



UNIVERSITÉ CLAUDE BERNARD LYON 1

MASTER PHYSIQUE

PROJET INFORMATIQUE

---

# Etats de diffusion pour l'équation de Schrödinger 1D stationnaire

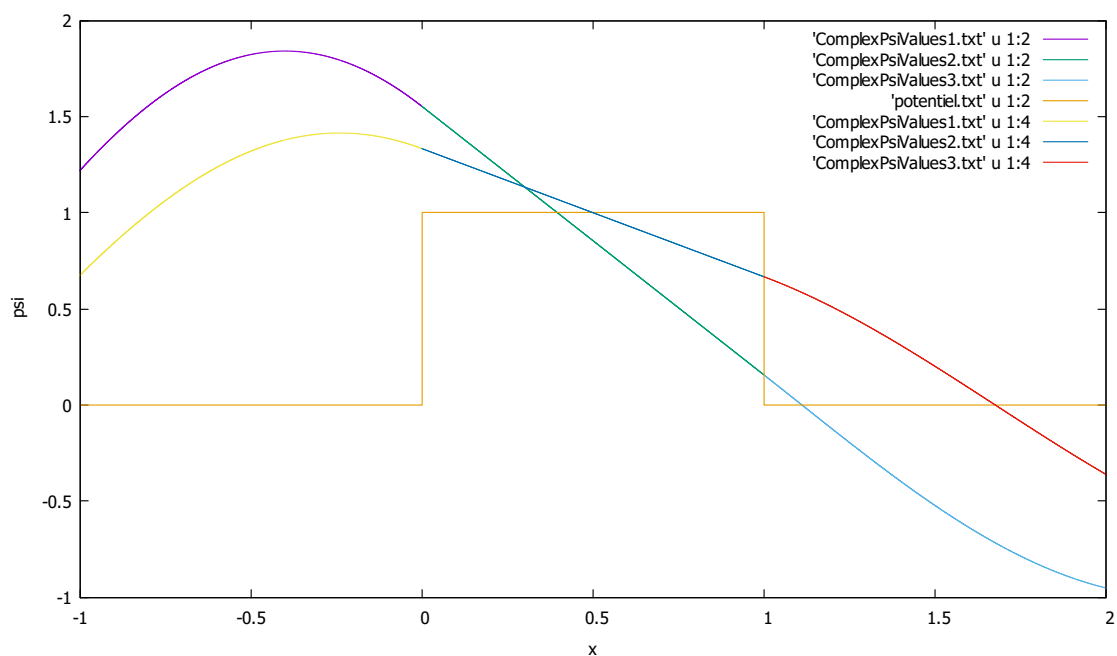
---

*Auteurs :*

LE CARRER CORRENTIN  
SELAHIYE ARAS

*Encadrant :*

ABDUL RAHMAN ALLOUCHE



18 avril 2023

# Contents

<b>Introduction</b>	<b>2</b>
<b>1 Principe physique et méthodes de résolution</b>	<b>3</b>
1.1 Equation de schrodinger . . . . .	3
1.2 Unité système atomique . . . . .	3
1.3 Méthodes de résolution utilisées . . . . .	3
1.3.1 Méthode 1 . . . . .	4
1.3.2 Méthode 2 . . . . .	4
1.3.3 Vérification fonctionnement . . . . .	4
<b>2 Coefficients de réflexion et de transmission pour différent potentiel</b>	<b>6</b>
2.1 Barrière de potentiel simple . . . . .	6
2.2 2 Barrières de potentiels simples . . . . .	6
2.3 3 Barrières de potentiels simples . . . . .	7
2.4 Barrière de potentiel gaussienne . . . . .	7
2.5 Barrière de potentiel triangle . . . . .	8
<b>3 Variation des paramètres</b>	<b>9</b>
3.1 Variation de l'énergie . . . . .	9
3.1.1 Particule Alpha . . . . .	9
3.1.2 Effet tunnel résonant . . . . .	10
3.1.3 Capture de particule a travers une série de puits de potentiel . . . . .	10
3.2 Variation de la taille du potentiel . . . . .	11
3.3 Variation de la masse . . . . .	12
<b>Conclusion</b>	<b>13</b>

## Introduction

Notre projet porte sur la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension, afin de déterminer les coefficients de réflexion et de transmission d'une particule à travers un potentiel. Notre programme va résoudre l'équation de Schrödinger numériquement par deux méthodes. Pour vérifier la validité de la résolution numérique notre programme comparera le résultat à la valeur analytique connue pour une barrière de potentiel simple. Dans un premier temps nous reviendrons sur l'équation de Schrödinger, son principe et son utilisation, et nous présenterons les deux méthodes de résolution. Ensuite nous présenterons des résultats pour différents potentiels dont on ne connaît pas la solution analytique. Pour finir nous présenterons des résultats de la variation des différents paramètres, comme la masse du particule, la largeur du potentiel, pour une barrière de potentiel.

