

Physique Numérique – TP10

L'équation de Schrödinger dépendante du temps

Victor Lanvin

1 Introduction

Dans ce TP, on se propose d'étudier numériquement l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Nous nous sommes déjà intéressés à l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans le TP6. Cette fois, plutôt que de n'étudier que les états stationnaires d'un système quantique, on cherche à en décrire l'évolution temporelle.

Dans un premier temps, on mettra en oeuvre une méthode de résolution numérique de l'équation de Schrödinger en utilisant la méthode de Crank et Nicolson. On vérifiera en particulier que la normalisation et l'énergie de la fonction d'onde restent stables au cours du temps. Dans un deuxième temps, on s'intéressera plus en détails à l'évolution temporelle du système, et ce pour plusieurs potentiels.

2 Mise en oeuvre

Question 1. Dans cette question, on implémente la fonction `def_pot(x,v,n)` qui calcule un potentiel harmonique. La courbe représentant ce potentiel est tracée en Figure 1.

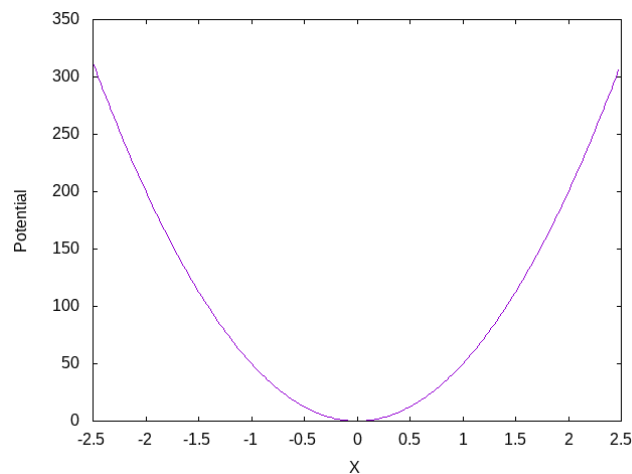


Figure 1: Potentiel harmonique

Question 2. Dans cette question, on implémente la fonction `def_psi(x,psi,n)` qui calcule la fonction d'état ψ initiale et la stocke dans le tableau `psi`. On choisit une fonction gaussienne légèrement excentrée de $x_0 = 0.25$. La courbe représentative de cette fonction est tracée en Figure 2.

Question 3. La fonction ψ définie dans la question précédente n'est pas normalisée. On implémente donc une fonction `wavenorm` qui calcule la norme d'une fonction d'état et une fonction `normalize` qui normalise une telle fonction. La fonction initiale ψ obtenue après normalisation est représentée en Figure 3. Le programme global utilisé pour cette question est présenté en annexe de ce compte-rendu.

