

Diffraction d'un paquet d'onde de matière

1. Introduction

Cette page présente des résultats de calcul numérique de résolution de l'équation de Schrödinger à deux dimensions. Un paquet d'onde représentant une particule est diffracté par un écran comportant une ou plusieurs ouvertures.

L'équation de Schrödinger avec un potentiel nul est :

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (1)$$

Le calcul est fait sur un domaine rectangulaire de largeur 2 et de hauteur 1. La fonction d'onde a une valeur fixée à 0 sur les bords de ce domaine. Elle est aussi fixée à 0 sur l'écran diffractant.

La paquet d'onde est défini à l'instant initial par :

$$\psi(x, 0) = e^{ik_0 x} e^{-\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{4\sigma_0^2}} \quad (2)$$

Ce paquet d'onde est donc défini par sa position initiale, son nombre d'onde k_0 et sa largeur σ_0 (écart-type de la densité de probabilité).

Les calculs numériques sont faits sur un maillage de 1024 par 512. L'équation de Schrödinger est intégrée par la méthode des différences finies avec un schéma implicite à directions alternées.

La densité de probabilité de présence de la particule est représentée sous forme d'images en niveaux de gris. L'évolution temporelle est représentée par une vidéo.

2. Série 1

2.a. Définition

Voici les paramètres du paquet d'onde utilisés pour cette série :

$$x_0 = 0,5 \quad (3)$$

$$y_0 = 0,25 \quad (4)$$

$$k_0 = 500 \quad (5)$$

$$\sigma_0 = 0,1 \quad (6)$$

La largeur du paquet est choisie assez grande pour que son étalement soit négligeable pendant la traversée du domaine.

L'intervalle de temps entre deux images est $\Delta t = 0,014$.

2.b. Propagation libre

Cette simulation montre la propagation du paquet d'onde sans écran. On observe la réflexion du paquet sur le bord droit du domaine.

On vérifie que l'étalement du paquet d'onde au cours de son trajet est négligeable.

2.c. Ouverture simple

Cette simulation montre la diffraction du paquet d'onde par une ouverture simple (une fente) :

On voit la réduction du paquet d'onde dans la direction transversale lors du passage par l'ouverture, puis son étalement.

2.d. Ouverture double

Cette simulation montre la diffraction du paquet d'onde par une fente double :

2.e. Réseau

Cette simulation montre la diffraction du paquet d'onde par un réseau de fentes :

3. Série 2

3.a. Définition

Voici les paramètres du paquet d'onde utilisés pour cette série :

$$x_0 = 0,5 \quad (7)$$

$$y_0 = 0,25 \quad (8)$$

$$k_0 = 250 \quad (9)$$

$$\sigma_0 = 0,1 \quad (10)$$

La longueur d'onde moyenne est donc deux fois plus grande que précédemment (l'impulsion est deux fois plus petite).

3.b. Ouverture simple

L'étalement du paquet d'onde après l'ouverture est plus rapide lorsque la longueur d'onde est plus grande.

3.c. Ouverture double

3.d. Réseau

À la fin de la simulation, on commence à voir la réflexion sur les bords du domaine.