

# Projet de mécanique quantique

20 mai 2022

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Aspects informatiques</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Dessin de la fonction potentiel</b>	<b>4</b>
<b>4</b>	<b>Évolution de la particule classique</b>	<b>5</b>
4.1	Exercice de calcul . . . . .	5
4.2	Exercice de programmation . . . . .	6
4.2.1	Améliorations . . . . .	6
<b>5</b>	<b>Les niveaux d'énergie quantiques</b>	<b>7</b>
5.1	Base orthonormée . . . . .	7
5.2	Remplissage de la matrice de $\hat{H}$ . . . . .	8
5.2.1	Exercices de calcul . . . . .	9
5.2.2	Exercice de programmation . . . . .	10
<b>6</b>	<b>Les fonctions d'ondes stationnaires</b>	<b>11</b>
6.1	Exercice de programmation . . . . .	12
6.2	Suggestions pour l'exploitation du programme . . . . .	13
<b>7</b>	<b>Évolution d'un paquet d'onde</b>	<b>14</b>
7.1	Exercices de calcul . . . . .	14
7.2	Exercices de programmation . . . . .	15
7.3	Suggestions pour l'exploitation du programme . . . . .	16
<b>8</b>	<b>Représentation de la dynamique classique et quantique dans l'espace de phase (supplément)</b>	<b>16</b>

<b>9</b>	<b>Dynamique chaotique. Chaos classique et Chaos quantique (supplément)</b>	<b>16</b>
9.1	Chaos classique . . . . .	17
9.2	Chaos quantique . . . . .	17

# 1 Introduction

On modélise le mouvement de vibration d'un atome dans une molécule en simplifiant à l'extrême :

On va supposer que l'atome étudié A se déplace selon la dimension  $x \in \mathbb{R}$ , et que les autres atomes sont fixes. Ainsi l'atome A subit des forces de la part des autres atomes, décrites par la fonction énergie potentielle  $V(x)$ . Son énergie (Hamiltonien) est alors :

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (1.1)$$

où  $p \in \mathbb{R}$  est l'impulsion,  $m > 0$  est la masse de l'atome.

En pratique, la fonction énergie potentielle sera un polynôme de degré  $d$  fixé :

$$V(x) = V_0 + V_1x + V_2x^2 + \dots + V_dx^d \quad (1.2)$$

avec  $V_j \in \mathbb{R}$ , pour  $j = 0 \rightarrow d$ . Voir figure 1.1.

Noter que les unités physiques (énergie, longueur, masse,...) peuvent être choisies telles que tous les paramètres ( $\hbar$ ,  $m$ , ...) ont des valeurs de l'ordre de 1.

Par exemple pour un puits de potentiel anharmonique :

$$V(x) = 0.5x^2 + 0.02x^4$$

pour un double puits de potentiel :

$$V(x) = -0.5x^2 + 0.005x^4 \quad (1.3)$$

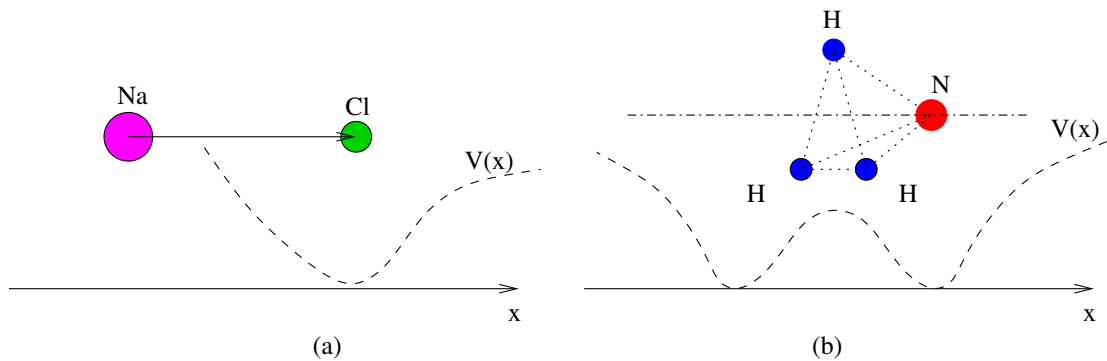


FIGURE 1.1 – (a) Vibration de l'atome Na dans la molécule NaCl et potentiel effectif. (b) Vibration de l'atome N dans la molécule NH3 et potentiel effectif.

- Dans la première partie, on étudie **l'évolution classique de l'atome** modélisé par une particule ponctuelle.

