement*. Number 110. Université Mohamed Khider, 2006.
- [37] Bjorn Sjodin. What's the difference between fem, fdm and fvm ? 2016.

- [38] Nicolas Lardenois. Échantillonnage - Théorème de Shannon. BTS IRIS, 2015.
- [39] Eugene Isaacson and Herbert Bishop Keller. Analysis of numerical methods. Courier Corporation, 2012.

Annexe

A Analyse des méthodes de différences finies

Cette annexe présente une analyse des différentes méthodes de différences finies considérées dans le tableau 1. L'ordre de convergence, le critère de stabilité et l'unitarité des méthodes sont établis. Par souci de simplicité, l'analyse n'est faite qu'en une seule dimension. La généralisation en deux dimensions est trivial et n'apporte rien de plus à la présente discussion.

Pour déterminer le critère de convergence, l'analyse de stabilité de Von Neumann est utilisée³⁹. Cette méthode d'analyse consiste essentiellement à prendre l'erreur d'arrondi ϵ_j^n (en x_j et au temps t_n) qui doit aussi satisfaire à l'équation différentielle et à décomposer la partie spatiale comme une série de Fourier

$$\epsilon(x) = \sum_{m=1}^M A_m e^{ik_m x}. \quad (65)$$

On pose ensuite que l'erreur varie de manière exponentielle dans le temps

$$\epsilon(x, t) = \sum_{m=1}^M e^{at} e^{ik_m x} \quad (66)$$

Comme l'équation de Schrödinger est linéaire, on peut considérer un seul des termes

$$\epsilon_j^n = e^{a(j\Delta t)} e^{ikx}. \quad (67)$$

La méthode est donc stable si le facteur d'amplification

$$G = \left| \frac{\epsilon_j^{n+1}}{\epsilon_j^n} \right| = \left| \frac{e^{a(j\Delta t + \Delta t)} e^{ikx}}{e^{a(j\Delta t)} e^{ikx}} \right| = |e^{a\Delta t}| \quad (68)$$

est inférieur ou égal à 1. Cela signifie que l'erreur d'arithmétique ne croît pas exponentiellement. Il est alors possible de trouver les pas de temps et d'espace Δx et Δt qui respectent ce critère.

Pour déterminer si une méthode est unitaire, il suffit de trouver l'opérateur d'évolution temporelle \hat{L}

$$\psi^{n+1} = \hat{L}\psi^n \quad (69)$$

et de déterminer si son adjoint est son inverse

$$\hat{L}^\dagger \hat{L} = \hat{L} \hat{L}^\dagger = \hat{1}. \quad (70)$$

A.1 Euler explicite

A.1.1 Ordre de convergence

La méthode d'Euler explicite est une méthode explicite qui consiste à remplacer les opérateurs différentiels par les formules de différences finies suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t) \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\psi_{j-1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j+1}^n}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2). \end{array} \right. \quad (71a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t) \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\psi_{j-1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j+1}^n}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2). \end{array} \right. \quad (71b)$$

En remplaçant dans l'équation de Schrödinger, on a

$$i \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} = -\frac{1}{2} \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta x^2} + V_j \psi_j^n + \mathcal{O}(\Delta x^2) + \mathcal{O}(\Delta t) \quad (72)$$

$$\Rightarrow \psi_j^{n+1} = \psi_j^n - i\Delta t \left(-\frac{1}{2} \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta x^2} + V_j \psi_j^n \right) \quad (73)$$

A.1.2 Critère de stabilité

En remplaçant ψ par l'erreur d'arithmétique ϵ , on obtient

$$\begin{aligned} e^{a(n+1)\Delta t} e^{ikj\Delta x} &= e^{an\Delta t} e^{ikj\Delta x} \\ &\quad - i\Delta t \left(-\frac{e^{an\Delta t} e^{ik(j+1)\Delta x} - 2e^{an\Delta t} e^{ikj\Delta x} + e^{an\Delta t} e^{ik(j-1)\Delta x}}{2\Delta x^2} + V_j e^{an\Delta t} e^{ikj\Delta x} \right) \\ e^{a\Delta t} &= 1 + i \frac{\Delta t}{2\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2 - 2\Delta x^2 V_j) \end{aligned}$$

Afin d'être stable la méthode doit respecter $G = |e^{a\Delta t}| \leq 1$:

$$\begin{aligned} \left| 1 + i \frac{\Delta t}{2\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2 - 2\Delta x^2 V_j) \right| &\leq 1 \\ 1 + \left(\frac{\delta t}{2\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2 - 2\Delta x^2 V_j) \right)^2 &\leq 1 \\ \left(\frac{\delta t}{2\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2 - 2\Delta x^2 V_j) \right)^2 &\leq 0 \end{aligned}$$

Or, cette condition n'est jamais respectée. La méthode d'Euler explicite est donc inconditionnellement instable.

