Simulation et observations du chaos classique et du chaos quantique. Modèle de “Harper pulsé”

Frédéric Faure

22 janvier 2008

fichier: enseignement/c++/projets/chaos_quantique/chaos_quantique.lyx

Contents

1 Introduction **1**

2 Modèle classique **2**
2.1 Préliminaire: équations de Hamilton classiques 2
2.2 Le Hamiltonien classique 3
2.3 Programmation 3

3 Modèle quantique **4**
3.1 L'équation de Schrodinger 4
3.2 Espace des états quantiques 5
3.3 L'opérateur d'évolution $\hat{U}$ 5
3.4 Paquets d'ondes et représentation dans l'espace de phase 5
3.5 Simulation 5

1 Introduction

La mécanique quantique stipule que les propriétés spatiales d'un objet sont décrites par une onde, appelées **onde quantique**. **L'équation de Schrödinger** gouverne l'évolution des cette onde au cours du temps.

Il y a des cas où cette onde peut être concentrée spatialement, et former un **paquet d'onde**. On observe alors que ce paquet d'onde se déplace au cours du temps et reste localisé pendant un certain temps. Ce paquet d'onde peut avoir une taille microscopique, et à grande échelle, il apparait comme un point, une particule. Il est donc de considérer ce paquet d'onde comme une **particule dite “classique”**, qui correspond au centre du paquet d'onde. Le mouvement de cette particule classique est décrite par une **équation de mouvement classique** de type **Newton** ($m\vec{a} = \vec{F}$) ou **Hamilton** (voir ci-dessous).

C'est ainsi que l'on a une correspondance entre la mécanique quantique et la mécanique classique.

Le but de ce projet est de simuler dans un modèle simple le mouvement de ces paquets d'ondes quantiques, et simultanément d'observer le mouvement de la particule classique, afin de comprendre cette correspondance.

Il apparait que certaines équations de mouvement classiques sont simples en apparence, et déterministe, mais engendre un mouvement très complexe de la particule, imprévisible, dit **chaotique**. On se pose alors la question de savoir ce que devient le paquet d'onde dans ce cas? **C'est le problème du chaos quantique**. D'un point de vue plus mathématique, cette situation est paradoxale à priori car l'équation de Schrodinger est linéaire et ne peut donc engendrer du chaos en principe. Le modèle qui suit permettra d'observer cette situation.

La première étape sera d'observer le comportement classique de la particule, et ensuite le comportement quantique.

2 Modèle classique

Considérons une particule à une dimension. On appelle q sa position, et p son impulsion.

2.1 Préliminaire: équations de Hamilton classiques

L'équation de mouvement de Newton s'écrit:

$$m\frac{d^2q}{dt^2} = F(q) \tag{1}$$

où $F(q)$ est la force subit à la position q. On introduit l'énergie potentielle $V(q)$ telle que $F(q) = -\frac{dV}{dq}$, et l'**énergie totale**, appelée aussi **fonction de Hamilton**:

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \tag{2}$$

L'impulsion s'écrit $p = m\frac{dq}{dt}$. Montrer alors que l'équation de mouvement (1), s'écrit aussi (**équations de Hamilton**):

$$\frac{dq(t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \tag{3}$$

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \tag{4}$$

Les variables position et impulsion (q,p) forment **l'espace de phase**. Au cours du temps la particule bouge dans l'espace réel $q(t)$, mais le point $(q(t),p(t))$ bouge dans l'espace de phase.

En conclusion, pour décrire un système classique, il suffit de spécifier la fonction de Hamilton $H(q,p)$, qui n'est rien d'autre que l'énergie totale.

2.2 Le Hamiltonien classique

On suppose que la particule est sur un cercle de circonférence 1, c'est à dire que sa position est repérée par $q \in [0, 1[$.

Pour simplifier, notre modèle sera un peu artificiel, car le Hamiltonien ne sera pas sous la forme (2), mais on prendra:

$$H(t) = \begin{cases} H_1 = -A\cos(2\pi p) & \text{si } 0 < t < 1/2 \\ H_2 = -A\cos(2\pi q) & \text{si } 1/2 < t < 1 \end{cases} \tag{5}$$

Autrement dit l'expression de l'énergie est H_1 ou H_2 alternativement, et ensuite pour $t > T$, cela alterne de la même facon périodique.