- Dans la deuxième partie, on modélise l'atome par une fonction d'onde quantique, et l'on cherche les **fonctions d'ondes stationnaires**. En observera en particulier le **spectre discret d'énergie**, et l'**effet tunnel** dans le cas du double puits.
- Dans la troisième partie, on étudie **l'évolution de l'onde quantique** de l'atome en prenant comme état quantique de départ, un paquet d'onde Gaussien de position moyenne  $x_0$  et impulsion moyenne  $p_0$ . On comparera cette évolution à celle de la particule classique.
- En option, on proposera ensuite de représenter la dynamique classique et quantique dans l'espace des phases  $(x, p)$ , ce qui apporte beaucoup à la compréhension des phénomènes, ou d'étudier des potentiels dépendants du temps, donnant lieu à du chaos (chaos classique et chaos quantique).

#### Références :

- Le cours de mécanique quantique [2].
- Le livre de Cohen T. et al. [1].

## 2 Aspects informatiques

On propose d'utiliser le langage de programmation scientifique python ou c++.

Voici un didacticiel python ou didacticiel c++ pour utiliser ces langages dans un projet scientifique comme celui ci.

## 3 Dessin de la fonction potentiel

Variables :

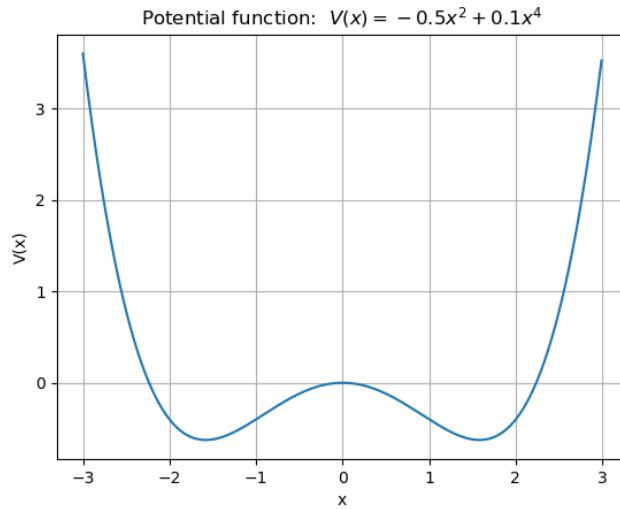
- Les coefficients  $(V_i)_{i=0 \rightarrow d}$  sont stockés dans une liste appelée  $V$ .
- l'intervalle d'étude  $[x_{\min}, x_{\max}]$ .

Fonctions

- Une fonction `Potentiel()`
  - entrée :  $x \in \mathbb{R}$
  - sortie  $V(x)$
- Une fonction `Dessin_V()` qui dessine la fonction  $V(x)$  pour l'intervalle  $[x_{\min}, x_{\max}]$ .

Vérifier que le programme fonctionne avec des exemples de  $V(x)$ .

**Exemple de résultat attendu :**



**Solution:** potential\_V.py

## 4 Évolution de la particule classique

### 4.1 Exercice de calcul

**Exercice 4.1.** (1) A partir de eq.(1.1), écrire les équations de mouvement de Hamilton donnant  $dx/dt$  et  $dp/dt$  ?

- (2) Supposons donné  $(x_0, p_0)$  à l'instant  $t = 0$ , et un pas de temps  $dt$  fixé. L'**algorithme d'Euler** est l'expression qui exprime les valeurs  $(x_1, p_1)$  à l'instant  $dt$  à partir de  $(x_0, p_0)$  et  $dx/dt$  et  $dp/dt$  au premier ordre. Et ainsi de suite.
- (3) Donner l'expression de  $(x_i, p_i)$  à l'instant  $t_i = i dt$  à partir de  $(x_{i-1}, p_{i-1})$  et  $dx/dt$  et  $dp/dt$  ?

**Solution 4.1** Le Hamiltonien est

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

Les équations de mouvement de Hamilton sont

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{dV}{dx}$$

On a  $x_i = x(t)$  et

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x(t + dt) = x(t) + dt \left( \frac{dx}{dt} \right) + O(dt^2) \\ &\approx x_i + dt \left( \frac{dx}{dt} \right) \end{aligned}$$

De même

$$p_{i+1} \simeq p_i + dt \left( \frac{dp}{dt} \right)$$

## 4.2 Exercice de programmation

- En utilisant l'algorithme de Euler précédent, écrire une fonction `Evolution_classique()`
- entrée :

`x,p` : position et impulsion de la particule à  $t = 0$ .

`t` : temps d'intégration

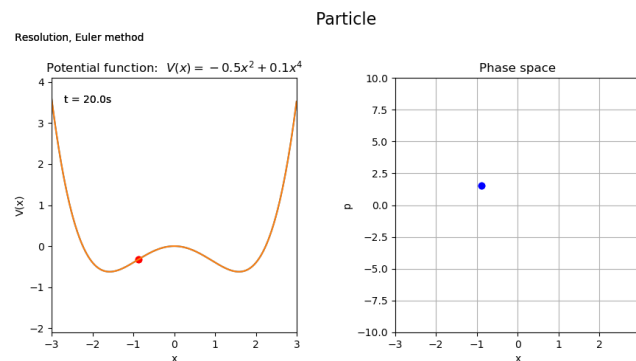
`opt_des` : Si `opt_des=1`, cette fonction fera le dessin de la particule classique sur la fenetre sous forme d'un point.