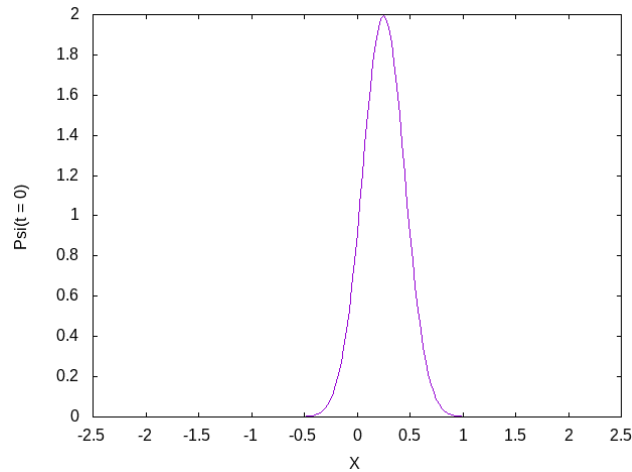


Figure 2: Module de $\psi(x, t = 0)$ sans normalisation

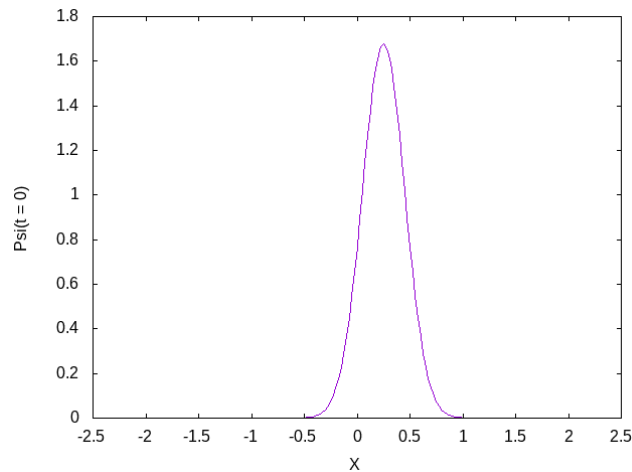


Figure 3: Module de $\psi(x, t = 0)$ après normalisation

Question 4. On cherche maintenant à résoudre le système linéaire donnant l'évolution temporelle de la fonction ψ . Pour cela, on implémente la fonction `compute_AB` qui calcule les paramètres demandés par la fonction `cgtsv`. Ensuite, on réalise 1000 itérations et on vérifie que la fonction ψ reste correctement normalisée en fonction du temps. La courbe de normalisation de ψ en fonction du temps est donnée en Figure 4. A première vue, la norme semble diminuer progressivement au cours du temps. Ceci est dû à l'accumulation d'erreurs numériques, accentuées par le fait que tous les calculs se font en simple précision. Cependant, cette décroissance est très lente : la norme diminue de 3×10^5 sur 1000 itérations. Ainsi, pour les durées de simulation considérées dans ce TP, on peut considérer la normalisation constante.

Encore une fois, le code global pour cette question est fourni en annexe de ce compte-rendu.

Question 5. On ajoute maintenant un calcul de l'énergie, réalisé par la fonction `energy`. Tout comme la normalisation, l'énergie du système est normalement constante. Pour vérifier cela, on a tracé l'évolution de l'énergie en fonction du temps en Figure 5. Le même problème que dans la question précédente apparaît : l'accumulation d'erreurs numériques cause la décroissance progressive de l'énergie de la particule. Cependant, encore une fois, cette décroissance est très lente et l'énergie pourra être considérée comme constante dans toute la suite.

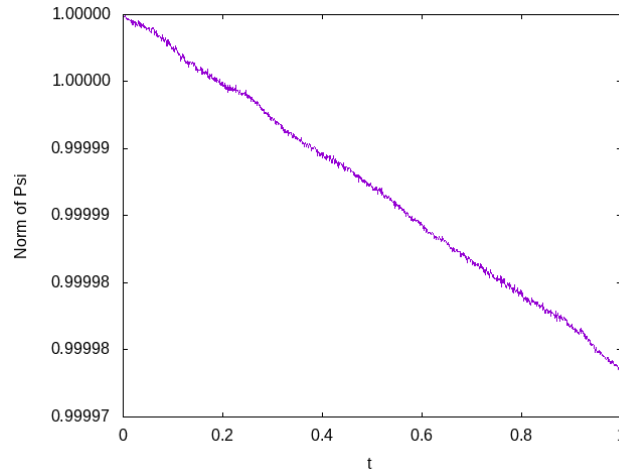


Figure 4: Normalisation de ψ en fonction du temps

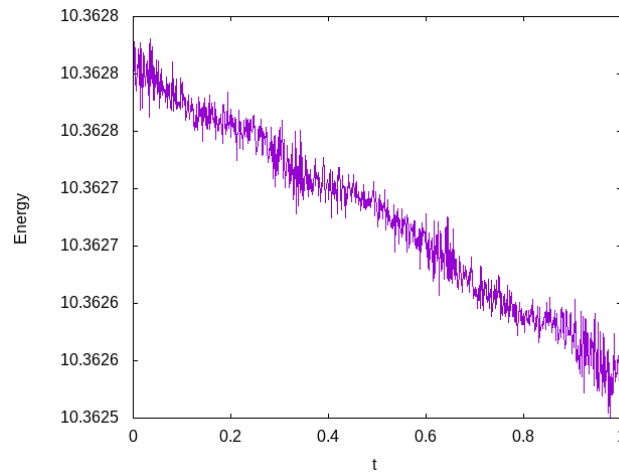


Figure 5: Energie de l'état ψ en fonction du temps

3 Evolution temporelle

Question 1. On s'intéresse maintenant à l'évolution temporelle de la fonction ψ . On implémente donc dans un premier temps la fonction `pposition` qui calcule le barycentre de la densité de probabilité de présence de la particule, ce qu'on définit comme sa position. L'évolution de la position de la particule au cours du temps est alors tracée en Figure 6.