Ne pas s'effrayer par l'apparence étrange de $H(t)$, car les équations qui suivent seront très simples, et la simulation montrera le mouvement d'une particule, comme attendu. On peut considérer H_2 comme une énergie potentielle périodique. Par contre H_1 ne ressemble pas à l'énergie cinétique (sauf pour $p \simeq 0$, car $H_1 \simeq -A\left(1 - \frac{(2\pi)^2}{2}p^2 + \ldots\right)$). L'intérêt de la périodicité en p, est qu'il suffit de considérer p périodique dans l'intervalle $[0, 1[$. L'espace de phase (q, p) est alors un carré (un tore plus précisement), et pas $\mathbb{R}^2$.

Exercice 1:

1. A partir de eq(3), et (5), déterminer le mouvement $q(t)$ et $p(t)$ pour $0 < t < 1/2$, puis pour $1/2 < t < 1$.

2. Si on note (q_0, p_0) les conditions initiales de la particule à $t = 0$, déduire (q_1, p_1) sa position et impulsion à l'instant $t = 1$. Plus généralement, on note (q_n, p_n) à l'instant n. Donner q_{n+1}, et p_{n+1} en fonction de q_n et p_n.

2.3 Programmation

Ecrire un programme qui permet de choisir (q_0, p_0) et d'observer la position q_n de la particule au cours du temps n et le point correspondant (q_n, p_n) dans l'espace des phases, pour $n = 1, 2, \ldots$.

Exercice 2 (Exploitation du programme):

1. Simuler l'évolution de la particule classique, et commenter, pour $A = 0.05$,0.3,0.5. Observer les résonances, et le chaos qui apparait.

2. A partir de quelle valeur de A le chaos envahit t-il tout l'espace de phase?

3. Décrire une trajectoire simple dans l'intervalle $t \in [0, 1[$.

4. Option: rajouter du frottement (faible) dans les équations de mouvement, et observer le comportement de la particule.

3 Modèle quantique

3.1 L'équation de Schrodinger

Le modèle quantique s'obtient directement à partir du modèle classique précédent, en décrivant maintenant l'état de la particule à l'instant t par sa fonction d'onde $\psi(q,t)$. L'**équation de Schrodinger** est

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

avec $\hat{H}$ obtenu par eq.(5), en remplaçant q par l'opérateur de position $\hat{q}$, et p par l'opérateur d'impulsion $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}$.

Note: la constante de Planck $\hbar$ est ici sans dimension, car on suppose quelle est exprimée dans les unités associées au système étudié. Ainsi si le système est petit (microscopique), $\hbar$ sera grand (ex: $\hbar = 0,66\,eV.fms$), par contre, si le système est grand (macroscopique), alors $\hbar$ sera petit (ex:$\hbar = 6.6\,10^{-34}J.s.$) Dans ce dernier cas, $\hbar \to 0$, on s'attend à ce que la mécanique classique et la mécanique quantique donnent des comportements analogues. Nous allons le vérifier.

Exercice

1. Montrer que $\psi(t = 1/2)$ s'obtient à partir de $\psi(t = 0)$ par

$$\psi(1/2) = e^{-i\frac{\hat{H}_1}{\hbar}\frac{1}{2}}\psi(0)$$

   et de même:

$$\psi(1) = e^{-i\frac{\hat{H}_2}{\hbar}\frac{1}{2}}\psi(1/2)$$

2. Déduire que:

$$\psi(1) = \hat{U}\psi(0)$$

   et donner l'expression de $\hat{U}$, à partir de $\hat{H}_1$ et $\hat{H}_2$. On appelle $\hat{U}$ l'**opérateur d'évolution**. Il permet de simuler l'évolution de n'importe quelle fonction d'onde.

La fonction d'onde qui nous intéresse est **un paquet d'onde** noté $\psi_{q,p}$ concentré à la position q et impulsion p, car comme expliqué dans l'introduction, c'est celle qui correspond le plus à une particule classique.

Les paragraphes suivants présentent en détail l'étude mathématique de l'opérateur $\hat{U}$.

3.2 Espace des états quantiques

3.3 L'opérateur d'évolution $\hat{U}$

3.4 Paquets d'ondes et représentation dans l'espace de phase

3.5 Simulation

On notera

$$N = \frac{1}{2\pi\hbar}$$

Donc les grandes valeurs de N correspondent à des petites valeurs de $\hbar$.

1. Observer le paquet d'onde ψ_{q_0,p_0} dans l'espace réel q et dans l'espace de phase (q,p), pour différentes valeurs de (q_0,p_0) et $\hbar$. Quelle est la signification physique de sa taille?

2. Observer aussi son évolution après la durée t dans l'espace réel q et dans l'espace de phase (q,p), pour différentes valeurs de A. Comparer à la position de la particule classique.