# 1 Principe physique et méthodes de résolution

## 1.1 Equation de schrodinger

L'équation de Schrödinger tire son nom du physicien Erwin Schrödinger qui a créé cette équation en 1925 pour laquelle il a obtenu le prix Nobel de physique en 1933. L'équation de Schrödinger est une équation d'onde qui tient compte à la fois de l'énergie non relativiste et la quantification de celle-ci. L'équation de Schrödinger est une équation fondamentale de la physique quantique, elle décrit l'évolution dans l'espace et le temps d'une particule massive non relativiste. Pour notre projet nous nous intéresserons à l'équation de Schrödinger stationnaire[3], c'est-à-dire que l'équation sera indépendante du temps. Nous nous intéresserons qu'à une seule dimension l'équation dépendra donc que d'une seule direction ici  $x$ .

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

$$V(x) = \begin{cases} f(x) & \text{si } 0 < x < a \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

## 1.2 Unité système atomique

Pour résoudre l'équation de Schrödinger nous allons nous placer dans le système d'unités atomiques [6] et non pas dans le système internationale l'équivalence entre les deux systèmes est donné dans le tableau 1. Le système d'unités atomiques est mieux adapté car nous travaillons sur de la physique quantique. Les unités atomiques sont définies en posant la constante de Planck réduite  $\hbar$ , la masse de l'électron  $m_e$  et la constante de l'électrostatique  $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$  égale à 1.

Grandeur	Nom	Valeur SI
Masse	masse de l'électron	$9,109\,382\,6 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Longueur	rayon de Bohr	$5,291\,772\,109\,2 \times 10^{-11} \text{ m}$
Énergie	hartree	$4,359\,744\,17 \times 10^{-18} \text{ J}$

Table 1: Equivalence SI et unité atomique

## 1.3 Méthodes de résolution utilisées

En dehors du potentiel l'équation 1 devient :

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{-2mE}{\hbar^2} \psi(x) \quad (2)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2 \psi(x) \quad (3)$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

La solution générale de l'équation de Schrödinger est  $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ .

L'équation de Schrödinger admettra différentes solutions selon la région du potentiel dans laquelle elle se trouve. Pour  $x < 0$  l'équation sera de la forme de la solution générale, dans la région  $II$  on cherchera la solution numériquement. Enfin pour  $x > a$  la propagation dans le sens des  $x$  négatif est impossible donc la fonction d'onde sera de la forme  $\psi(x) = Ce^{ikx}$ .

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) &= \text{clacule numrique} \\ \psi_{III}(x) &= Ce^{ikx}\end{aligned}$$

Notre objectif est de trouver les coefficients de réflexion et de transmission, c'est à dire la probabilité pour qu'une particule passe à travers le potentiel :

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 \quad T = \left|\frac{C}{A}\right|^2 \quad R + T = 1 \quad (4)$$

### 1.3.1 Méthode 1

Pour la méthode 1 on fixe la constante C=1. On impose également la continuité des dérivées de la fonction d'onde en 0 et en a.

$$\begin{aligned}\psi'_I(0) &= \psi'_{II}(0) \\ \psi'_{II}(a) &= \psi'_{III}(a)\end{aligned}$$

En reprenant l'équation de Schrödinger du début 1 et en utilisant la formule de la dérivée seconde discrète<sup>1</sup>. On obtient une équation 5 qui permet de calculer successivement toutes les valeurs de la fonction d'onde dans la région II afin d'obtenir la valeur de  $\psi(0)$  et la valeur de  $\psi(pas)$ . En utilisant la formule de la dérivée discrète<sup>2</sup> et les valeurs de  $\psi$  on trouve la dérivée de la fonction d'onde en 0 ( $\psi'_{II}(0)$ ).

$$\psi(x - pas) = -\psi(x + pas) + \left(\frac{2mpas^2}{\hbar^2}(V(x) - E) + 2\right)\psi(x) \quad (5)$$

Avec la continuité des dérivées on obtient le système d'équation suivant qui permet de déterminer les valeurs des constantes A et B, et ainsi de déterminer les deux coefficients recherchés.