A.1.3 Unitarité

On peut réécrire l'équation (73) sous la forme suivante

$$\psi_j^{n+1} = (\hat{1} - i\Delta t \hat{H}) \psi_j^n = \hat{L} \psi_j^n, \quad (74)$$

où $\hat{L} = (\hat{1} - i\Delta t \hat{H})$ est l'opérateur d'évolution temporelle. Cet opérateur n'est pas unitaire :

$$\hat{L}^\dagger \hat{L} = (\hat{1} + i\Delta t \hat{H})(\hat{1} - i\Delta t \hat{H}) = \hat{1} + \Delta t^2 \hat{H}^2 \quad (75)$$

A.2 Euler implicite

A.2.1 Ordre de convergence

La méthode d'Euler implicite est une méthode implicite qui consiste à remplacer les opérateurs différentiels par les formules de différences finies suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t) \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\psi_{j-1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{array} \right. \quad (76a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t) \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\psi_{j-1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{array} \right. \quad (76b)$$

En remplaçant dans l'équation de Schrödinger, on a

$$\frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} = -\frac{1}{2} \frac{\psi_{j+1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + V_j \psi_j^{n+1} + \mathcal{O}(\Delta x^2) + \mathcal{O}(\Delta t) \quad (77)$$

$$\implies \psi_j^{n+1} = \psi_j^n + \frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} (\psi_{j+1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j-1}^{n+1}) - i\Delta t V_j \psi_j^{n+1} \quad (78)$$

A.2.2 Critère de stabilité

En remplaçant ψ par l'erreur d'arithmétique ϵ , on obtient

$$\begin{aligned} e^{a\Delta t} &= 1 + \frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} (e^{a\Delta t} e^{ik\Delta x} - 2e^{a\Delta t} + e^{a\Delta t} e^{-ik\Delta x}) - i\Delta t V_j e^{a\Delta t} \\ e^{a\Delta t} &= \frac{1}{1 + i\Delta t V_j - \frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} (e^{ik\Delta x} + e^{-ik\Delta x} - 2)} \end{aligned}$$

Afin d'être stable la méthode doit respecter

$$\begin{aligned} G &= |e^{a\Delta t}| \leq 1 \\ \left| \frac{1}{1 + i\Delta t V_j - \frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2)} \right| &\leq 1 \\ \frac{1}{1 + \left(\Delta t V_j - \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2) \right)^2} &\leq 1 \end{aligned}$$

Cette condition est toujours respectée. La méthode d'Euler implicite est donc inconditionnellement stable.

A.2.3 Unitarité

On peut réécrire l'équation (78) sous la forme suivante

$$\begin{aligned} (\hat{1} + i\Delta t \hat{H}) \psi_j^{n+1} &= \psi_j^n \\ \implies \psi_j^{n+1} &= (\hat{1} + i\Delta t \hat{H})^{-1} \psi_j^n = \hat{L} \psi_j^n \end{aligned}$$

où $\hat{L} = (\hat{1} + i\Delta t \hat{H})^{-1}$ est l'opérateur d'évolution temporelle. Cet opérateur n'est pas unitaire :

$$\hat{L}^\dagger \hat{L} = (\hat{1} - i\Delta t \hat{H})^{-1} (\hat{1} + i\Delta t \hat{H})^{-1} = ((\hat{1} + i\Delta t \hat{H})(\hat{1} - i\Delta t \hat{H}))^{-1} = (\hat{1} + \Delta t^2 \hat{H}^2)^{-1} \quad (79)$$

A.3 Crank-Nicolson

A.3.1 Ordre de convergence

La méthode de Crank-Nicolson est une méthode implicite qui consiste à remplacer les opérateurs différentiels par les formules de différences finies suivantes