On remarque immédiatement que l'évolution est celle d'un oscillateur harmonique classique : la particule étant initialement en $x_0 = 0.25$, elle oscille entre $x = -0.25$ et $x = 0.25$ de manière harmonique. Ceci est cohérent avec le théorème d'Ehrenfest qui prédit, en substance, que le barycentre de la densité de probabilité suit une trajectoire classique (dans le cas du puits simple).

Question 2. Pour mettre en évidence les caractéristiques quantiques du système, on trace maintenant la densité de probabilité de présence (plutôt que la position du barycentre). Le tracé obtenu est présenté en Figure 7. On remarque tout d'abord que le centre de la densité de probabilité suit bien un mouvement harmonique. Cependant, la densité de probabilité est étalée, et la particule peut se trouver en dehors de l'intervalle $[-0.25; 0.25]$, ce qui n'est pas possible dans un système purement classique. On note aussi que, plus la particule s'approche des bords de cet intervalle, plus sa position est définie précisément.

Question 3. On souhaite maintenant réitérer l'étude précédente sur un potentiel en double puits. On modifie donc la fonction `def_pot` pour créer un potentiel en double puits. Le potentiel obtenu est tracé en Figure 8a. On vérifie tout d'abord que la norme et l'énergie sont toujours conservées pour cette forme de potentiel. Les

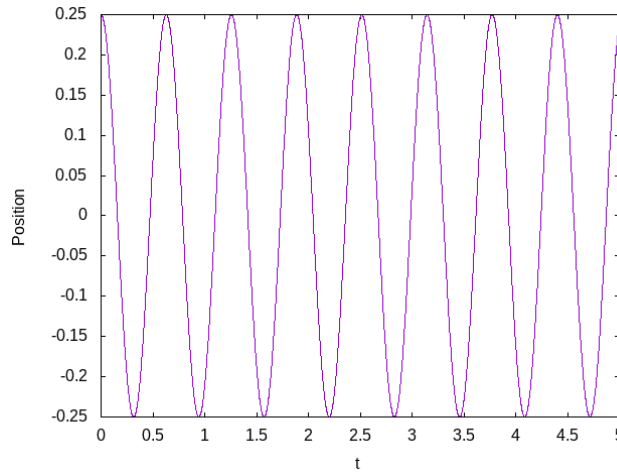


Figure 6: Position de la particule dans le potentiel harmonique en fonction du temps

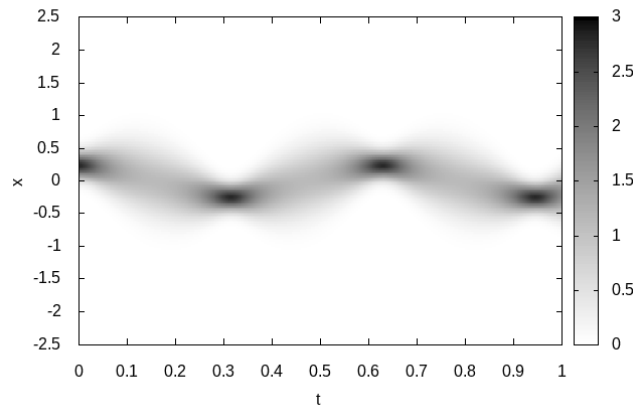


Figure 7: Densité de probabilité de position de la particule

courbes représentant ces grandeurs sont présentées en Figure 8. Comme précédemment, les variations (dues aux erreurs de calcul) sont suffisamment faibles pour être négligées dans la suite.

On peut donc maintenant tracer la position du barycentre de la densité de probabilité ainsi que la densité de probabilité, comme dans le cas du potentiel harmonique. Les courbes obtenues sont présentées en Figure 9. On remarque que la position de la particule ne semble plus suivre une trajectoire harmonique mais une trajectoire presque chaotique, modulée par une trajectoire harmonique. En effet, dans le cas du double puits, le théorème d'Ehrenfest n'implique plus que la trajectoire du barycentre est classique. On remarque aussi qu'à certains moments, la particule peut se trouver dans les deux puits avec une probabilité similaire pour les deux, ce qui est un effet purement quantique.