$$\begin{cases} A + B = \psi_{II}(0) \\ ikA + ikB = \psi'_{II}(0) \end{cases}$$

### 1.3.2 Méthode 2

Pour la méthode 2 on fixe la constante A=1. Puis on choisie une valeur de B aléatoire ( $B_i$ ) puis on utilise l'équation 5 pour calculer successivement les valeurs de la fonction d'onde dans la région II afin d'obtenir la valeur de  $\psi_{II}(a)$ . On trouve alors une valeur de C, on utilise de nouveau l'équation de résolution numérique de la fonction d'onde pour trouver la valeur de  $\psi_{II}(0)$ . On trouve donc une nouvelle valeur de B ( $B_f$ ), on cherche à se que la valeur de  $B_i$  soit identique à la valeur de  $B_f$  pour cela on utilise un algorithme de minimisation dans notre cas l'algorithme de descente de gradient. La minimisation permet donc de déterminer les valeurs de B et de C, et ainsi les coefficients de transmission et de réflexion.

### 1.3.3 Vérification fonctionnement

Afin de vérifier que le calcul des coefficients de transmission et de réflexion sont correct on utilise la solution analytique connue [1] de la barrière de potentiel simple.

---

<sup>1</sup>  $\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2}$   
<sup>2</sup>  $\frac{df(x)}{dx} = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$

$$E < V_0 \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(V_0 - E)} \quad T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sinh^2(\alpha a)}{4E(V_0 - E)}} \quad (6)$$

$$E = V_0 \quad T = \frac{1}{1 + \frac{V_0 a^2 \hbar^2}{2}} \quad (7)$$

$$E > V_0 \quad k = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar}(1 - \frac{E}{V_0})} \quad T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sin^2(k)}{4E(E - V_0)}} \quad (8)$$

Paramètres utilisés  $E = 1.2$ ,  $a = 1$ ,  $m = 1$ ,  $V_0 = 1$ ,  $N = 20000$

	Méthode 2	Analytique
Méthode 1	1.0917944672395e-05	2.70045e-05
Méthode 2		1.60866e-05

Table 2: Écarts entre les méthodes et solution analytique

## 2 Coefficients de réflexion et de transmission pour différent potentiel

Avant de présenter les résultats des coefficients de réflexions et de transmissions pour les différents potentiels, pour lesquels on n'affichera la fonction d'onde que d'une méthode et que d'une seule partie du nombre complexe qui compose celle-ci.

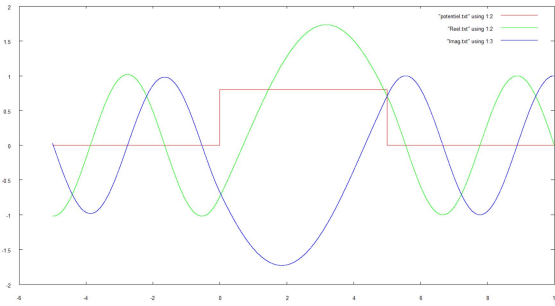


Figure 1: Fonction d'onde réel et imaginaire

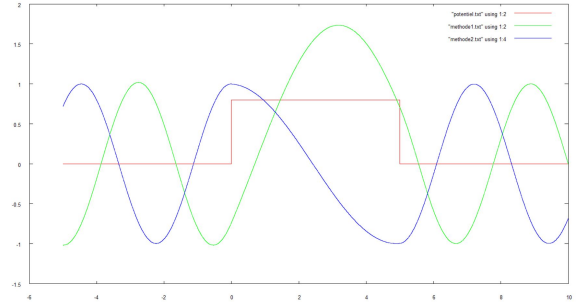


Figure 2: Fonction d'onde réel méthode 1 et 2

### 2.1 Barrière de potentiel simple

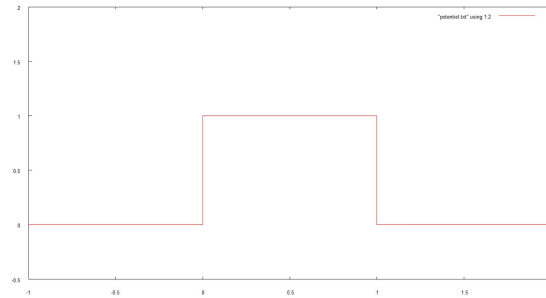


Figure 3: Barrière de potentiel simple

Paramètres utilisés  $a = 1$ ,  $m = 1$ ,  $V_0 = 1$ ,  $N = 20000$

Énergie	Coefficient de réflexion	Coefficient de transmission
0.4	0.647581894537856	0.352418105437349
1	0.333366666342742	0.666633334211924
1.4	0.213549773737718	0.786450227124058

