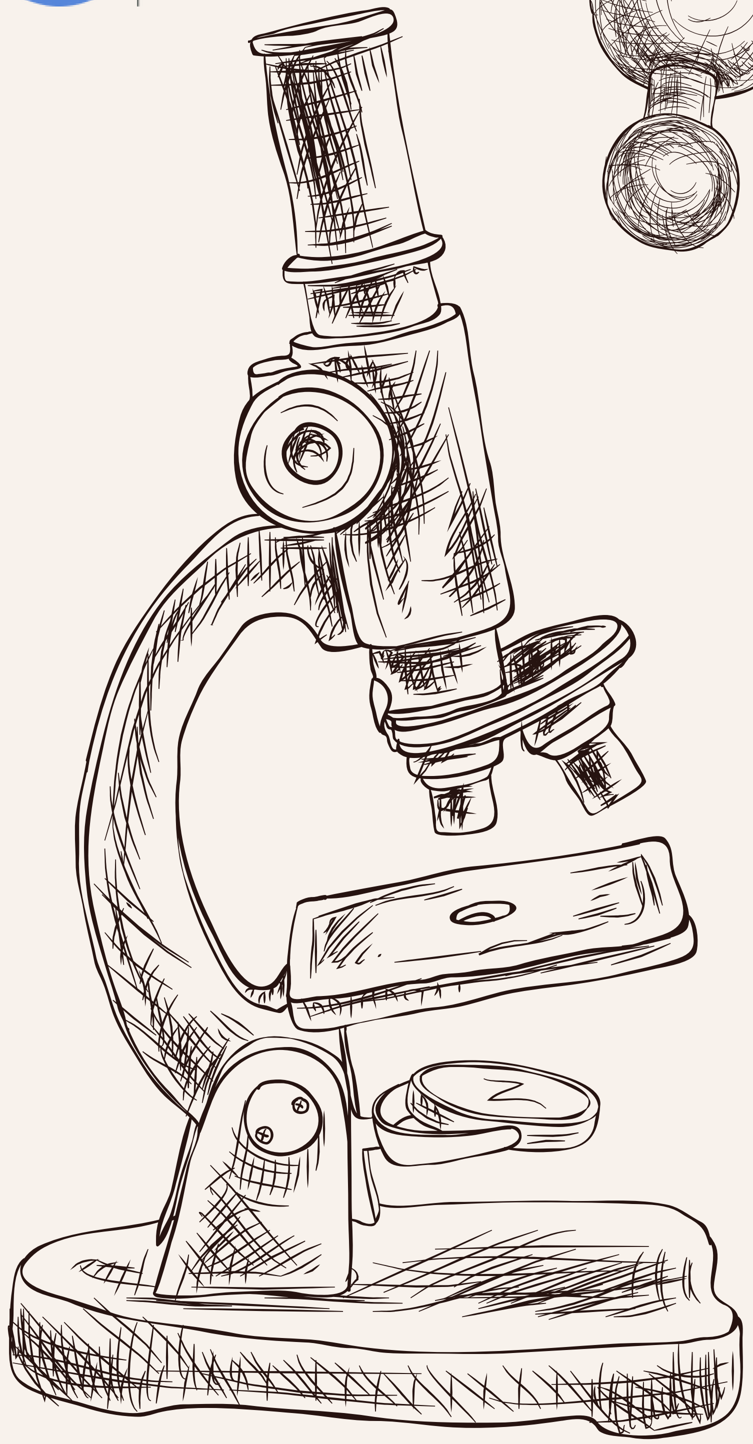
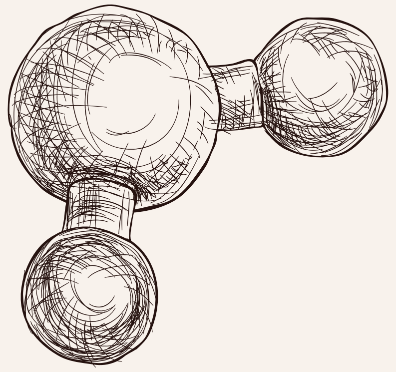
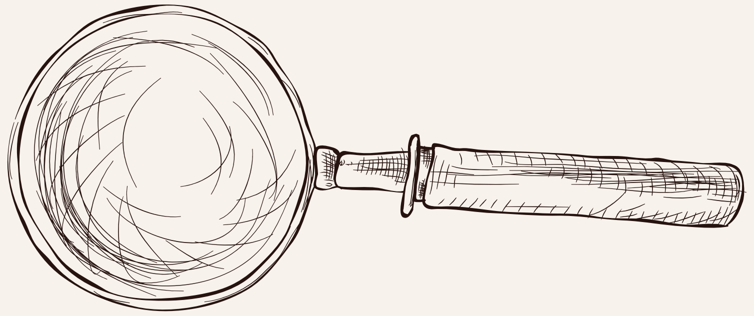
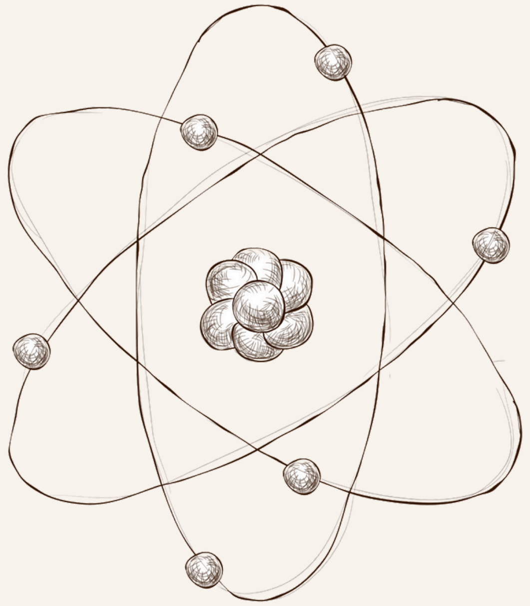


