Projet de physique 4

Puits Coulombien et théorème de Bloch

PHYS2026-2

12/03/2025

Sections

Plan

Potentiel

La courbe du potentiel d'un puits Coulombien a pour équation :

$$V(x) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{-Qe}{\sqrt{(x - x_0)^2 + a^2}},$$

où Q est la charge des noyaux, e la charge élémentaire, ϵ_0 la permittivité diélectrique du vide, x_0 le centre du puits et a la constante d'adoucissement.

Image d'un potentiel

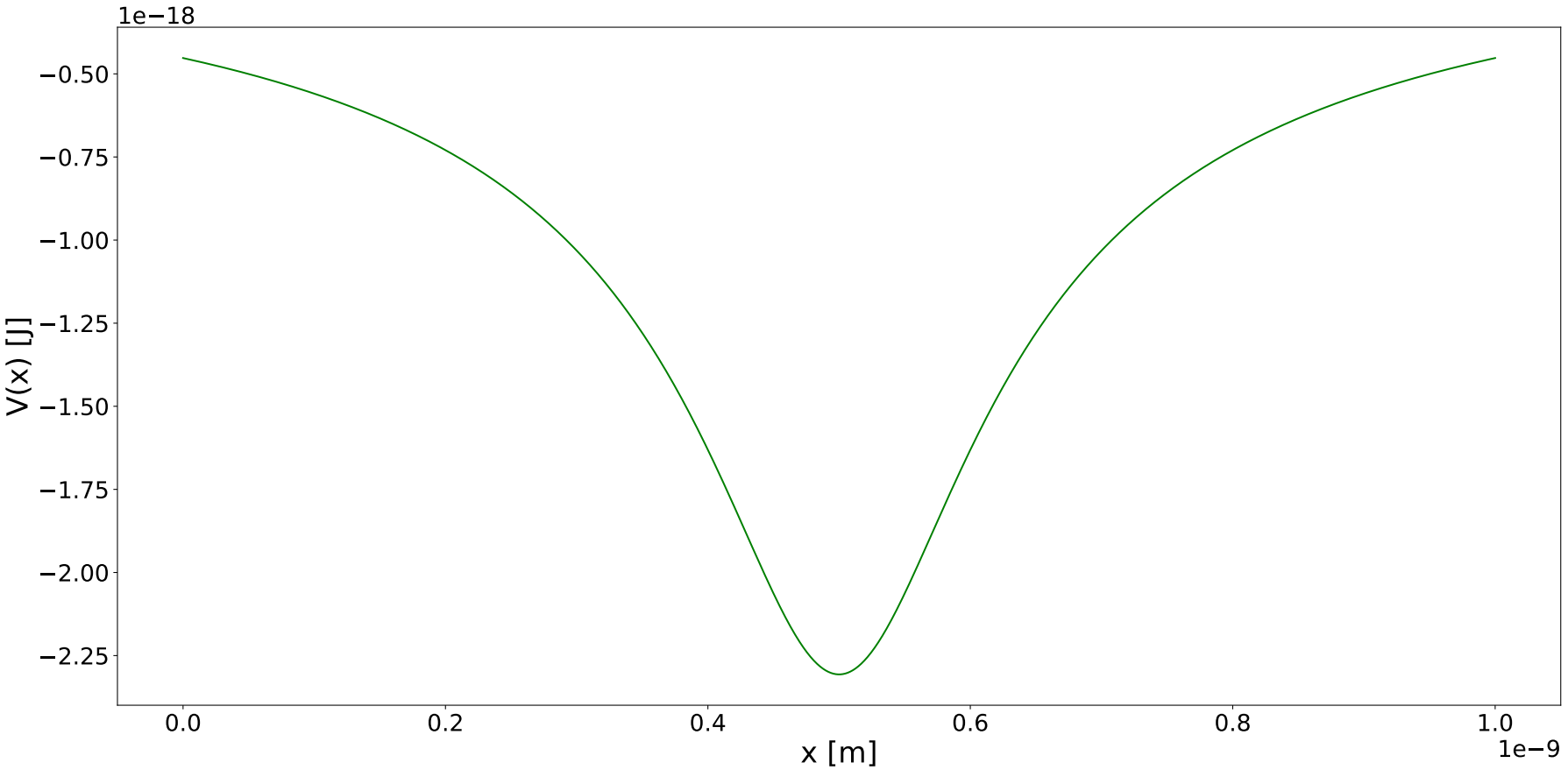


Figure 1: Potentiel pour $N = 1$, $a = 0.1$ nm et $Q = e$.