- sortie :

`x,p` : position et impulsion de la particule à la date  $t$ .

Dans le programme principal, rajouter l'appel de la fonction `Evolution_classique()`. Vérifier que le programme fonctionne.

**Exemple de résultat attendu :**



**Solution:** trajectoires.py

### 4.2.1 Améliorations

- Utiliser la fonction `odeint()` pour avoir une meilleure précision pour l'intégration.

**Solution:** trajectoires\_odeint.py

— On pourra rajouter le dessin des lignes de niveaux de la fonction  $H(x, p)$ .

## 5 Les niveaux d'énergie quantiques

Pour résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\hat{H}|\psi_e\rangle = E_e|\psi_e\rangle, \quad e = 0, 1, \dots \quad (5.1)$$

on décide d'écrire cette équation sous forme matricielle. Pour cela il faut choisir une base orthonormée de l'espace de Hilbert  $L^2(\mathbb{R})$ .

### 5.1 Base orthonormée

Pour des raisons pratiques, nous choisissons la base de vecteurs propres de l'oscillateur Harmonique, noté  $|n\rangle, n = 0, 1, 2, \dots$ , défini par :

$$\hat{H}_0 |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle, \quad n = 0, 1, \dots, \infty$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2, \quad \varepsilon_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

La pulsation  $\omega > 0$  est un paramètre fixé que nous pouvons choisir.

Attention, ne pas confondre  $\hat{H}_0$ , et le véritable Hamiltonien  $\hat{H}$  dont on cherche le spectre.

Nous décidons de tronquer cette base infinie et ne garder que les premiers vecteurs :

$$|n\rangle, \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad N \text{ fixé}$$

avec  $N > 0$  entier fixé et "assez grand". La valeur dépendra de la puissance de l'ordinateur utilisé.

Dans cette base l'opérateur  $\hat{H}$  est donc représenté par une matrice  $N \times N$  dont les éléments de matrice sont :

$$H_{n',n} = \langle n' | \hat{H} | n \rangle, \quad n, n' = 0 \rightarrow N-1. \quad (5.2)$$

**Exercice 5.1.** En utilisant la relation de fermeture  $\text{Id} = \sum_n |n\rangle \langle n|$ , montrer que l'équation (5.1) s'écrit sous forme matricielle :

$$\sum_n H_{n',n} \psi_n = E \psi_{n'}$$

avec le vecteur  $\psi$  de composantes

$$\psi_n = \langle n | \psi \rangle$$

**Solution 5.2.** A partir de  $\hat{H}|\psi_e\rangle = E_e|\psi_e\rangle$ , on introduit l'opérateur identité  $\hat{I} = \sum_n |n\rangle\langle n|$  et multiplie par  $\langle n'|$ . Cela donne

$$\sum_{n \geq 0} \langle n'|\hat{H}|n\rangle \langle n|\psi_e\rangle = E_e \langle n'|\psi_e\rangle$$

Soit l'équation matricielle :

$$\sum_n H_{n',n} \psi_n = E \psi_{n'}$$

avec  $\psi_n = \langle n|\psi\rangle$  et  $H_{n',n} = \langle n'|\hat{H}|n\rangle$ .

Cette équation matricielle est une équation aux valeurs propres, admettant comme solutions  $N$  valeurs propres  $E_e$ ,  $e = 0, 1, \dots, N-1$  et  $N$  vecteurs propres correspondants,  $\psi_e = \langle n|\psi_e\rangle$ .

Pour trouver les niveaux d'énergie  $E_e$ , il faudra donc :

- (1) Remplir la matrice  $H_{n',n}$
- (2) Diagonaliser cette matrice

## 5.2 Remplissage de la matrice de $\hat{H}$

Pour calculer  $H_{n',n}$  il faut d'abord calculer  $\langle n'|\hat{p}^2|n\rangle$  et  $\langle n'|\hat{x}^2|n\rangle$ . Pour cela on fait le changement de variables

$$\hat{Q} = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \hat{x} \tag{5.3}$$

$$\hat{P} = \left(\frac{1}{m\hbar\omega}\right)^{1/2} \hat{p} \tag{5.4}$$

et on utilise les opérateurs création et annihilation

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{P}) \\ a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{P}) \quad : \text{ adjoint de } a \end{aligned}$$

qui vérifient

$$[a, a^+] = \hat{I}$$

Leur principal intérêt est que leur action sur les états de base  $|n\rangle$  est simple :

$$\begin{aligned} a^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle, & \text{pour } n \geq 0 \\ a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle, & \text{pour } n \geq 1 \end{aligned}$$