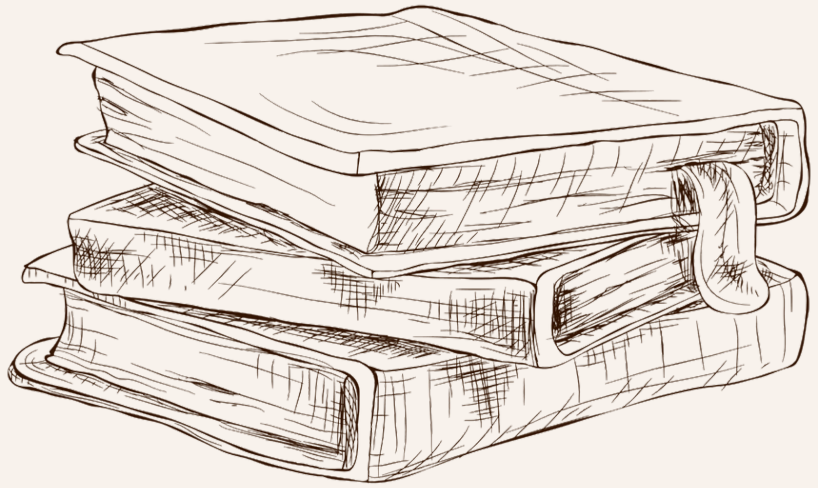






EFFET RAMSAUER TOWNSEND

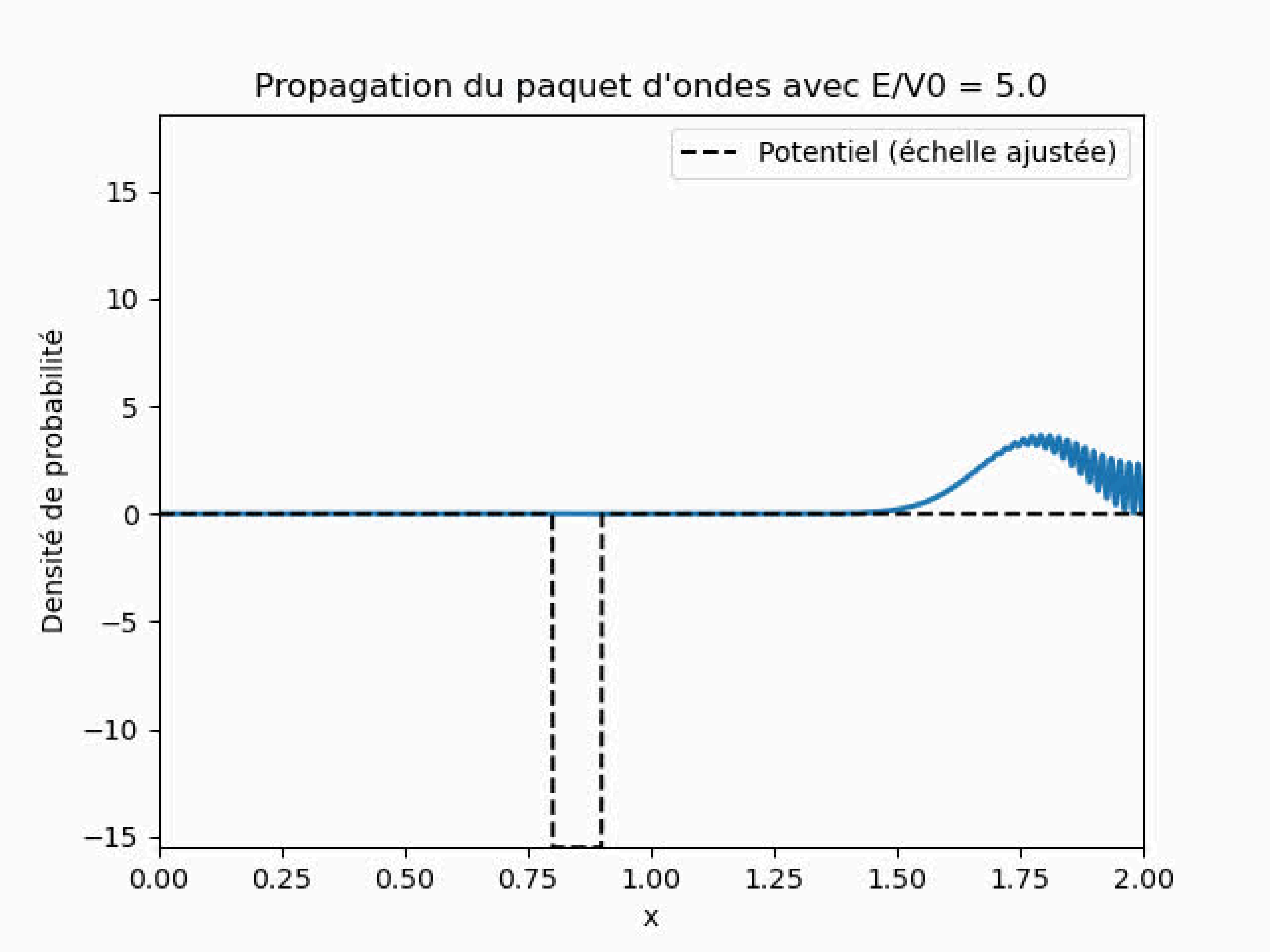
RAKOTORINA RINDRA
ROCHA BRUNO
BOUDRIA ILANN



Projet Numérique

AKRIDAS Panayotis

Notre représentation



Le Code

