Développement micro-macro et précision uniforme pour le modèle de Bloch

Brigitte BIDÉGARAY-FESQUET, LJK, CNRS - Grenoble
Clément JOURDANA, LJK, UGA - Grenoble
Léopold TRÉMANT, LJK, INP - Grenoble

Pour décrire un atome ou un système quantique caractérisé par des états d'énergie discrets, une matrice densité ρ peut être utilisée. Ses termes diagonaux, appelés populations, représentent les probabilités d'occupation des états, et ses termes non-diagonaux, appelés cohérences, correspondent aux probabilités de transition d'un état à l'autre. Dans le contexte d'interactions laser-matière, l'évolution temporelle de ρ est décrite par une équation de Liouville, également appelée équation de Bloch, dans laquelle l'hamiltonien prend en compte l'énergie libre associée aux particules de l'objet quantique ainsi que l'énergie provenant de l'interaction avec le champ électromagnétique gouverné par des équations de Maxwell.

Dans ce travail, nous ne considérons pas le couplage Maxwell-Bloch, mais nous forçons le système avec un champ électrique hautement oscillant (de période caractéristique ε^2) et de faible amplitude (de taille ε). Pour ε petit, le problème est raide et le coût de résolution par des schémas numériques standard est prohibitif. Nous exploitons alors une hiérarchie de modèles asymptotiques rigoureusement obtenus dans [1] pour construire un schéma numérique uniformément précis, i.e. dont l'erreur et le coût ne dépendent pas du paramètre ε mais seulement du pas de discrétisation.

Dès la première approximation, ces modèles régissent uniquement le comportement des populations ρ_d. Dans le cas d'un forçage périodique, ils sont de la forme

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_{\mathrm{d}}^{\varepsilon}(t) = A(t/\varepsilon^2)\rho_{\mathrm{d}}^{\varepsilon}(t), \tag{1}$$

où l'opérateur $\tau \mapsto A(\tau)$ est une série exponentielle, c'est-à-dire que son comportement est caractérisé par des termes en $\tau \mapsto e^{(ik-m)\tau}$ avec $k \in \mathbb{Z}$ et $m \in \mathbb{N}$. En adaptant les méthodes développées dans [2, 3] pour des problèmes respectivement hautement oscillant et à relaxation rapide, nous approchons la solution de ce problème avec une précision uniforme. Pour cela, nous décomposons la solution en une partie macro (capturant le comportement asymptotique) et une partie micro (contenant le reste de l'information) moins raides, qui sont approchées numériquement avec des schémas standard.

Une perspective est d'étendre cette approche pour construire un schéma approprié pour l'équation de Bloch complète décrivant à la fois les populations et les cohérences.

[1] B. Bidégaray-Fesquet, F. Castella, P. Degond. *From the Bloch model to the rate equations.* Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series A, **11(1)**, 1–26, 2004.

[2] P. Chartier, M. Lemou, F. Méhats, G. Vilmart. *A new class of uniformly accurate numerical schemes for highly oscillatory evolution equations.* Foundations of Computational Mathematics, **20(1)**, 1–33, 2020.

[3] P. Chartier, M. Lemou, L. Trémant. *A uniformly accurate numerical method for a class of dissipative systems.* Mathematics of Computation, **91(334)**, 843–869, 2022.

Contact : `leopold.tremant@grenoble-inp.fr`