Table 3: Coefficients de réflexion et transmission

### 2.2 2 Barrières de potentiels simples

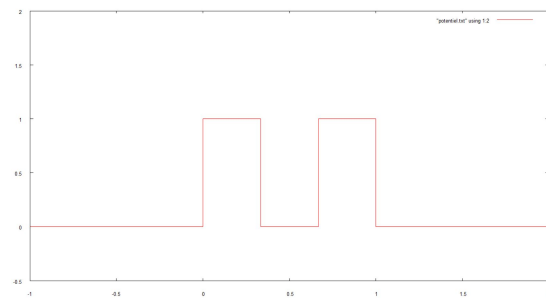


Figure 4: 2 Barrières de potentiels simples

Paramètres utilisés  $a = 1$ ,  $m = 1$ ,  $V_0 = 1$ ,  $N = 20000$

Énergie	Coefficient de réflexion	Coefficient de transmission
0.4	0.398212701243355	0.601787299006828
1	0.181835356681359	0.818164643869745
1.4	0.123418941002287	0.876581059844542

Table 4: Coefficients de réflexion et transmission

### 2.3 3 Barrières de potentiels simples

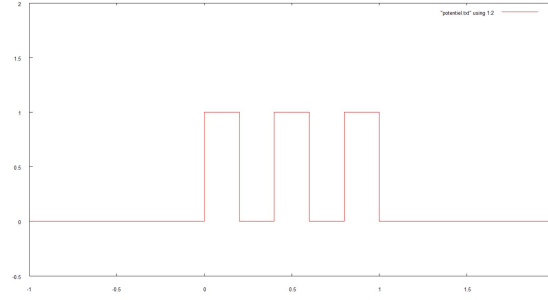


Figure 5: 3 Barrières de potentiels simples

Paramètres utilisés  $a = 1$ ,  $m = 1$ ,  $V_0 = 1$ ,  $N = 20000$

Énergie	Coefficient de réflexion	Coefficient de transmission
0.4	0.324948897997792	0.675051102149639
1	0.0951860743657358	0.904813926378733
1.4	0.0456158378203416	0.954384163344269

Table 5: Coefficients de réflexion et transmission

### 2.4 Barrière de potentiel gaussienne

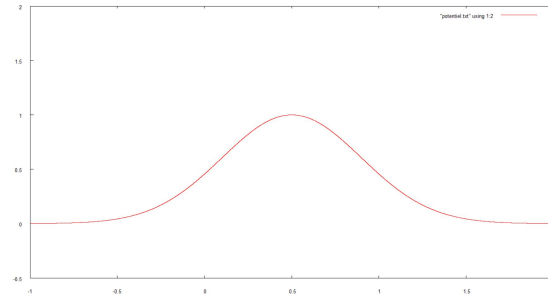


Figure 6: Barrière de potentiel gaussienne

Paramètres utilisés  $a = 1$ ,  $m = 1$ ,  $V_0 = 1$ ,  $N = 20000$

Énergie	Coefficient de réflexion	Coefficient de transmission
0.4	0.0129595728676758	0.987040427735775
1	0.00462550868263464	0.995374492199424
1.4	0.0030585389705029	0.996941462224125

Table 6: Coefficients de réflexion et transmission



## 2.5 Barrière de potentiel triangle

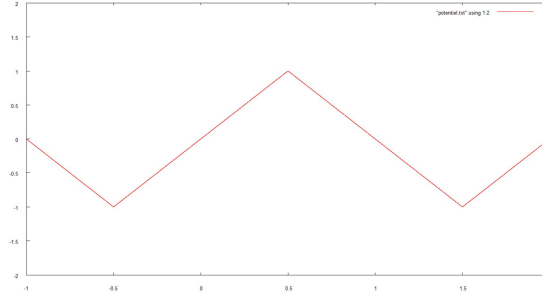


Figure 7: Barrière de potentiel triangle

Paramètres utilisés  $a = 1$ ,  $m = 1$ ,  $V_0 = 1$ ,  $N = 20000$

Énergie	Coefficient de réflexion	Coefficient de transmission
0.4	0.25435128942599	0.745648710947624
1	0.0947920470348868	0.905207953604588
1.4	0.0588079770743296	0.941192024180452

Table 7: Coefficients de réflexion et transmission

Maintenant que nous avons déterminé les coefficients de transmissions et de réflexions pour les énergie de 0.4 ,1 ,1.4 Hartree.On peut voir que même avec des énergies inférieurs aux potentiels la transmission est non nul. On observe aussi que avec des énergies plus grandes que le potentiel la réflexion devient petite. Nous allons pour la suite nous intéresser à la variation des différents paramètres sur le coefficient de transmission.