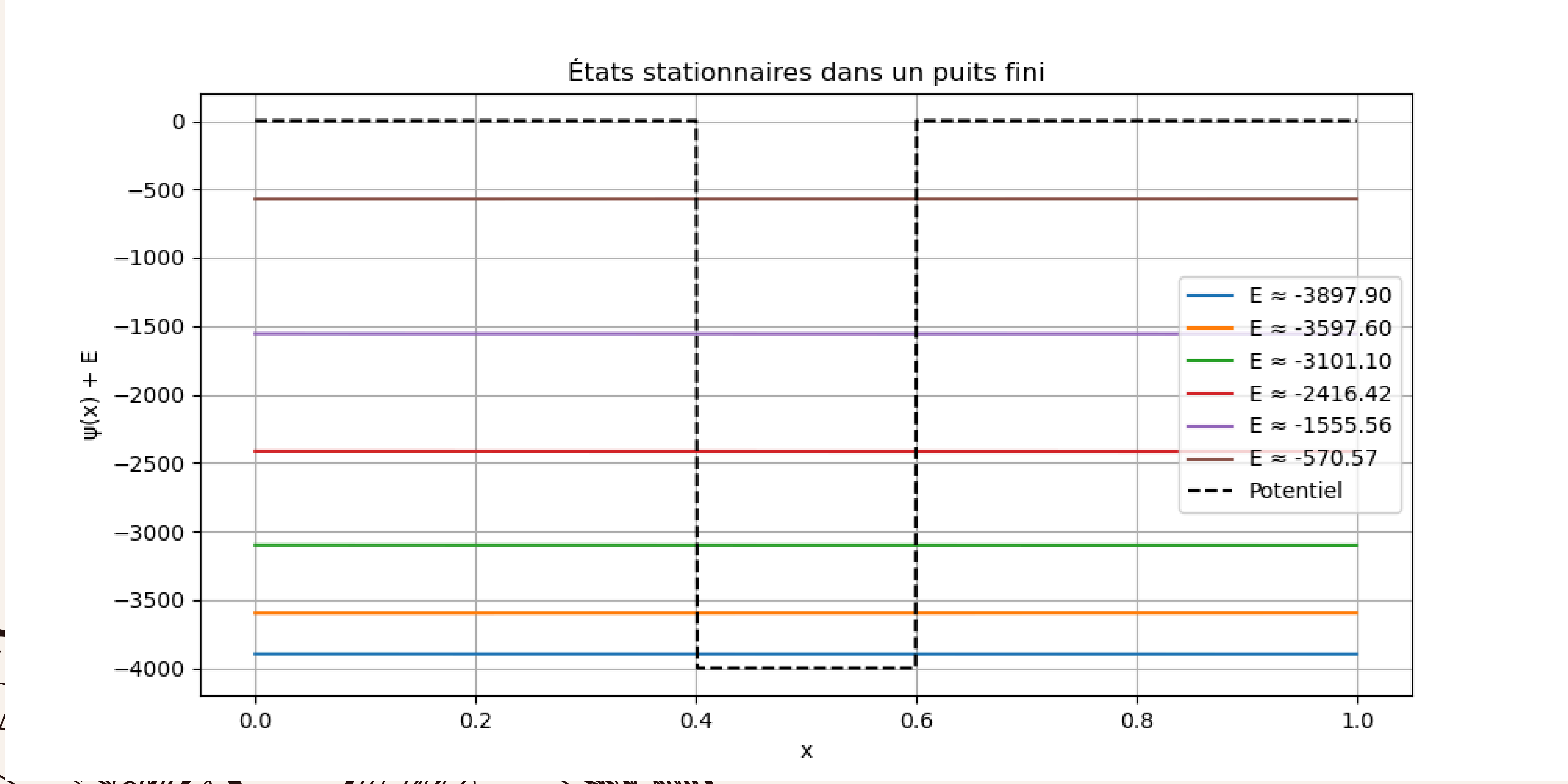
```python
# ----- INPUT UTILISATEUR -----
e = float(input("Entrez la valeur de E/V0 (ex: 5) : "))
v0 = -4000
E = e * v0
k = math.sqrt(2 * abs(E))
# ----- CONDITION INITIALE : PAQUET D'ONDE -----
```