Image d'une suite de potentiels

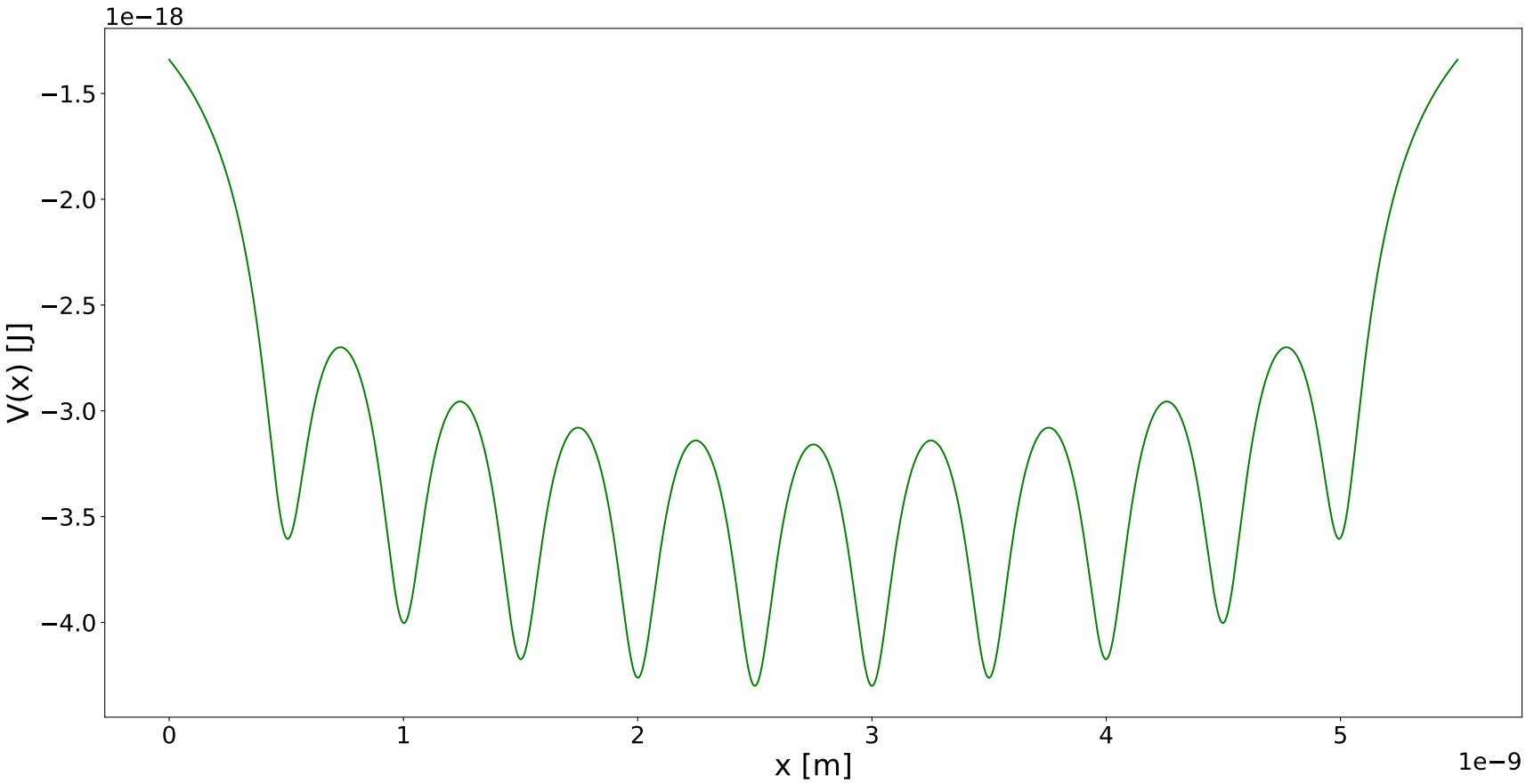


Figure 2: Potentiel pour $N = 10$, $a = 0.1$ *nm* et $Q = e$.

Plan

Equation

L'équation de Schrödinger (Eq.1) doit être discrétisée avec un formalisme matriciel (Eq.2).