### 5.2.1 Exercices de calcul

**Exercice 5.3.** Exprimer  $\hat{x}, \hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x}^2, \hat{H}_0$  et  $\hat{x}^3$  à partir de termes de la forme  $a^{+i} a^j$ , avec  $i, j \geq 0$  (dans le résultat, on veut que les opérateurs  $a^+$  soient à gauche des opérateurs  $a$ ; utiliser  $aa^+ = a^+a + \hat{I}$ ). Montrer par exemple que :

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\omega \hbar}{4} \left( -a^2 - a^{+2} + 2a^+a + \hat{I} \right) \quad (5.5)$$

**Solution 5.4.**

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^+) \\ \hat{p} &= \sqrt{m\hbar\omega} \frac{i}{\sqrt{2}} (a^+ - a) \\ \frac{\hat{p}^2}{2m} &= \frac{\omega \hbar}{4} \left( -a^2 - a^{+2} + 2a^+a + \hat{I} \right) \\ \hat{x}^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left( a^2 + a^{+2} + 2a^+a + \hat{I} \right) \\ \hat{H}_0 &= \hbar\omega \left( a^+a + \frac{1}{2}\hat{I} \right) \\ \hat{x}^3 &= \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} (a^{+3} + 3a^{2+}a + 3a^+a^2 + a^3 \\ &\quad + 3a + 3a^+) \end{aligned}$$

**Exercice 5.5.** Montrer que

$$\langle n' | a^{+i} a^j | n \rangle = \begin{cases} \left( \frac{n'!}{(n'-i)!} \frac{n!}{(n-j)!} \right)^{1/2} \text{ si } (n' - i) = (n - j) \text{ et } n' \geq i, & n \geq j \\ 0 \text{ sinon.} \end{cases} \quad (5.6)$$

et pour  $i, j$  fixés, faire un schéma d'une matrice, avec les indices  $n, n' = 0, 1, \dots$ , montrant l'emplacement des éléments de matrices non nuls  $\langle n' | a^{+i} a^j | n \rangle$ .

**Solution 5.6.** On a  $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ , donc  $a^2|n\rangle = \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle$ , etc et si  $n-j \geq 0$ , alors

$$a^j|n\rangle = \sqrt{n(n-1)\dots(n-j+1)}|n-j\rangle = \sqrt{\frac{n!}{(n-j)!}}|n-j\rangle$$

Si  $n-j < 0$  alors  $a^j|n\rangle = 0$ . Donc  $\langle n' | a^{+i} = \langle n' - i | \sqrt{\frac{n'!}{(n'-i)!}}$  si  $n' - i \geq 0$ , et

$$\langle n' | a^{+i} a^j | n \rangle = \left( \frac{n'!}{(n'-i)!} \frac{n!}{(n-j)!} \right)^{1/2} \underbrace{\langle n' - i | n - j \rangle}_{=1 \text{ si } n'-i=n-j}.$$

**Exercice 5.7.** (difficile) Montrer que  $\hat{x}^b$  avec  $b \in \mathbb{N}$ , s'exprime à partir de termes de la forme  $a^{+i} a^j$ , avec  $i, j \geq 0$  de la façon suivante :

$$\hat{x}^b = \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{(b/2)} \sum_{s=0}^{[b/2]} D_s^b \sum_{p=0}^{b-2s} C_{b-2s}^p (a^{+(b-2s-p)} a^p) \quad (5.7)$$

où

- (1)  $[b/2]$  signifie la partie entière
- (2)  $D_s^b = (2s-1)!! C_b^{2s}$ , si  $s > 0$  et sinon  $D_0^b = 1$ .
- (3)  $b!! = b(b-2)(b-4) \dots 1$
- (4)  $C_c^p = \frac{c!}{(c-p)!p!}$ .

**Exercice 5.8.** (important)

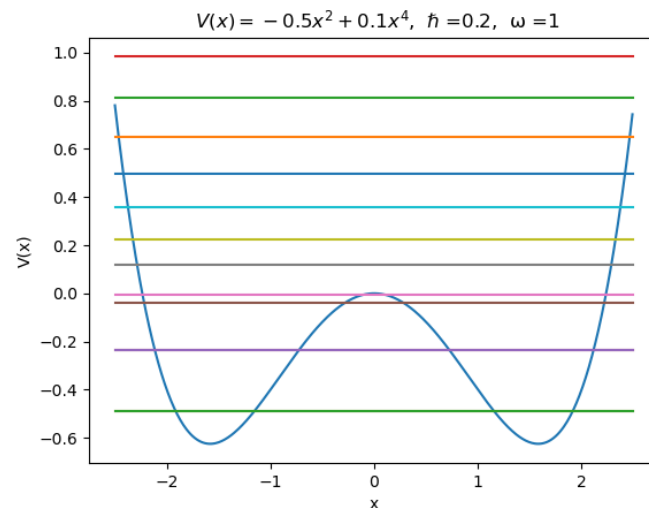
- Dans le but de vérifier si le programme marchera, écrire sur le papier, les éléments de matrice (dans la base  $|n\rangle$ ), des opérateurs  $\frac{1}{2}\hat{x}^2, \frac{1}{2}\hat{p}^2, \hat{H}$  dans le cas simple où  $V(x) = 0.5x^2$ , et  $m = \hbar = \omega = 1$ .
- Même exercice pour  $V(x) = x + 0.5x^2$ , et  $m = \hbar = \omega = 1$ .