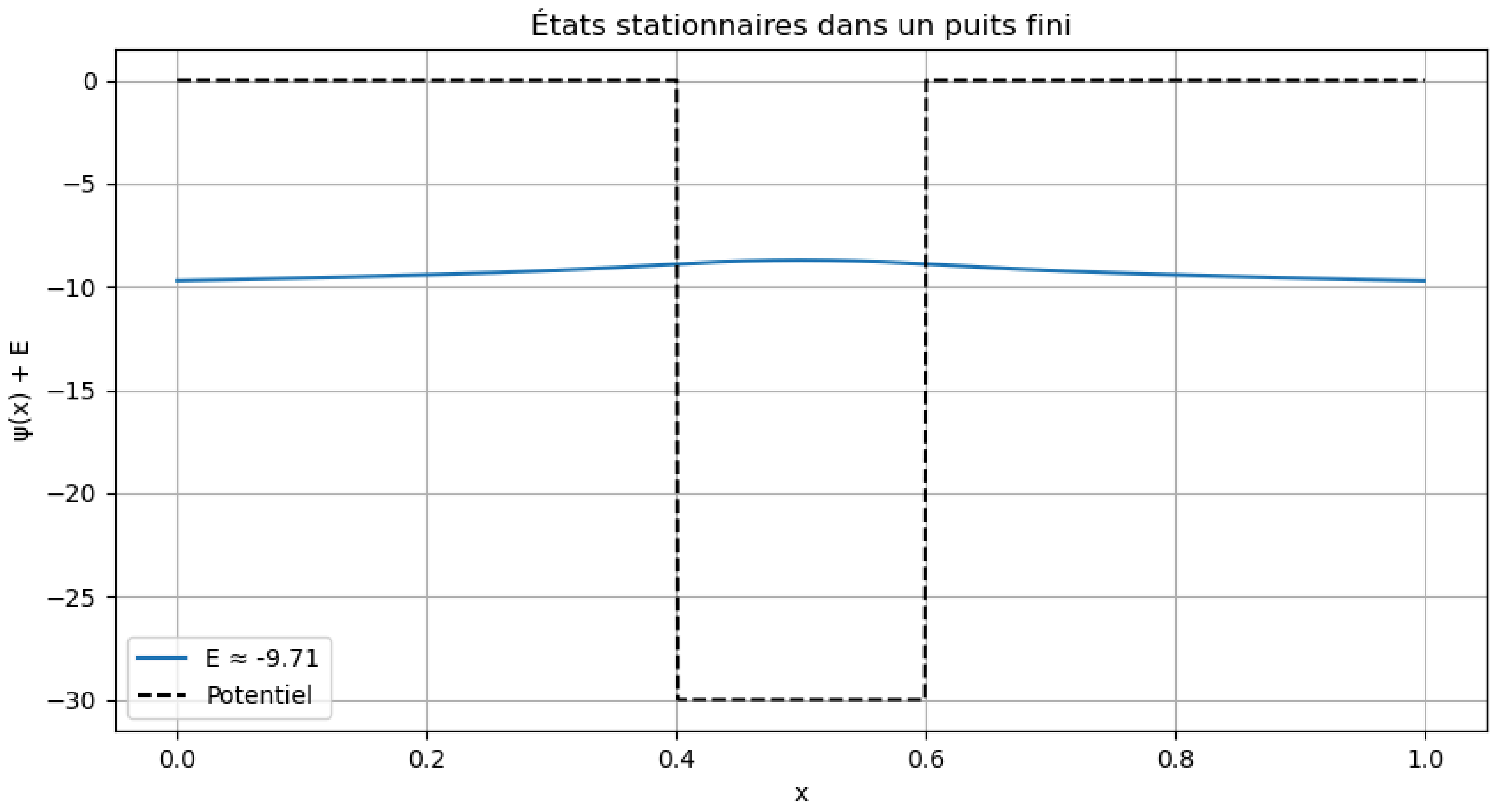
```python
o = np.linspace(0, (nx - 1) * dx, nx)
V = np.zeros(nx)
V[(o >= 0.8) & (o <= 0.9)] = v0  # Puits de potentiel
```

```python
# Mise à l'échelle du potentiel pour le superposer à la densité
V_plot = (V / abs(v0)) * np.max(densite)  # Échelle du puits visible

plt.plot(o, V_plot, label="Potentiel (échelle ajustée)", color="black", linestyle="--")
```