Question 4. On s'intéresse dans cette question à l'influence de la profondeur des puits sur la position (et sa densité de probabilité) de la particule. On essaie donc, dans un premier temps, de fixer $\Delta V = 5$. Les courbes obtenues sont présentées en Figure 10. On remarque que la particule passe plus rapidement d'un puits à l'autre, ce qui est normal car la barrière en énergie qui sépare les puits est plus faible.

On peut aussi augmenter grandement la profondeur des puits, par exemple avec $\Delta V = 20$. Les courbes obtenues sont alors présentées en Figure 11. Cette fois, la particule semble bloquée dans l'un des puits, car la barrière de potentiel est plus grande que l'énergie initiale de la particule. Cependant, on voit tout de même que la densité de probabilité de présence de la particule n'est pas tout à fait nulle dans l'autre puits, ce qui peut être une conséquence de l'effet tunnel. Cependant, le fait que la densité de probabilité dans le second puits semble augmenter au cours du temps suggère que l'accumulation des erreurs numériques a tendance à augmenter l'énergie de la particule, la rendant progressivement capable de franchir la barrière de potentiel.

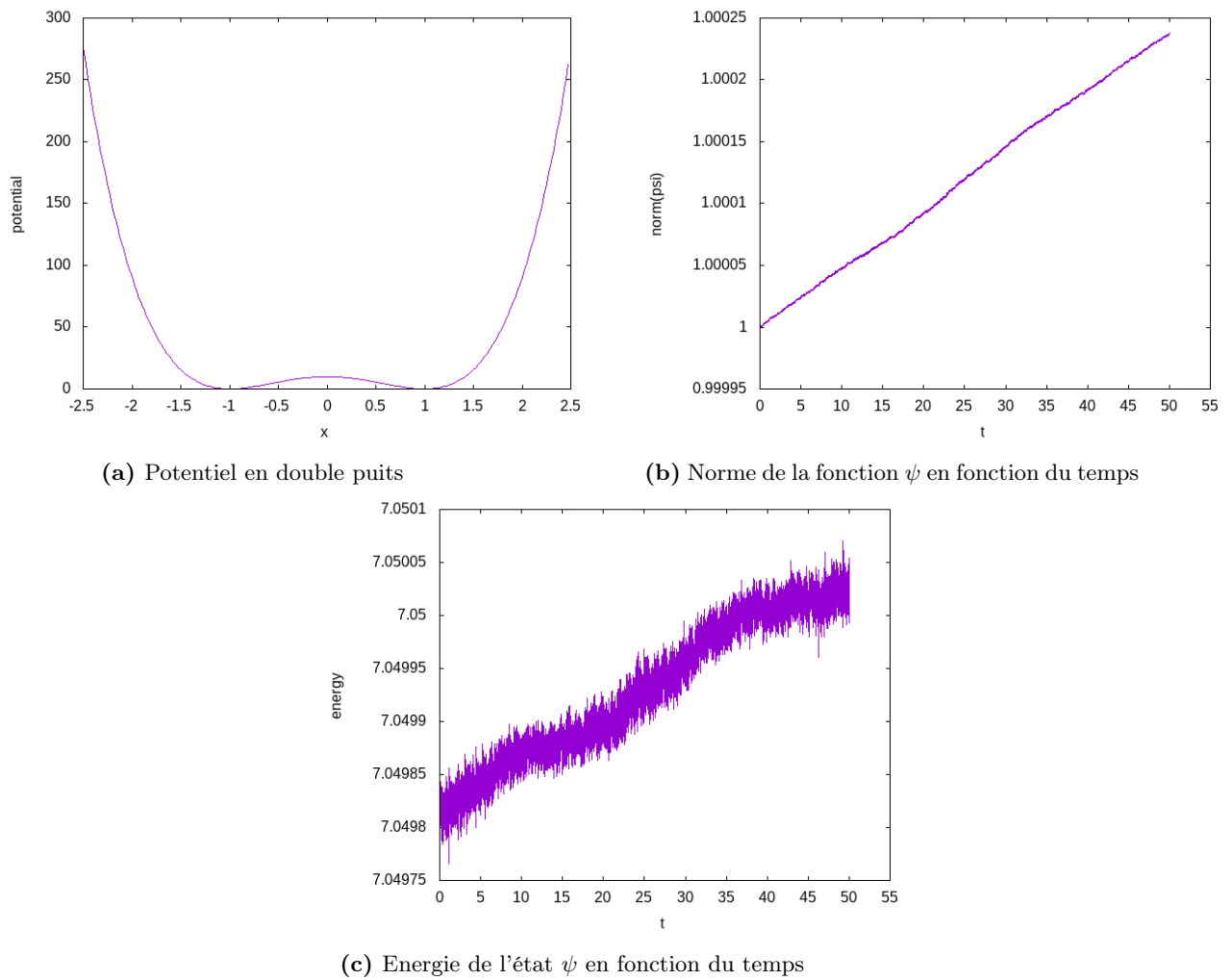


Figure 8: Etude du potentiel en double puits pour $\Delta V = 10$

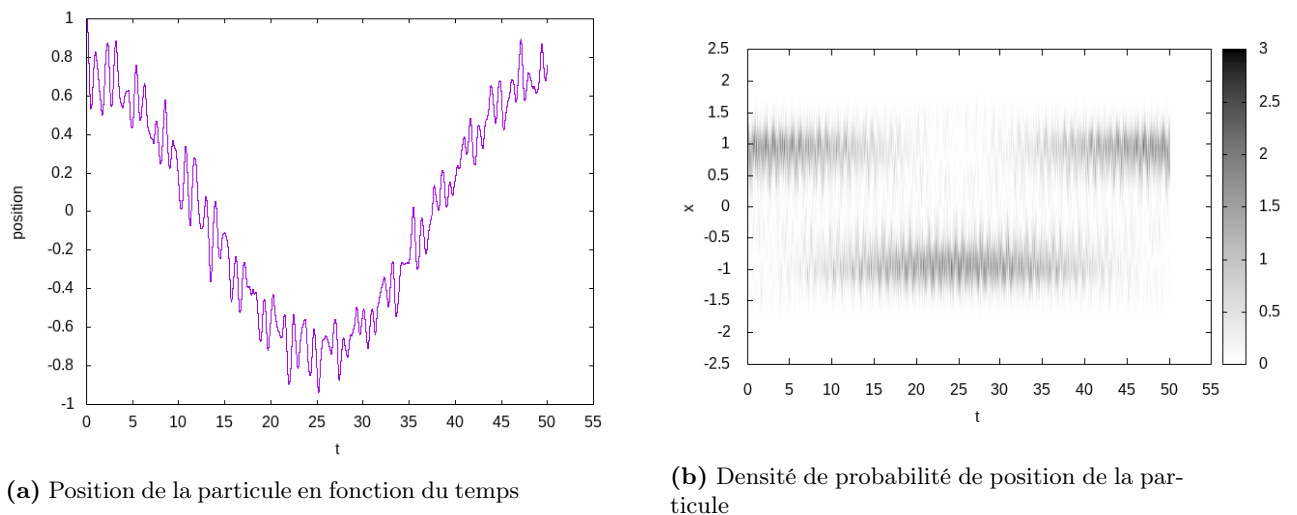
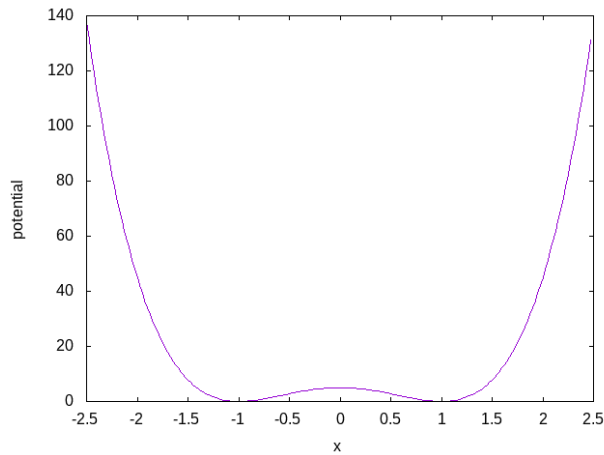
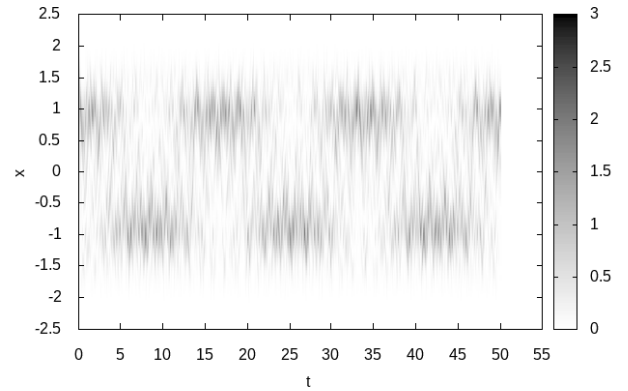