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (80a)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{\psi_{j-1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j+1}^n}{\Delta x^2} + \frac{\psi_{j-1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (80b)$$

En remplaçant dans l'équation de Schrödinger, on a

$$\begin{aligned} i \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} &= -\frac{1}{4} \left(\frac{\psi_{j-1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j+1}^n}{\Delta x^2} + \frac{\psi_{j-1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) + \frac{V_j}{2} (\psi_j^n + \psi_j^{n+1}) \\ &\quad + \mathcal{O}(\Delta x^2) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned} \quad (81)$$

$$\implies \psi_j^{n+1} = \psi_j^n + \frac{i\Delta t}{4\Delta x^2} \left((\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n) + (\psi_{j+1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j-1}^{n+1}) \right) - \frac{i\Delta t V_j}{2} (\psi_j^n + \psi_j^{n+1}) \quad (82)$$

A.3.2 Critère de stabilité

En remplaçant ψ par l'erreur d'arithmétique ϵ , on obtient

$$\begin{aligned} e^{a\Delta t} &= 1 + \frac{i\Delta t}{4\Delta x^2} \left((e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x}) + (e^{a\Delta t} e^{ik\Delta x} - 2e^{a\Delta t} + e^{-ik\Delta x}) \right) - \frac{i\Delta t V_j}{2} (1 + e^{a\Delta t}) \\ e^{a\Delta t} &= \frac{1 + \frac{i\Delta t}{4\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2) - \frac{i\Delta t V_j}{2}}{1 - \frac{i\Delta t}{4\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2) + \frac{i\Delta t V_j}{2}} \end{aligned}$$

Afin d'être stable la méthode doit respecter $G = |e^{a\Delta t}| \leq 1$:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1 + i \left(\frac{\Delta t}{4\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2) - \frac{\Delta t V_j}{2} \right)}{1 - i \left(\frac{\Delta t}{4\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2) - \frac{\Delta t V_j}{2} \right)} \right| &\leq 1 \\ \frac{1 + \left(\frac{\Delta t}{4\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2) - \frac{\Delta t V_j}{2} \right)^2}{1 + \left(\frac{\Delta t}{4\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2) - \frac{i\Delta t V_j}{2} \right)^2} &\leq 1 \end{aligned}$$

$$\implies G = 1$$

Donc, l'erreur ne croîtra pas de manière exponentielle, et le schéma est inconditionnellement stable.

A.3.3 Unitarité

On peut réécrire l'équation (82) sous la forme suivante

$$\begin{aligned} (\hat{1} + i\Delta t \hat{H})\psi_j^{n+1} &= (\hat{1} - i\Delta t \hat{H})\psi_j^n \\ \implies \psi_j^{n+1} &= (\hat{1} + i\Delta t \hat{H})^{-1}(\hat{1} - i\Delta t \hat{H})\psi_j^n = \hat{L}\psi_j^n \end{aligned}$$

où $\hat{L} = (\hat{1} + i\Delta t \hat{H})^{-1}(\hat{1} - i\Delta t \hat{H})$ est l'opérateur d'évolution temporelle. Cet opérateur est unitaire :

$$\hat{L}^\dagger \hat{L} = [(\hat{1} + i\Delta t \hat{H})(\hat{1} - i\Delta t \hat{H})^{-1}] [(\hat{1} + i\Delta t \hat{H})^{-1}(\hat{1} - i\Delta t \hat{H})] \quad (83)$$

Comme $(\hat{1} - i\Delta t \hat{H})^{-1}$ et $(\hat{1} + i\Delta t \hat{H})^{-1}$ commutent,

$$\hat{L}^\dagger \hat{L} = (\hat{1} + i\Delta t \hat{H})(\hat{1} + i\Delta t \hat{H})^{-1}(\hat{1} - i\Delta t \hat{H})^{-1}(\hat{1} - i\Delta t \hat{H}) = \hat{1} \quad (84)$$

A.4 Askar-Cakmak

A.4.1 Ordre de convergence

La méthode de Askar-Cakmak²⁷ est une méthode explicite qui consiste à remplacer les opérateurs différentiels par les formules de différences finies suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^{n-1}}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\psi_{j-1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j+1}^n}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{array} \right. \quad (85a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^{n-1}}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\psi_{j-1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j+1}^n}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{array} \right. \quad (85b)$$