### 3 Variation des paramètres

Nous avons plusieurs paramètres à notre disposition pour définir la particule qui traversera le potentiel. Son état d'énergie initial et sa masse caractérise la particule. Nous pouvons choisir le type de potentiel pour simuler différents processus physiques comme la désintégration Alpha que nous allons développer plus en dessous.

#### 3.1 Variation de l'énergie

##### 3.1.1 Particule Alpha

La radioactivité alpha est le rayonnement généré lors d'une *désintégration alpha*, où un noyau atomique  $X$  éjecte une particule  $\alpha$  composée de deux neutrons et de deux protons. Celle-ci se produit dans les atomes lourds tel que l'uranium 238, qui se transforme en thorium 234[7]. Dans le cadre de notre programme nous pouvons simuler la désintégration  $\alpha$ . Nous précisons le type de potentiel de type **Désintégration Alpha** pour générer la barrière de d'énergie qui retiendrait la particule par interaction nucléaire forte. Nous choisissons ensuite la largeur du potentiel comme  $0.53 \text{ \AA}$ , le rayon de Bohr comme la distance sur lequel l'effet tunnel va se réaliser. L'énergie au repos d'une particule  $\alpha$  est de  $3727.37 \text{ eV}$  d'après le NIST[4]. En Système d'unités atomiques celle-ci est de  $137.8119 \text{ Hartree}$ , qui nous convient comme entrée. Quand à la masse, nous entrons  $4.00151 \text{ u}$ [2]. Nous obtenons la courbe suivante pour la partie réelle de la fonction d'onde  $\Psi$ .

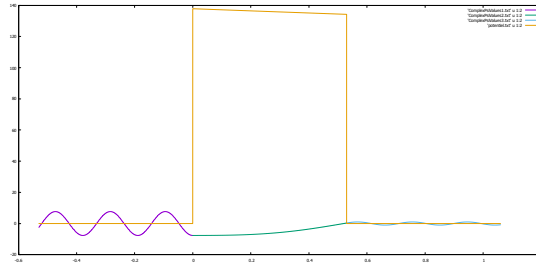


Figure 8: Résolution Numérique de l'équation de Schrödinger pour une désintégration alpha

En violet nous avons la courbe de l'onde en amont du potentiel et en bleu en aval de celle-ci. Nous observons le passage de la fonction d'onde à travers la barrière en vert. Le coefficient de transmission pour cette application est calculé à  $T = 0.0632$ , d'où sur un grand nombre de phénomènes de fission des particules traversent la barrière et sont émises. Le coefficient de réflexion quand elle est de  $R = 0.9367$ .

Regardons à présent la courbe de Transmission en fonction de l'énergie du particule.

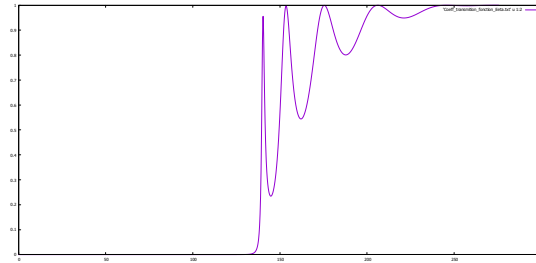


Figure 9: Coefficient de Transmission en fonction de l'énergie du particule alpha

Nous pouvons voir sur la fig.9, plusieurs valeurs d'énergie pour lesquelles le coefficient de transmission est égal à 1 ou proche de 1. Pour observer ce qui se passe au niveau du premier pic, admettons les paramètres suivants:

Nous observons une particule en résonance avec le potentiel sur la figure 10.