Les Etats stationnaires

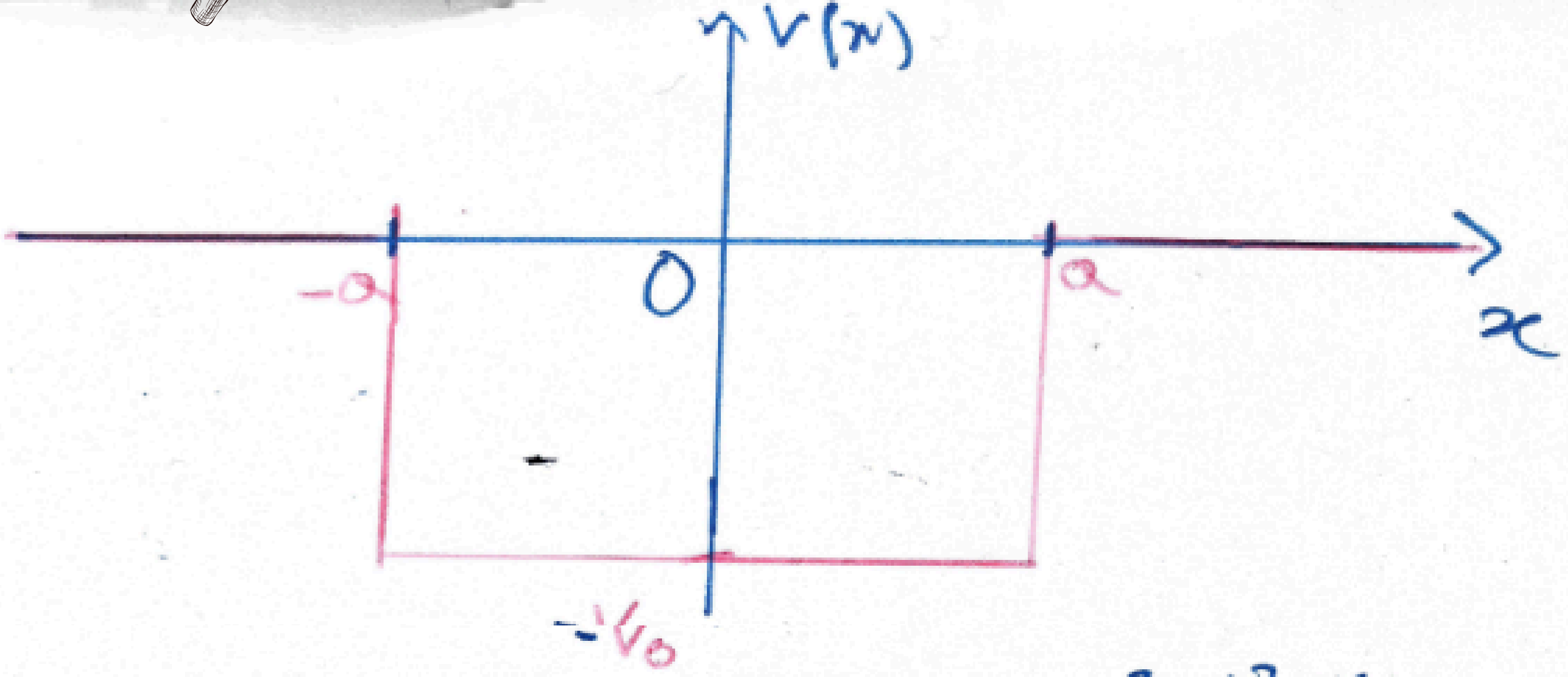



États stationnaires dans un puits fini
ψ(x) + E
x
E ≈ -9.71
Potentiel
0
−5
−10
−15
−20
−25
−30
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0

Le Code

```python
def solve_schrodinger(E):
    psi = np.zeros(nx)
    psi[1] = 1e-5  # Condition initiale faible pente
    for i in range(1, nx - 1):
        psi[i+1] = 2*psi[i] - psi[i-1] - 2*dx**2 * (E - V[i]) * psi[i]
    return psi
```

Résolution analytique



$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & : x \in]-a, a[\\ 0 & : x \in]-\infty, a[\cup]a, +\infty \end{cases}$$

équation de schrödinger : $\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$

Pour $x < -a$: $V(x) = 0$:

$$\Leftrightarrow \frac{-\hbar^2}{2m} d^2 \frac{\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Leftrightarrow -\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2Em}{\hbar^2} \cdot \psi(x)$$

$$\Leftrightarrow \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \psi(x) + \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = 0 \quad \text{On pose } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\Leftrightarrow k^2\psi(x) + \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = 0$$

Solution générale : $\boxed{\psi_1(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}}$

Pour $x \in]-a, a[$ $\quad V(x) = -V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - V_0\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\iff -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) + V_0\psi(x) \iff -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \psi(x)(E+V_0)$$

$$\iff -\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \psi(x)\frac{(E+V_0)2m}{\hbar^2}$$ On pose $k'^2 = \frac{(E+V_0)2m}{\hbar^2}$

$$\iff k'^2\psi(x) + \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = 0$$

Solution générale : $\boxed{\psi_2(x) = C\cos(k'x) + D\sin(k'x)}$

Pour $x > a$ $\quad V(x) = 0$, $\psi_3(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

Mais $B=0$ car il n'y a pas d'onde réfléchie venant de $+\infty$ vers $-a$

et $A=T$, le coefficient de transmission.

Donc $\boxed{\psi_3(x) = Te^{ikx}}$.

On a $\begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \psi_2(x) = C\cos(k'x) + D\sin(k'x) \\ \psi_3(x) = Te^{ikx} \end{cases}$

Si $\psi(x)$ est continue alors $\psi_1(-a) = \psi_2(-a)$ et $\psi_2(a) = \psi_3(a)$

$\cancel{\psi_1(x) =}$ $\psi_1'(-a) = \psi_2'(-a)$, $\psi_2'(a) = \psi_3'(a)$.

$$\psi_1'(-a) = ik(Ae^{-ka} - Be^{ika})$$

$$\psi_2(-a) = C\cos(-k'a) + D\sin(-k'a) = C\cos(k'a) - D\sin(k'a)$$

$$\psi_2'(-a) = Ck\sin(k'a) + Dk'\cos(k'a)$$

$$\psi_3'(x) = Tik\,e^{ikx}$$

(On pose A=1)

On a donc le système suivant :

$$\begin{cases} (1)\quad e^{-ika} + Be^{+ika} = C\cos(k'a) - D\sin(k'a) \\ (2)\quad ikAe^{-ika} - ikBe^{ika} = k'C\sin(k'a) + k'D\cos(k'a) \\ (3)\quad C\cos(k'a) + D\sin(k'a) = Te^{ika} \\ (4)\quad -k'C\sin(k'a) + k'D\cos(k'a) = ikTe^{ika} \end{cases}$$

