

Propagation d'un paquet d'ondes quantique

1 Introduction

L'équation de Schrödinger dépendant du temps décrit complètement le comportement d'une fonction d'onde. À une dimension, elle s'écrit (voir [1], ch. 1, 3) :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}\Psi(x, t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \quad (1)$$

où $\Psi(x, t)$ désigne la fonction d'onde et $V(x)$ le potentiel qui agit sur la particule de masse m ; $\hat{\mathcal{H}}$ est l'opérateur hamiltonien. Dans la suite nous nous inspirons de la présentation de Goldberg, Schey et Schwartz [2], auteurs de la première simulation du mouvement d'un paquet d'ondes, restée célèbre.

Comme $\hat{\mathcal{H}}$ est indépendant du temps, on peut écrire facilement une « solution formelle » de (1) :

$$\Psi(x, t) = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar}\Psi(x, 0) \quad (2)$$

L'opérateur $\hat{U} = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar}$ est souvent appelé « opérateur d'évolution ». Comme $\hat{\mathcal{H}}$ est hermitique, \hat{U} est unitaire. Par conséquent, la norme de $\Psi(x, t)$ est constante. Toutes les propriétés de \hat{U} peuvent se démontrer en partant du développement en série de l'exponentielle, que l'on suppose convergent. Le but du projet consiste à résoudre numériquement (1), pas d'une façon exacte mais en utilisant une approximation de (2).

2 Variables sans dimension

Comme pour toute solution numérique, il est commode de définir des variables sans dimension. On commence par poser $\hbar = m = 1$. Ces deux relations ne suffisent pas à définir complètement un système d'unités. Comme on ne considère que des grandeurs mécaniques, trois grandeurs fondamentales suffisent (longueur, masse et temps en SI). Il faut donc choisir une autre unité (ou imposer une troisième contrainte). On prendra l'électron-volt comme unité d'énergie.

3 Algorithmes

(1) est une équation aux dérivées partielles qui peut se résoudre numériquement après discrétisation en espace et en temps ([3], ch. 13). On remplace la variable continue x par son équivalent discret $j\Delta$, $0 \leq j \leq N$. La particule est donc localisée sur le segment $[0, L]$ avec $L = N\Delta$ et $\Psi(0, t) = \Psi(L, t) = 0$. Le temps est aussi discrétisé en $n\tau$, $n \geq 0$. La fonction continue $\Psi(x, t)$ est ainsi remplacée par un tableau infini $\Psi_j^{(n)}$. La dérivée $\partial^2 \Psi / \partial x^2$ est approchée par son expression sous forme de différence finie centrée :

$$\left. \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right|_j^{(n)} \simeq \frac{\Psi_{j+1}^{(n)} - 2\Psi_j^{(n)} + \Psi_{j-1}^{(n)}}{\Delta^2} \quad (3)$$

On tire de là une représentation de l'effet de $\hat{\mathcal{H}}$ sur $\Psi_j^{(n)}$:

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi_j^{(n)} = \frac{-1}{2\Delta^2} [\Psi_{j+1}^{(n)} - 2\Psi_j^{(n)} + \Psi_{j-1}^{(n)}] + V_j\Psi_j^{(n)}. \quad (4)$$

On a posé $V_j = V(j\Delta)$. Il est équivalent de définir une matrice représentative du hamiltonien sur la base des fonctions discrétisées :

$$H_{k\ell} = V_k\delta_{k\ell} - \frac{\delta_{k,\ell+1} - 2\delta_{k\ell} + \delta_{k,\ell-1}}{2\Delta^2} \quad (5)$$

Une première approximation de la solution est obtenue à partir d'un développement limité au premier ordre de l'opérateur d'évolution agissant entre les dates $n\tau$ et $(n+1)\tau$;

$$\hat{U} \simeq 1 - i\tau\hat{\mathcal{H}}. \quad (6)$$

On déduit que l'évolution de Ψ est donnée par

$$\Psi_j^{(n+1)} = (1 - i\tau\hat{\mathcal{H}})\Psi_j^{(n)}. \quad (7)$$

En développant cette équation à l'aide de (5), il vient

$$\Psi_j^{(n+1)} = \Psi_j^{(n)} + \frac{i\tau}{2\Delta^2} [\Psi_{j+1}^{(n)} - 2\Psi_j^{(n)} + \Psi_{j-1}^{(n)}] - i\tau V_j\Psi_j^{(n)}. \quad (8)$$

Si on définit un vecteur colonne $\Psi^{(n)}$ contenant toutes les valeurs de $\Psi_j^{(n)}$ à l'instant $n\tau$, on peut écrire aussi bien

$$\Psi^{(n+1)} = (\mathbf{I} - i\tau\mathbf{H})\Psi^{(n)}, \quad (9)$$

si \mathbf{I} est la matrice unité $n \times n$. Vous reconnaissez en (8) le schéma d'Euler explicite appliqué pour chaque point de l'espace. Cet algorithme a l'avantage d'être extrêmement simple parce qu'explicite, mais il a le grave inconvénient d'être instable pour toute valeur utile de τ . De plus, l'opérateur $1 - i\tau\hat{\mathcal{H}}$ n'est pas unitaire et la norme de la fonction d'onde n'est pas conservée.

Comme cela a été fait pour les équations différentielles ordinaires ([3], ch. 11), on peut faire appel au schéma d'Euler implicite.

$$\Psi_j^{(n)} = \Psi_j^{(n+1)} - \frac{i\tau}{2\Delta^2} [\Psi_{j+1}^{(n+1)} - 2\Psi_j^{(n+1)} + \Psi_{j-1}^{(n+1)}] + i\tau V_j\Psi_j^{(n+1)} \quad (10)$$

ou, sous forme symbolique,

$$\Psi^{(n)} = (\mathbf{I} + i\tau\mathbf{H})\Psi^{(n+1)}. \quad (11)$$

Cet algorithme est implicite : il faut résoudre un système d'équations linéaires pour obtenir chaque nouvelle valeur de $\Psi^{(n+1)}$. Il est inconditionnellement stable, mais l'opérateur correspondant n'est pas unitaire.