Paramètres utilisés  $a = 0.53$ ,  $m = 4.00151$ ,  $V_0 = 140.56$ ,  $N = 10000$

Énergie	Coefficient de réflexion	Coefficient de transmission
143.286	0.0787656025993423	0.921234397400658

Table 8: Coefficients de réflexion et transmission

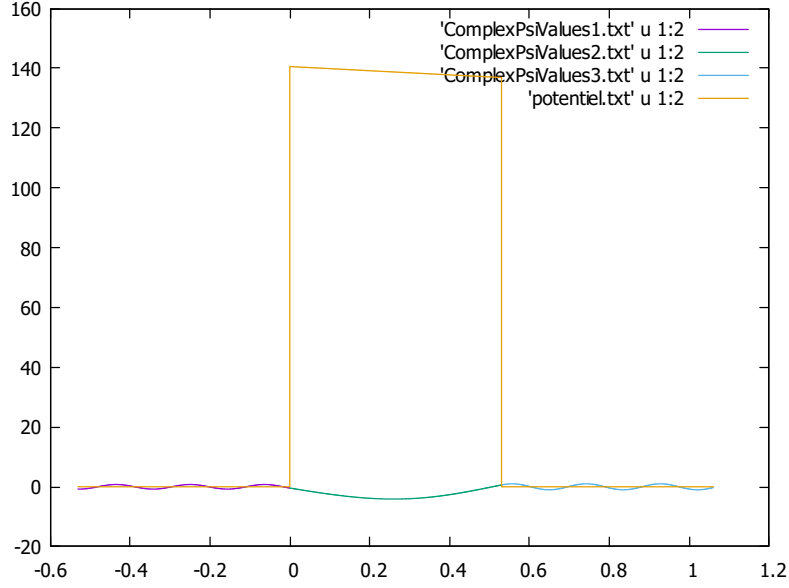


Figure 10: Capture du particule

### 3.1.2 Effet tunnel résonant

L'effet tunnel est la capacité d'une particule quantique d'énergie inférieure à un seuil de franchir ce seuil. L'effet tunnel résonant[5] quand elle apparaît lorsqu'une particule quantique aborde un tel système avec une énergie proche ou égale à celle du seuil. La probabilité de passage à travers les barrières est faible, mais la résonance avec le niveau des puits va piéger la particule, pendant une durée assez longue, à l'intérieur du puits. Le coefficient de transmission de la particule est proche ou égale à l'unité dans ces instances. C'est pour cela que nous chercherons les résonances en observant la courbe de transmittivité en fonction de l'énergie lors de nos applications.

### 3.1.3 Capture de particule à travers une série de puits de potentiel

Paramètres utilisés  $a = 5$ ,  $m = 1$ ,  $V_0 = 1$ ,  $N = 20000$

Énergie	Coefficient de réflexion	Coefficient de transmission
0.47571	0.0202525776575487	0.979747422342451

Table 9: Coefficients de réflexion et transmission pour un potentiel à 2 barrières

Paramètres utilisés  $a = 5$ ,  $m = 1$ ,  $V_0 = 1$ ,  $N = 20000$

Énergie	Coefficient de réflexion 2	Coefficient de transmission
0.606	0.0391264387378277	0.960873561262172

Table 10: Coefficients de réflexion et transmission pour un potentiel à 3 barrières

Nous nous sommes positionné à la valeur de l'énergie de résonance, pour une série de puits de potentiel.

Pour la fig. 11, nous remarquons que les parties réelle et imaginaire de la fonction d'onde sont maximales et plus grandes que le potentiel. La particule est bien capturée dans le puits délimité par les deux barrières.