En remplaçant dans l'équation de Schrödinger, on a

$$i \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^{n-1}}{2\Delta t} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\psi_{j-1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j+1}^n}{\Delta x^2} \right) + V_j \psi_j^n + \mathcal{O}(\Delta x^2) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (86)$$

$$\implies \psi_j^{n+1} = \psi_j^{n-1} - 2i\Delta t \left(-\frac{1}{2} \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta x^2} + V_j \psi_j^n \right) \quad (87)$$

A.4.2 Critère de stabilité

En remplaçant ψ par l'erreur d'arithmétique ϵ , on obtient

$$\begin{aligned} e^{a\Delta t} &= e^{-a\Delta t} + i \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2 - 2\Delta x^2 V_j) \\ \left(e^{a\Delta t} \right)^2 + e^{a\Delta t} \frac{i\Delta t}{\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2 - 2\Delta x^2 V_j) - 1 &= 0 \\ e^{a\Delta t} &= \frac{1}{2} \left(-\frac{i\Delta t}{\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2 - 2\Delta x^2 V_j) \pm \sqrt{\left(\frac{i\Delta t}{\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2 - 2\Delta x^2 V_j) \right)^2 + 4} \right) \\ e^{a\Delta t} &= -\frac{i\Delta t}{\Delta x^2} (\cos(k\Delta x) - 1 - \Delta x^2 V_j) \pm \sqrt{1 - \left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\cos(k\Delta x) - 1 - \Delta x^2 V_j) \right)^2} \end{aligned}$$

Afin d'être stable la méthode doit respecter $G = |e^{a\Delta t}| \leq 1$:

$$\left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\cos(k\Delta x) - 1 - \Delta x^2 V_j) \right)^2 + \left(1 - \left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\cos(k\Delta x) - 1 - \Delta x^2 V_j) \right)^2 \right) \leq 1$$

$$\implies G = 1$$

Donc, l'erreur ne croîtra pas de manière exponentielle, et le schéma est inconditionnellement stable.

A.4.3 Unitarité

On peut réécrire l'équation (87) sous la forme suivante

$$\begin{aligned} \psi_j^{n+1} &= \psi_j^{n-1} - 2i\Delta t \hat{H} \psi_j^n \\ \psi_j^{n+1} &= \psi_j^{n-1} - 2i\Delta t \hat{H} e^{-i\Delta t \hat{H}} \psi_j^{n-1} \\ \psi_j^{n+1} &= (\hat{1} - 2i\Delta t \hat{H} e^{-i\Delta t \hat{H}}) \psi_j^{n-1} = \hat{L} \psi_j^{n-1} \end{aligned}$$

où $\hat{L} = (\hat{1} - 2i\Delta t \hat{H} e^{-i\Delta t \hat{H}})$ est l'opérateur d'évolution temporelle. Cet opérateur n'est pas unitaire :

$$\hat{L}^\dagger \hat{L} = (\hat{1} + 2i\Delta t \hat{H} e^{i\Delta t \hat{H}})(\hat{1} - 2i\Delta t \hat{H} e^{-i\Delta t \hat{H}}) = \hat{1} - 4\Delta t \hat{H} \sin(\Delta t \hat{H}) + 4\Delta t^2 \hat{H}^2 \quad (88)$$

En effectuant un développant de Taylor de la fonction sinus, on a

$$\hat{L}^\dagger \hat{L} = \hat{1} + \frac{2}{3} \Delta t^4 \hat{H}^4 + \mathcal{O}(\Delta t^6) \quad (89)$$

B Forme explicite des matrices M_1 et M_2

Pour une grille 5x5, la forme explicite des matrices M_1 et M_2 est la suivante :

Les différentes constantes pour M_1 et M_2 sont données dans le tableau 2 ci-dessous.

Tableau 2 – Constantes pour les matrices \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2

Coefficients	M_1	M_2
a	1	0
b	$\frac{-idt}{4h^2}$	$\frac{idt}{4h^2}$
c	$1 + \frac{idt}{h^2} + iV_{i,j}$	$1 - \frac{idt}{h^2} - iV_{i,j}$