### 5.2.2 Exercice de programmation

- Rajouter les variables
  - `hbar` : constante de planck
  - `N` : dimension de espace Hilbert utilisé
  - `omega` : parametre de  $H_0$
  - `hmat` : matrice de  $\hat{H}$  dans la base  $|n\rangle$ , avec  $n = 0 \rightarrow N-1$
  - `vect_p` : vecteurs propres obtenus après diagonalisation
  - `spectre` : énergies (valeur propres réelles)
- Fonctions :
  - initialiser les variables
  - Si besoin les fonctions suivantes
  - `rfact()`
    - entrée : entiers  $n, i$
    - sortie :  $\frac{n!}{(n-i)!}$ .
  - `fact()` qui calcule  $n!$  (en python il y a `math.factorial(x)` ou `scipy.special.factorial.html`)
  - `dfact()` qui calcule  $n!!$  (en python, `scipy.special.factorial2.html`)
  - `binome()` qui effectue  $C_n^p$ . (en python `scipy.special.comb.html`)
  - Avant de continuer plus avant, tester ces fonctions avec des exemples simples :  $50!$ , etc....
- Nous avons vu que l'opérateur  $\hat{H}$  s'écrit comme une somme d'opérateurs de la forme  $c a^{+i} a^j$ , avec  $c \in \mathbb{R}$ . Pour construire la matrice `hmat` de  $\hat{H}$ , on rajoute donc les éléments de matrice des opérateurs  $c a^{+i} a^j$ . Faisons cela en deux étapes :
  - (1) En supposant la matrice de  $H$  déjà initialisée, rajouter une fonction `Remplit2()`

- (a) entrée :  $i, j \in \mathbb{N}$ ,  $c \in \mathbb{C}$
- (b) sortie : rajoute à la matrice `hmat` les éléments de matrices spécifiques à l'opérateur  $c a^{+i} a^j$ . Utiliser le résultat (5.6).
- (2) Ecrire une fonction `Remplit_matrice()` qui
  - remplit les éléments de matrice de  $\hat{p}^2/(2m)$ , en utilisant (5.5) et la fonction `Remplit2()` précédente.
  - remplit les éléments de matrice de  $V(x)$ , en utilisant (1.2) et (5.7) et la fonction `Remplit2()` précédente.
  - Diagonalise la matrice `hmat` ainsi remplie, fournissant les valeurs propres  $E_e$  dans la liste `spectre`, et les composantes  $\langle n|\psi_e\rangle$  des vecteurs propres dans le tableau `vect_p`.
- Dans le programme principal, appeler la fonction `Remplit_matrice()`, et afficher les niveaux d'énergies trouvés.
- Vérifier les résultats obtenus en testant avec le potentiel  $V(x) = 0.5x^2$ .
- Si ça ne marche pas, vérifier le contenu de `hmat` au fur et à mesure de sa construction et comparer aux résultats de l'exercice 5.8.
- Dessiner les niveaux d'énergie comme des lignes horizontales, superposés à la fonction  $V(x)$ .

**Exemple de résultat attendu :**



**Solution:** spectrum.py

## 6 Les fonctions d'ondes stationnaires

La diagonalisation précédente a fourni les composantes  $\langle n|\psi_e\rangle$  des états stationnaires. Pour dessiner les fonctions d'ondes  $x \rightarrow \psi_e(x) = \langle x|\psi_e\rangle$ , il faut effectuer un changement

de base. La relation de fermeture donne :

$$\psi_e(x) = \langle x | \psi_e \rangle = \sum_{n \geq 0} \langle x | n \rangle \langle n | \psi_e \rangle$$

où  $\langle x | n \rangle$  est la fonction d'onde du niveau  $n$  de l'oscillateur Harmonique :

$$\varphi_n(x) = \langle x | n \rangle = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \left( \frac{1}{n!2^n} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right) H_n(Q)$$