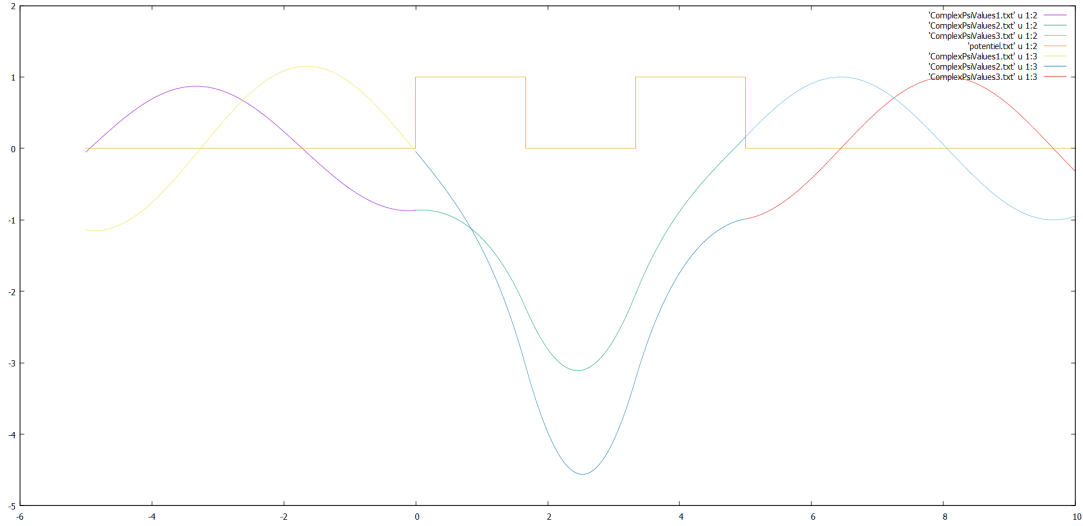


Figure 11: Capture du particule par 2 barrières de potentiel

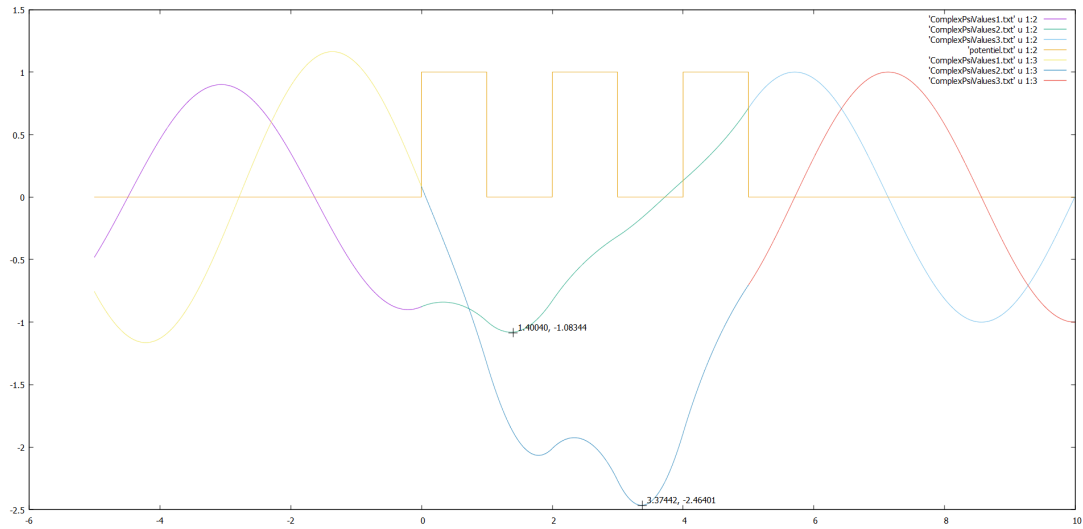


Figure 12: Capture du particule par 3 barrières de potentiel

Pour la fig. 12, nous remarquons que la partie réel de la fonction d'onde est maximal est a l'unité au milieu du premier puits et que la partie imaginaire est maximal et plus grand que l'unité au niveau du second puits. En tenant en compte que le carré du fonction d'onde nous donne la densité de probabilité de présence du particule, nous pouvons en conclure que la particule est piégé au niveau du premier puits pour la plupart des réalisations de cette expérience.

### 3.2 Variation de la taille du potentiel

La variation du coefficient de transmission en fonction de la longueur du potentiel pour des énergies inférieurs à  $V_0$ . Pour une barrière de potentiel simple le coefficient de transmission sera décrit par la formule analytique 6. Si la condition  $aa \gg 1$  est vérifié le  $\sinh(aa)$  va tendre vers  $\frac{\exp(aa)}{2}$ . Le coefficient de transmission va donc décroître exponentiellement.

$$T = \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2} e^{-2aa}$$

paramètres utilisés  $E = 0.1$ ,  $m = 1$ ,  $V_0 = 1$

Cette propriété de décroissance du coefficient de transmission est exploité par le microscope à effet tunnel. Le principe du STM (scanningtunneling microscope) est d'approcher une pointe de la surface que l'on veut cartographier, la distance entre la pointe et la surface peut être assimiler à une barrière de potentiel. Lorsque l'on est suffisamment proche on détecte un courant qui est transmit par effet tunnel. Le courant va suivre

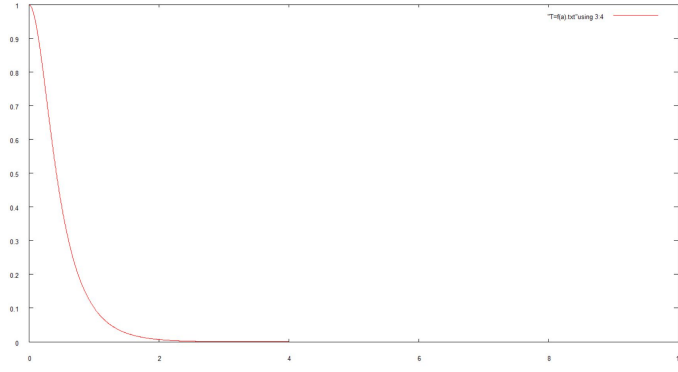


Figure 13: Coefficient de transmission en fonction de  $x$

la même décroissance que le coefficient de transmission se qui permet d'avoir des résolutions de la surface inférieur à la taille d'un atome.