On pose $\alpha = \cos(k'a)$ $\beta = \sin(k'a)$
$\Gamma = Te^{ika}$

$$(3) \text{ et } (4) \iff -\frac{k'\beta F - D\beta'}{\alpha} + k' D\alpha = ikF$$

$$\iff D = \frac{\left(ikF + \frac{Fk'\beta}{\alpha}\right)}{\frac{k'\beta^2}{\alpha} + k'\alpha} = \frac{F(\alpha ik + k'\beta)}{k'(\beta^2 + \alpha^2)}$$

or $\beta^2 + \alpha^2 = \sin^2(k'a) + \cos^2(k'a) = 1$

$$D = Te^{ika} \cdot \frac{ik\cos(k'a) + k'\sin(k'a)}{k'}$$

Avec (1) et (2),

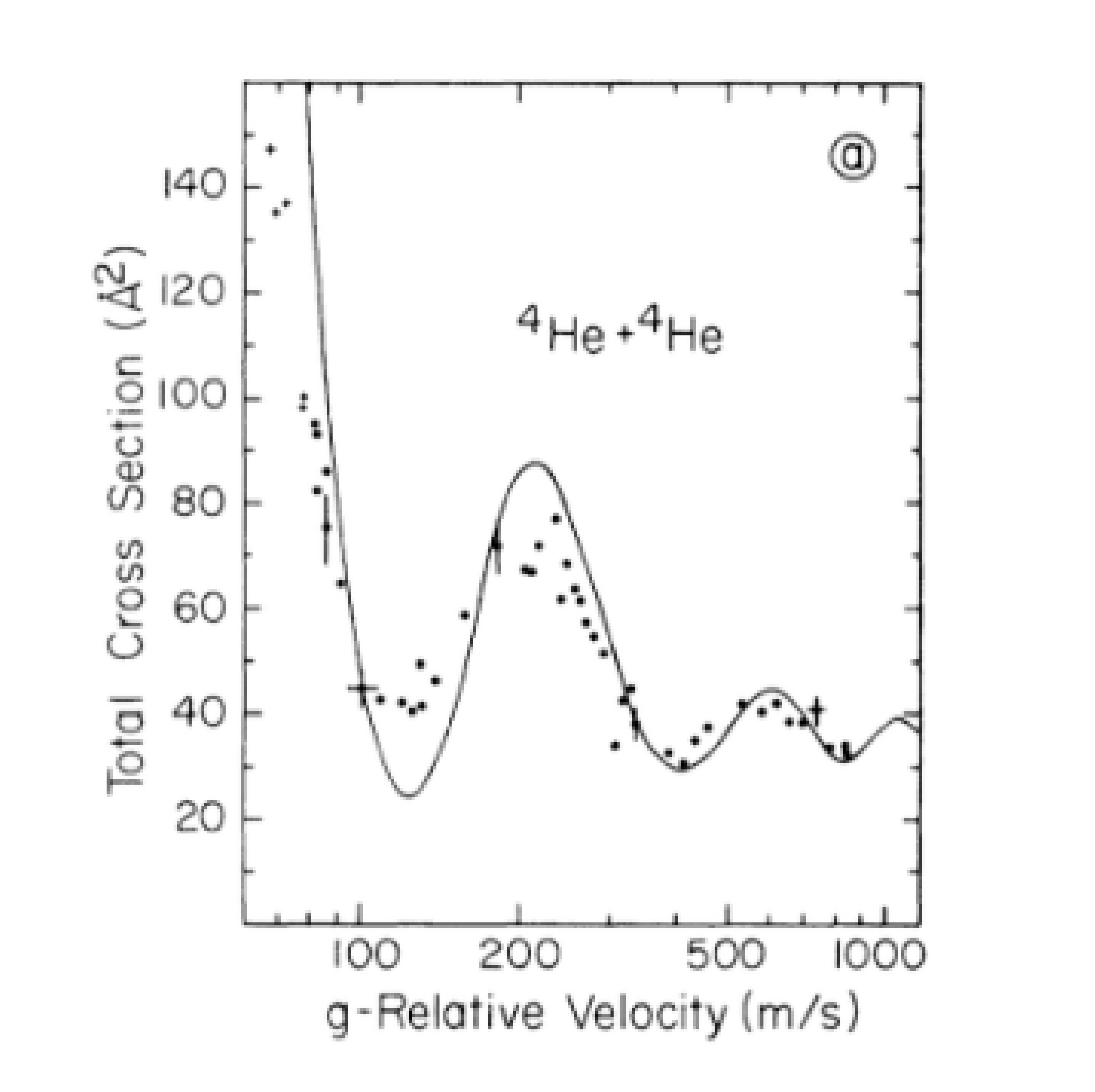
$$|T|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{V_0^2 \sin^2(2k'a)}{4E(E+V_0)}\right)} \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad k' = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$$

On trouve donc $|T|^2(E) = \dfrac{1}{1 + \left(\frac{V_0^2}{4E(E+V_0)} \cdot \sin\left(2a\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}\right)\right)}$

$$|T|^2 = 1 \iff \sin\left(2a\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}\right) = 0$$

$$\iff E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2 - V_0$$

Prédictions et Mesures



Particule décrite par un paquet d'ondes

Paquet d'onde incident à $t=0$: paquet d'onde gaussien centré sur x_c, de largeur σ, E_0 l'énergie moyenne et k_0 le nombre d'onde central

$$\Psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}}\exp\left[ik_0x-\frac{(x-x_c)^2}{4\sigma^2}\right]$$