et

$$Q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

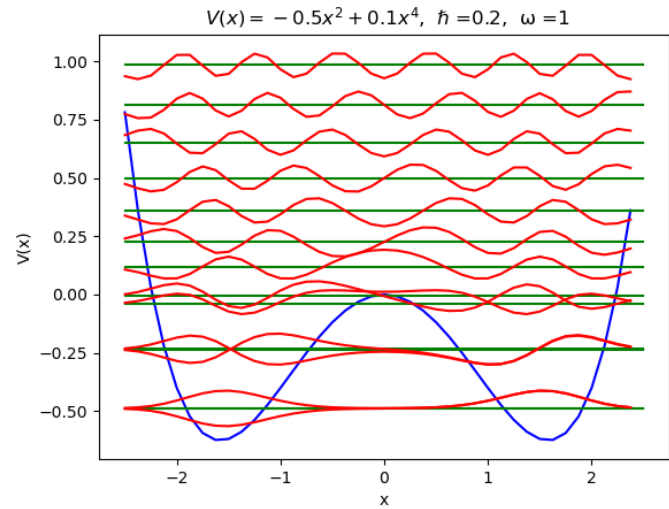
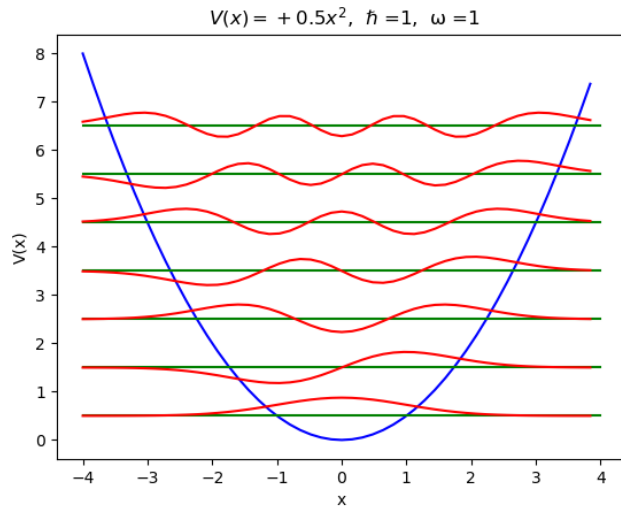
et  $H_n(Q)$  est un polynome d'Hermite défini par les relations de récurrence :

$$\begin{aligned} H_0(Q) &= 1 \\ H_1(Q) &= 2Q \\ H_n(Q) &= 2QH_{n-1}(Q) - 2(n-1)H_{n-2}(Q) \quad \text{si } n \geq 2 \end{aligned}$$

## 6.1 Exercice de programmation

- Rajouter une fonction `Hermite()` qui calcule  $H_n(Q) \in \mathbb{R}$  avec en entrée  $n \in \mathbb{N}, Q \in \mathbb{R}$ .  
Aide : utiliser la récursivité. Commencer la fonction par la commande `print(n)`. Comprendre pourquoi l'appel de `Hermite(5,3)` affiche la suite 5,4,3,2,1,0,1,2,1,0,3,2,1,0,1.
- Rajouter une fonction `coef_x_n()` qui calcule  $\varphi_n(x) = \langle x | n \rangle$  avec en entrée  $x \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}$ .
- Rajouter une fonction `coef_x_e()` qui calcule  $\psi_e(x) = \langle x | \psi_e \rangle$  avec en entrée  $x \in \mathbb{R}, e \in \mathbb{N}$ .
- Rajouter une fonction `Dessin_psi_x()` qui dessine  $x \rightarrow \psi_e(x)$  (en superposition au potentiel  $V(x)$ ) avec en entrée  $e \in \mathbb{N}$ .
- Vérifier que les fonctions précédentes fonctionnent correctement dans le cas simple  $V(x) = \frac{1}{2}x^2$  puis d'autres cas.

**Exemple de résultat attendu :**



**Solution:** `eigen_functions.py`

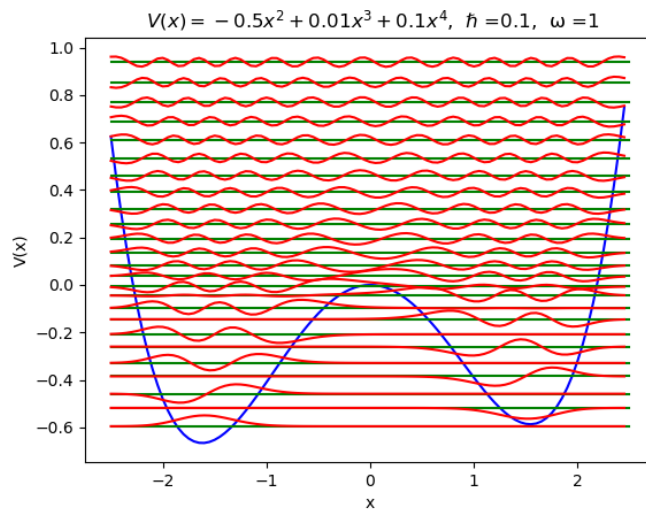
## 6.2 Suggestions pour l'exploitation du programme

- (1) Comment réduire le temps de calcul du programme ? suggestion : mettre les valeurs  $\langle x|n \rangle$  pour différents  $x, n$  à  $x$  fixé, dans un tableau. De même, mettre  $H_n(Q)$  à  $Q$  fixé, dans un tableau.