### 3.3 Variation de la masse

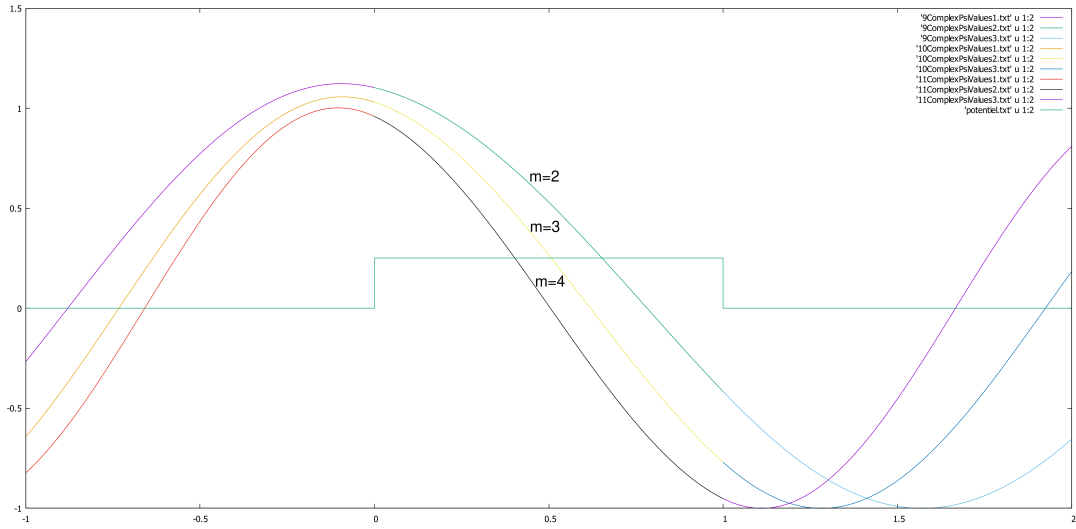


Figure 14: Partie réel de  $\Psi(x)$  avec  $m$  comme paramètre fluctuant

Paramètres utilisés  $E = 1$ ,  $a = 1$ ,  $V_0 = 0.25$ ,  $N = 20000$

masse	Coefficient de réflexion	Coefficient de transmission
2	0.0198908911855625	0.9801091104902894
3	0.014900596680466	0.985099405784575
4	0.00840550290054031	0.991594500394001

Table 11: Coefficients de réflexion et transmission

## Conclusion

Pour conclure, nous avons modélisé plusieurs types de barrières de potentiels et réalisé le calcul numérique de la fonction d'onde et ainsi trouver les coefficients de réflexion et de transmission pour différentes énergies et masses. Par l'usage de l'interface graphique GNUplot, nous avons réalisé les courbes de  $\text{Re}(\Psi(x))$  et observé la capture de particule avec le phénomène de résonance. Il nous a été possible de montrer que à certaine énergie il est possible d'obtenir la transparence du potentiel pour avoir un coefficient de transmission égale à 1. La visualisation de l'effet tunnel permet aussi de comprendre le fonctionnement du microscope à effet tunnel. Enfin pour ce qui pourrait être intéressant pour d'autre développement du programme, la résolution de l'équation de Schrödinger à plusieurs dimensions.

## References

- [1] Charles Antoine. *Introduction A la physique quantique-2e éd: Cours, 50 exercices corrigés*. Dunod, 2022.
- [2] NIST. alpha particle mass in u, 2018.
- [3] Christophe Texier. *Mécanique quantique-2e édition: Cours et exercices corrigés*. Dunod, 2015.
- [4] Wikipedia contributors. National institute of standards and technology — Wikipedia, the free encyclopedia, 2023. [Online; accessed 16-April-2023].
- [5] Wikipédia. Effet tunnel résonnant — wikipédia, l’encyclopédie libre, 2021. [En ligne; Page disponible le 26-avril-2021].
- [6] Wikipédia. Système d’unités atomiques — wikipédia, l’encyclopédie libre, 2022. [En ligne; Page disponible le 1-mai-2022].
- [7] Wikipédia. Radioactivité — wikipédia, l’encyclopédie libre, 2023. [En ligne; Page disponible le 2-janvier-2023].