Université de Tours "François Rabelais"
Faculté de Sciences et Techniques
Licence de Physique 2007–2008
Simulation, Modélisation, Outils Informatiques

L'équation de Schrödinger et ses variations

Le but de cet exercice est la solution de l'équation de Schrödinger dans son incarnation comme équation de diffusion, i.e. en temps imaginaire

$$\frac{\partial \Phi(x,t)}{\partial t} = \underbrace{D\frac{\partial^2 \Phi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)}_{H}\,\Phi(x,t)$$

dans un intervalle $0 \leq x \leq L$. On va prendre conditions aux bords Dirichlet, $\Phi(0,t) = 0$ et $\Phi(L,t) = 0$ et comme condition initiale un "paquet d'ondes" gaussien

$$\Phi(x,0) = \frac{e^{-\frac{\left(x-\frac{L}{2}\right)^2}{2\sigma_0^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}}$$

centré au milieu de l'intervalle et de largeur σ_0. On veut résoudre cette équation et calculer, en particulier, la largeur du paquet d'onde comme fonction du temps, définie par la relation

$$\sigma(t)^2 \equiv \frac{\int_0^L x^2\Phi(x,t)dx}{\int_0^L \Phi(x,t)dx} - \left(\frac{\int_0^L x\Phi(x,t)dx}{\int_0^L \Phi(x,t)dx}\right)^2$$

On se rend compte immédiatement que $\sigma(0) = \sigma_0$.

On peut se convaincre que le premier terme du membre de droite de l'équation a tendance à faire si que $\sigma(t) > \sigma_0$, pour $t > 0$, tandis que le deuxième terme (du potentiel) a la tendance inverse, puisqu'il favoriserait la concentration de la solution $\Phi(x,t)$ au voisinage des minima du potentiel. Un des buts de cet exercice est d'étudier cette compétition et, éventuellement, de trouver les conditions, dans lesquelles $\sigma(t) = \sigma_0$-ces états sont appelés *états cohérents* en optique quantique.

- Si l'on considère un potentiel "anharmonique", $V(x) = g\cdot(x-(L/2))^2+\lambda\cdot(x-(L/2))^4$, on cherche à mettre en évidence l'effet tunnel, si l'on prend la condition initiale concentrée autour de l'un des deux minima du potentiel, pour le choix approprié des paramètres. En particulier afficher l'évolution du centre de masse du paquet d'ondes comme fonction du temps.

OPTIONNELS :

1. Pour l'étude numérique on doit discrétiser l'espace, $x = n\cdot a_x$, $n = 0, 1, \ldots, N$, $N = L/a_x$, ainsi que le temps, $t = m\cdot a_t$. L'analyse de stabilité de von Neumann implique que, pour la méthode d'Euler (et pour $V(x) = 0$), $2Da_t/a_x^2 < 1$. Si l'on emploie la méthode de Runge-Kutta, doit-on s'y tenir ou non ?
2. Afficher $\Phi(x,t)$ et $\sigma(t)$ pour le cas de $V(x) = g\cdot(x-(L/2))^2$, en variant la constante de couplage g.
3. L'énergie correspondante est donnée par l'expression

$$E = \frac{\int_0^L \Phi(x,t)H\Phi(x,t)dx}{\int_0^L \Phi(x,t)^2dx}$$

Afficher E en fonction de la largeur σ_0. Est-elle conservée par l'évolution en temps imaginaire ?