Il peut être exprimé comme une superposition d'ondes planes :

$$\Psi(x,0)=\int_{-\infty}^{+\infty}A(k)e^{ikx}\,dk,\quad A(k)=\left(\frac{2\sigma^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\sigma^2(k-k_0)^2}e^{-ikx_c}$$

Equation de Schrödinger : $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi_k(x)=E\psi_k(x)$

avec $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$

$$\frac{\quad}{2m}$$

On pose $q = \sqrt{k^2 + \frac{2mV_0}{\hbar^2}}$

On a des solutions de la forme

Pour $x < -a$:

$$\psi_1 = e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}$$

Pour $x \in [-a, a]$: $\psi_2(x) = A\cos(qx) + B\sin(qx)$

Pour $x > a$: $\psi_3(x) = T(k)e^{ikx}$

Si ψ est continue : à $x = -a$

ψ : $\quad 1 + R = A\cos(qa) - B\sin(qa)$

ψ' : $\quad ik(1 - R) = Aq\sin(qa) + Bq\cos(qa)$

ō $x = a$:

ψ : $A\cos(qa) + B\sin(qa) = T$

ψ' : $-Aq\sin(qa) + Bq\cos(qa) = ihT$

a partir de ces 4 équations on obtient :

$$T(h) = \frac{4ihq\cos(qa)}{4ihq\cos(qa) - 2i(h^2 - q^2)\sin(qa)}$$

$$R(h) = \frac{-2i(h^2 - q^2)\sin(qa)}{4ihq\cos(qa) - 2i(h^2 - q^2)\sin(qa)}$$

$$\Longleftrightarrow |T(h)|^2 = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sin^2(2qa)}{4E(E+V_0)}} \quad \text{avec } E = \frac{\hbar^2 h^2}{2m}$$

$$\text{et } qa = a\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$$

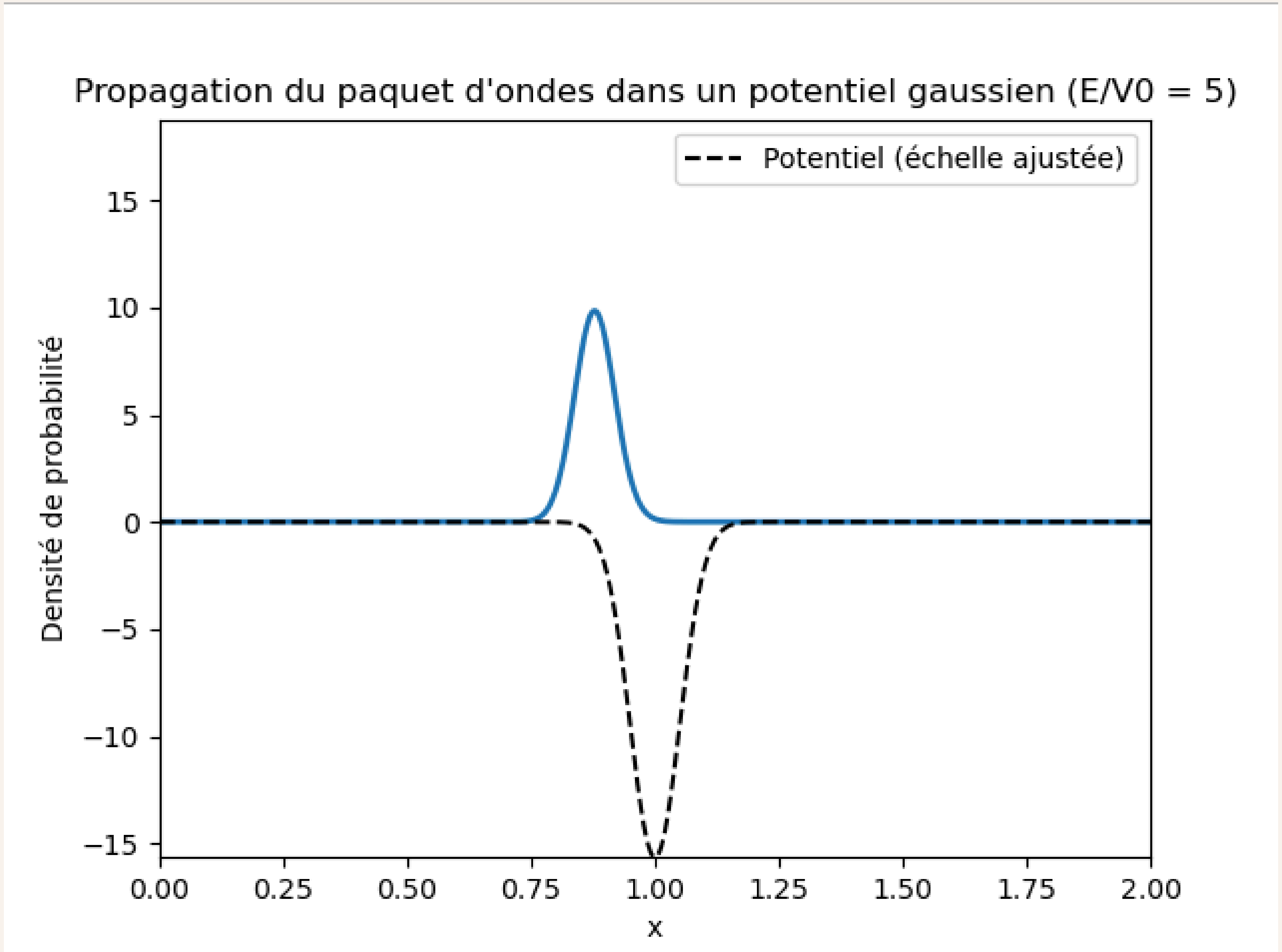
et P, la probabilité de transmission :