**Solution:** `eigen_functions_v2.py`

- (2) Observer les niveaux d'énergie et ondes stationnaires pour différents potentiels  $V(x)$ .

**Exemple de résultat attendu :**



- (3) Pour un potentiel donné, trouver un critère permettant de choisir au mieux les paramètres numériques  $N, \omega$  ? (Aide : raisonner dans l'espace de phase, en comparant le lieu des états  $|n\rangle, n = 0 \rightarrow N$  par rapport au lieu des trajectoires).
- (4) Pour le potentiel anharmonique  $V(x) = 0.5x^2 + \lambda x^4$ , Comparer le niveau d'énergie  $E_{n=0}(\lambda)$  obtenu numériquement avec des résultats donnés par des méthodes d'approximation comme :
  - (a) la **théorie des perturbations stationnaire** au 2ème ordre
  - (b) la **méthode variationnelle**, appliquée à une fonction gaussienne de largeur  $\sigma$  ajustable.
  - (c) la **règle de quantification semi-classique** de Bohr Sommerfeld :  $S(E) = h(n + 1/2)$ .
- (5) Pour le double puits (1.3), ajouter à  $V(x)$  un paramètre externe qui fait varier la profondeur relative des puits (par exemple un terme linéaire  $\lambda x$ ) et tracer les niveaux d'énergie  $E_n(\lambda)$  en fonction de  $\lambda$ . Observer les fonctions d'ondes stationnaires. Interpréter l'**effet tunnel** observé. Voir [1].

## 7 Évolution d'un paquet d'onde

On rappelle l'équation d'évolution de Schrödinger pour un état arbitraire  $\psi(t) \in L^2(\mathbb{R})$  s'écrit :

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

Considérons un paquet d'onde Gaussien de position moyenne  $x_0$  et impulsion moyenne  $p_0$ , défini par :

$$|x_0, p_0\rangle = \exp(ip_0 \hat{x}/\hbar - ix_0 \hat{p}/\hbar) |0\rangle$$

(c'est le paquet d'onde Gaussien  $\psi_0(x)$  translaté convenablement en position et impulsion).

Nous aurons besoin de ses composantes dans la base  $|n\rangle$ .

### 7.1 Exercices de calcul

- (1) Montrer que :

$$\langle n | x_0, p_0 \rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \frac{z^n}{\sqrt{n!}}$$

avec

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_0 + iP_0) \in \mathbb{C}$$

et  $Q_0, P_0$  obtenus à partir de  $q_0, p_0$  par (5.3).

- (2) Supposons que  $|\psi(0)\rangle$  est un état quantique donné à  $t = 0$ . Montrer que son état évolué à l'instant  $t$  est

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\psi(0)\rangle$$

En utilisant des relations de fermeture, montrer que

$$\langle n|\psi(t)\rangle = \sum_{e \geq 0} e^{-\frac{i}{\hbar}E_e t} \langle n|\psi_e\rangle \sum_{n' \geq 0} \langle \psi_e|n'\rangle \langle n'|\psi(0)\rangle \quad (7.1)$$

La fonction d'onde correspondante est

$$\psi(x, t) = \langle x|\psi(t)\rangle = \sum_{n \geq 0} \langle x|n\rangle \langle n|\psi(t)\rangle$$

## 7.2 Exercices de programmation

- Rajouter une fonction `coef_n_qp()`
  - entrée :  $n \in \mathbb{N}, q_0 \in \mathbb{R}, p_0 \in \mathbb{R}$
  - sortie  $\langle n|q_0, p_0\rangle \in \mathbb{C}$ .
- Rajouter la variable :
  - `psi` : liste des composantes  $\langle n|\psi\rangle \in \mathbb{C}$
- Rajouter une fonction `Initialise_psi()`
  - entrée :  $q_0, p_0 \in \mathbb{R}$
  - sortie initialise `psi[n]` par les valeurs  $\langle n|q_0, p_0\rangle$
- Rajouter une fonction `Evolution_quantique()`
  - entrée :  $t \in \mathbb{R}$
  - sortie : transforme le vecteur `psi[n]` =  $\langle n|\psi(0)\rangle$  en `psi[n]` =  $\langle n|\psi(t)\rangle$ , en utilisant (7.1).
  - Remarquer que en terme matriciel, si  $P$  est la matrice des vecteurs propres, c'est à dire  $P_{n,e} = \langle n|\psi_e\rangle$ , si  $\psi(0)$  est le vecteur initial c'est à dire  $\psi_n(0) = \langle n|\psi(0)\rangle$  et de même  $\psi(t)$  est le vecteur à la date  $t$  recherché, si  $D_t = \text{Diag}\left(\left(e^{-iE_e t/\hbar}\right)_{e=0 \rightarrow N-1}\right)$  est la matrice diagonale avec les éléments  $\left(e^{-iE_e t/\hbar}\right)_{e=0 \rightarrow N-1}$  sur la diagonale, alors (7.1) s'écrit simplement comme un produit de matrices