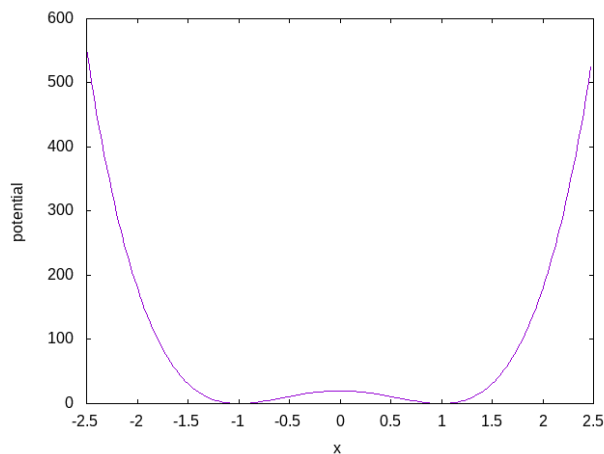
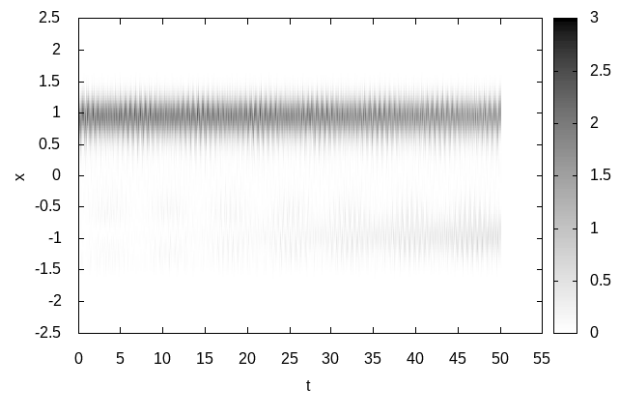
Figure 9: Position dans le potentiel en double puits pour $\Delta V = 10$

4 Animation

Dans cette dernière partie, on réalise une animation afin d'observer l'évolution de la densité de probabilité de présence au cours du temps. Le code utilisé pour cette partie est donné en annexe de ce compte-rendu. Quelques

(a) Potentiel en double puits pour $\Delta V = 5$ 

(b) Densité de probabilité de position de la particule

Figure 10: Etude du potentiel en double puits pour $\Delta V = 5$ (a) Potentiel en double puits pour $\Delta V = 20$ 

(b) Densité de probabilité de position de la particule

Figure 11: Etude du potentiel en double puits pour $\Delta V = 20$

remarques sur l'animation:

- La densité de probabilité a , pour tout temps t , et en l'absence d'erreurs de calcul, un profil gaussien. On remarque bien que le pic de la gaussienne suit un mouvement classique entre les bornes fixées par les conditions initiales. De plus, la gaussienne est plus étroite aux bords et plus étalée lorsque la particule est au centre, ce qui confirme nos observations précédentes.
- Les erreurs de calculs s'accumulent rapidement, ce qui provoque des oscillations résiduelles qui ont tendance à augmenter au cours de l'animation. Il faudrait réaliser ce programme en double précision afin de palier (temporairement) à ce problème.