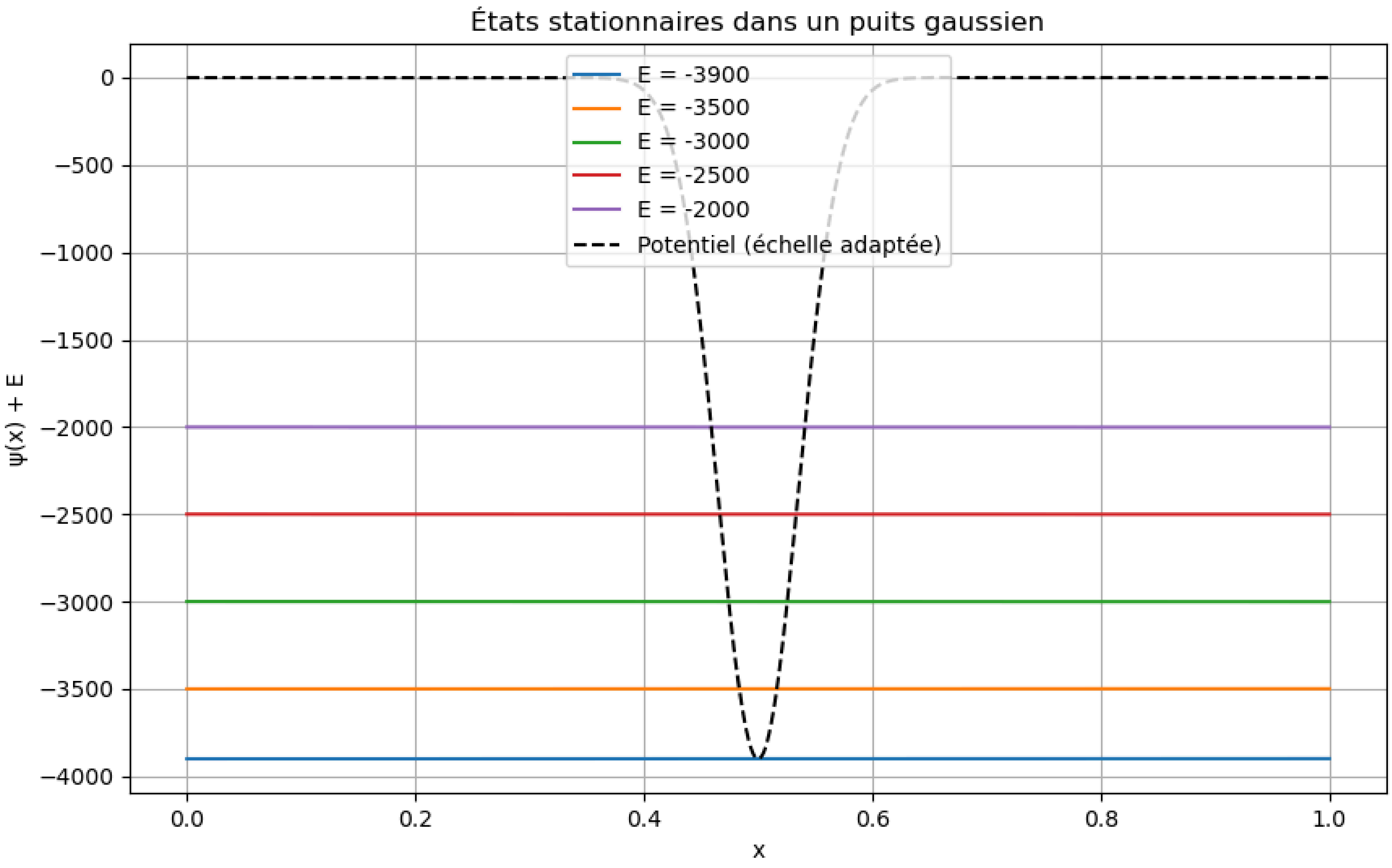
$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} |A(k)|^2 |T(k)|^2 \, dk$$

$|T|^2 = 1 \iff \sin(qa) = 0 \implies qa = n\pi \,, n \in \mathbb{N}$

les énergies de résonances : $E_{res} = \dfrac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_0 a^2} - V_0$

Potentiel Gaussien


Propagation du paquet d'ondes dans un potentiel gaussien (E/V0 = 5)
Potentiel (échelle ajustée)
15
10
5
0
−5
−10
−15
Densité de probabilité
0.00
0.25
0.50
0.75
1.00
1.25
1.50
1.75
2.00
x



États stationnaires dans un puits gaussien
E = -3900
E = -3500
E = -3000
E = -2500
E = -2000
Potentiel (échelle adaptée)
0
−500
−1000
−1500
−2000
−2500
−3000
−3500
−4000
ψ(x) + E
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
x

Le Code

```python
V = np.zeros(nx)
V[(o >= 0.8) & (o <= 0.9)] = -V0
```

```python
# ----- PUITS DE POTENTIEL GAUSSIEN -----
x0 = 0.85           # centre du puits
sigma_V = 0.02      # largeur du puits
V = -V0 * np.exp(-((o - x0)**2) / (2 * sigma_V**2))
```

Bibliographie

- https://youtu.be/490xswHhFSk