$$\psi(t) = P D_t P^\dagger \psi(0).$$

- Modifier la fonction `Dessin_psi_x()` déjà existante, pour dessiner au choix  $\psi_e(x)$  ou  $\psi(x, t)$ . (On pourra par exemple rajouter une variable `type`, valant 0 ou 1 selon que l'on choisit  $\psi_e(x)$  ou  $\psi(x, t)$ .)
- Dans le programme principal, appeler tour à tour les fonctions `Initialise_psi()`, `Evolution_quantique()`, `Dessin_psi_x()`, pour observer l'évolution du paquet d'onde après une durée  $t$  fixée.
- Faire une animation temporelle, montrant la particule classique et le paquet d'onde qui évoluent.

**Solution:** quantum\_evolution.py

### 7.3 Suggestions pour l'exploitation du programme

- (1) Observer l'effet tunnel du paquet d'onde dans le cas du double puits.
- (2) Pour différents potentiels, comparer et discuter l'évolution du paquet d'onde avec la particule classique, dans les temps courts et temps longs.
- (3) Créer des fichiers **gif animés**, montrant des évolutions intéressantes.

## 8 Représentation de la dynamique classique et quantique dans l'espace de phase (supplément)

- **En mécanique classique**, on représentera les lignes de niveau de la fonction Hamiltonien  $H(x, p) = p^2/2m + V(x)$ .
- Superposé à ce dessin, on représentera un point de coordonnées  $x(t), p(t)$  évoluant dans le plan  $(x, p)$ .
- **En mécanique quantique**, la **distribution de Husimi** d'un état quantique  $|\psi\rangle$  est la fonction positive sur l'espace de phase ([?])

$$Hus_\psi(x, p) = |\langle x, p | \psi \rangle|^2$$

En pratique, on utilise :  $\langle x, p | \psi \rangle = \sum_n \langle x, p | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \sum_n \overline{\langle n | x, p \rangle} \langle n | \psi \rangle$ . On dessinera donc la distribution de Husimi d'un **état stationnaire**  $|\psi_e\rangle$ , puis celle de **l'évolution du paquet d'onde**  $|\psi(t)\rangle$ .

**Solution:** quantum\_evolution\_phase\_space.py, movie\_2\_wells.mp4, movie\_HO.mp4

## 9 Dynamique chaotique. Chaos classique et Chaos quantique (supplément)

La dynamique étudiée jusqu'à présent est dite régulière car la particule classique est contrainte à se déplacer sur la courbe d'iso-énergie  $H(x, p) = E$  dans l'espace de phase. Si maintenant le Hamiltonien dépend du temps, l'énergie n'est plus conservée et la particule n'est plus contrainte à rester sur une courbe. **La dynamique devient plus complexe, du chaos peut apparaître.**

Le plus simple est de considérer un Hamiltonien dépendant périodiquement du temps. Sur une période  $T$  donnée,

$$H(x, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V_1(x) \quad \text{pour } 0 < t < T/2$$



$$H(x, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V_2(x) \quad \text{pour } T/2 < t < T$$

Où  $V_1$  et  $V_2$  sont deux fonctions potentiels fixées.

## 9.1 Chaos classique

Partant d'une condition initiale  $(x_0, p_0)$ , les équations de mouvement donnent  $x(t), p(t)$  que l'on représente par un point dans l'espace de phase à chaque période  $t = 0, T, 2T, \dots$ . Cela donne une série de points (pour  $t = iT, i = 0, 1, 2, 3, \dots$ ), appelée **trajectoire stroboscopique** :

$$(x_0, p_0) \rightarrow (x_1, p_1) \rightarrow (x_2, p_2) \rightarrow \dots$$

Représenter dans l'espace de phase les trajectoires stroboscopiques pour différentes conditions initiales  $(x_0, p_0)$  (avec des couleurs différentes).

Pour rendre conviviale cette construction, on pourra utiliser la souris, pour pointer et choisir la condition initiale.

## 9.2 Chaos quantique

Il y a deux potentiels différents  $V_1$  et  $V_2$ , donc deux matrices de Hamiltonien `hmat1`, `hmat2`.

On pourra représenter l'évolution d'un paquet d'onde initial, en représentation de position  $\psi(x, t)$ , ou dans l'espace de phase, avec sa distribution de Husimi, et comparer à la dynamique classique.

## References

- [1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Mécanique quantique*.
- [2] F. Faure. *Cours de Mécanique quantique pour Master M1 de physique*. [link](#), 2014.