Plutôt que d'utiliser un développement limité de l'opérateur d'évolution, on peut faire appel à son approximant de Padé ([3], ch. 2) :

$$\hat{U} \simeq \frac{1 - i(\tau/2)\hat{\mathcal{H}}}{1 + i(\tau/2)\hat{\mathcal{H}}}. \quad (12)$$

Cette approximation est parfois appelée « forme de Cayley » de l'exponentielle. On ne calcule pas l'inverse d'un opérateur, on écrit au contraire

$$(1 + i(\tau/2)\hat{\mathcal{H}})\Psi(x, (n+1)\tau) = (1 - i(\tau/2)\hat{\mathcal{H}})\Psi(x, n\tau) \quad (13)$$

dont la traduction en termes de composantes s'écrit

$$\Psi_{j+1}^{(n+1)} + (i\lambda - 2 - 2\Delta^2 V_j) \Psi_j^{(n+1)} + \Psi_{j-1}^{(n+1)} = -\Psi_{j+1}^{(n)} + (i\lambda + 2 + 2\Delta^2 V_j) \Psi_j^{(n)} - \Psi_{j-1}^{(n)} \quad (14)$$

soit encore, sous forme matricielle :

$$(\mathbf{I} + (i\tau/2)\mathbf{H})\Psi_{n+1} = (\mathbf{I} - (i\tau/2)\mathbf{H})\Psi_n \quad (15)$$

On a posé $\lambda = 4\Delta^2/\tau$. Vous reconnaissez le schéma de Crank et Nicolson ([3], ch. 13), introduit vers 1930 pour résoudre des problèmes de diffusion de colorant vers un tissu (mathématiquement très proches). Ce schéma est stable et l'opérateur associé est unitaire.

Une méthode de résolution consiste à former la décomposition LU de $\mathbf{I} + (i\tau/2)\mathbf{H}$, en remarquant que cette matrice est tridiagonale. La solution peut donc s'obtenir en quelques lignes (méthode dite du double balayage de Cholesky). Il suffit de conserver en mémoire les vecteurs correspondant aux trois diagonales.

Si on dispose d'une mémoire suffisante, on peut construire les deux matrices figurant dans (15) et résoudre brutalement le système linéaire. Sous Scilab, il peut être nécessaire d'accroître la taille de la pile (`stacksize(10000000)` par exemple). On gagne beaucoup de place en utilisant des matrices « creuses » et les instructions correspondantes de Scilab.

4 Questions

1. Vérifier analytiquement les assertions précédentes. Comment s'exprime (10) en fonction de l'opérateur \hat{U} ?
2. Que devient (1) dans le nouveau système d'unités ? Quelles sont les nouvelles unités de temps, de longueur et de vitesse si la particule considérée est un électron de masse $m \simeq 9,1 \times 10^{-31}$ kg ?
3. On suppose que la fonction d'onde représente une onde plane : $\Psi(x, t) \sim e^{ikx}$. Il existe une limite supérieure aux valeurs de k qui correspondent à des fonctions d'onde distinctes (cf. fréquence de Nyquist, ([3], § 9.4). Il est commode de choisir $L = 1$. Que vaut alors le k maximum ? Quelle est la résolution en k , c'est-à-dire le plus petit δk tel que k et $k + \delta k$ correspondent à des ondes différentes ?
4. Pour le calcul, on supposera que Ψ est initialement un paquet d'onde gaussien :

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{2\pi}}} e^{ik_0 x} e^{-(x-x_0)^2/(2\sigma^2)}.$$

Il faut choisir $N > 500$; $\lambda \simeq 1$ correspond à une valeur de τ raisonnable. Pour $\sigma \simeq 0,03$, on obtient un paquet d'onde de largeur commode. On vérifiera qu'en l'absence de potentiel l'évolution au cours du temps est bien celle prévue par la mécanique quantique ([1], complément GI). On trouvera dans [2] d'autres contraintes utiles sur les divers paramètres du calcul. On représentera $|\Psi|^2$ à différents instants.

5. Utiliser le programme pour analyser le comportement d'un paquet d'onde arrivant sur une barrière de potentiel ou un puits rectangulaires de largeur voisine de 0,05. On peut choisir une énergie moyenne du paquet comprise entre la moitié et le double de la hauteur ou de la profondeur de l'obstacle. Dans le cas d'une barrière, il existe un choix de paramètres pour lequel une partie de la probabilité reste localisée autour de la barrière.
6. L'animation associée à ce projet montre un résultat d'exécution pour $N = 1000$, $\lambda = 1$. La hauteur de la barrière était 60π , sa largeur de 0,02. Le nombre d'onde du paquet était $(60\pi)^2$ avec $\sigma = 0,03$.

Références

- [1] C. COHEN-TANNOUJDI, B. DIU et F. LALOË : *Mécanique quantique*, volume I. Hermann, 1973.
- [2] A. GOLDBERG, H.M. SCHEY et J.L. SCHWARTZ : Computer-generated motion pictures of one-dimensional quantum-mechanical transmission and reflection phenomena. *Am. J. Phys.*, 35:177–186, 1967.
- [3] J.-P. GRIVET : *Méthodes numériques appliquées pour le scientifique et l'ingénieur*. EDP Sciences, Les Ulis, 2ième édition, 2013.