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+(V(x)-E)\psi(x)=0 \tag{1}$$

$$M\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}E\\F\end{pmatrix}, \tag{2}$$

où M est une succession de produits de matrices calculées à l'aide des conditions de continuité dans chaque "sous-domaine".
Même principe que les cas simples vus en Tps mais à généraliser en numérique.

Découpe géométrique

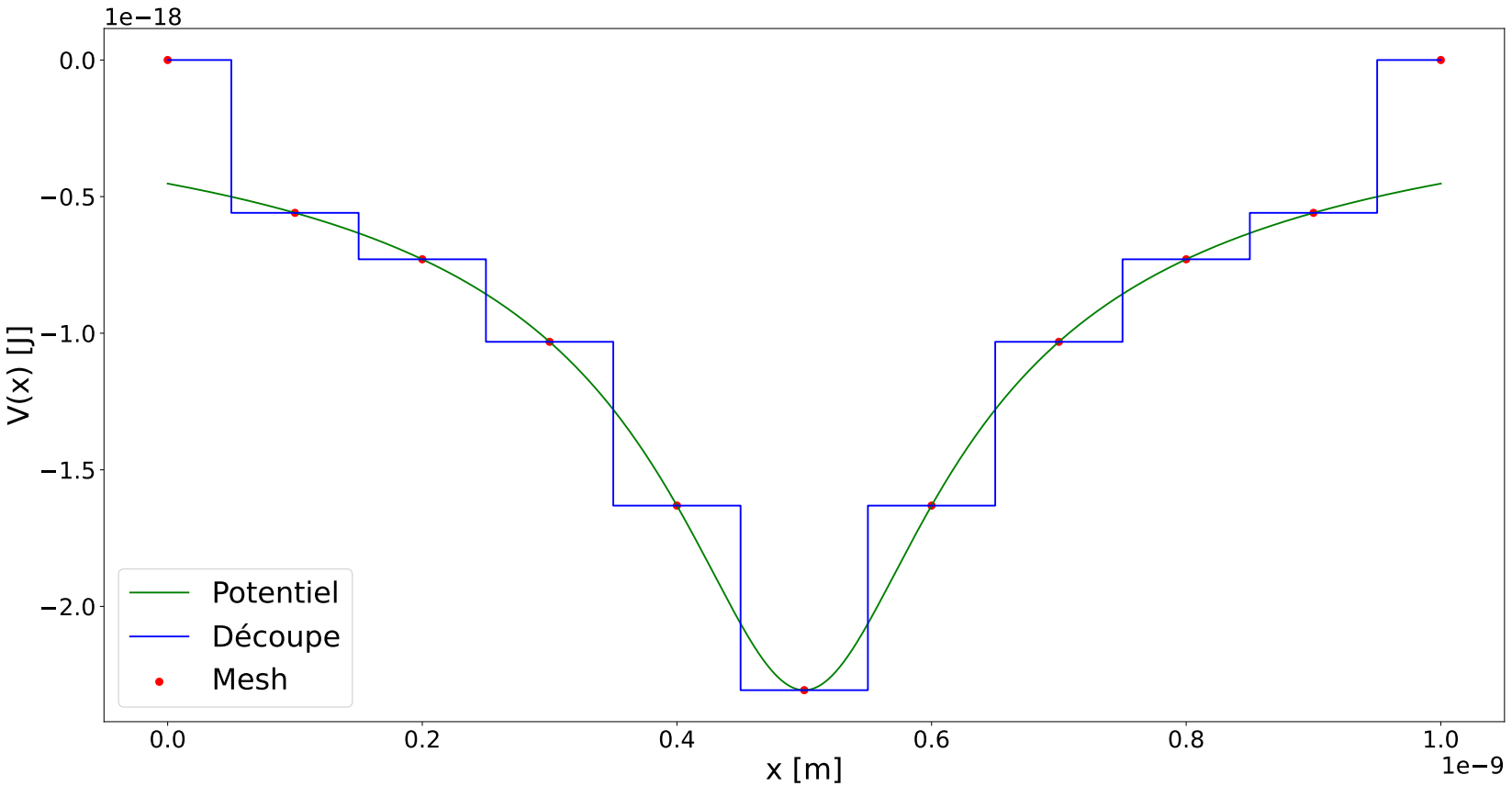


Figure 3: Découpe pour $N = 1$, $n = 11$, $a = 0.1$ nm et $Q = e$.

Découpe géométrique

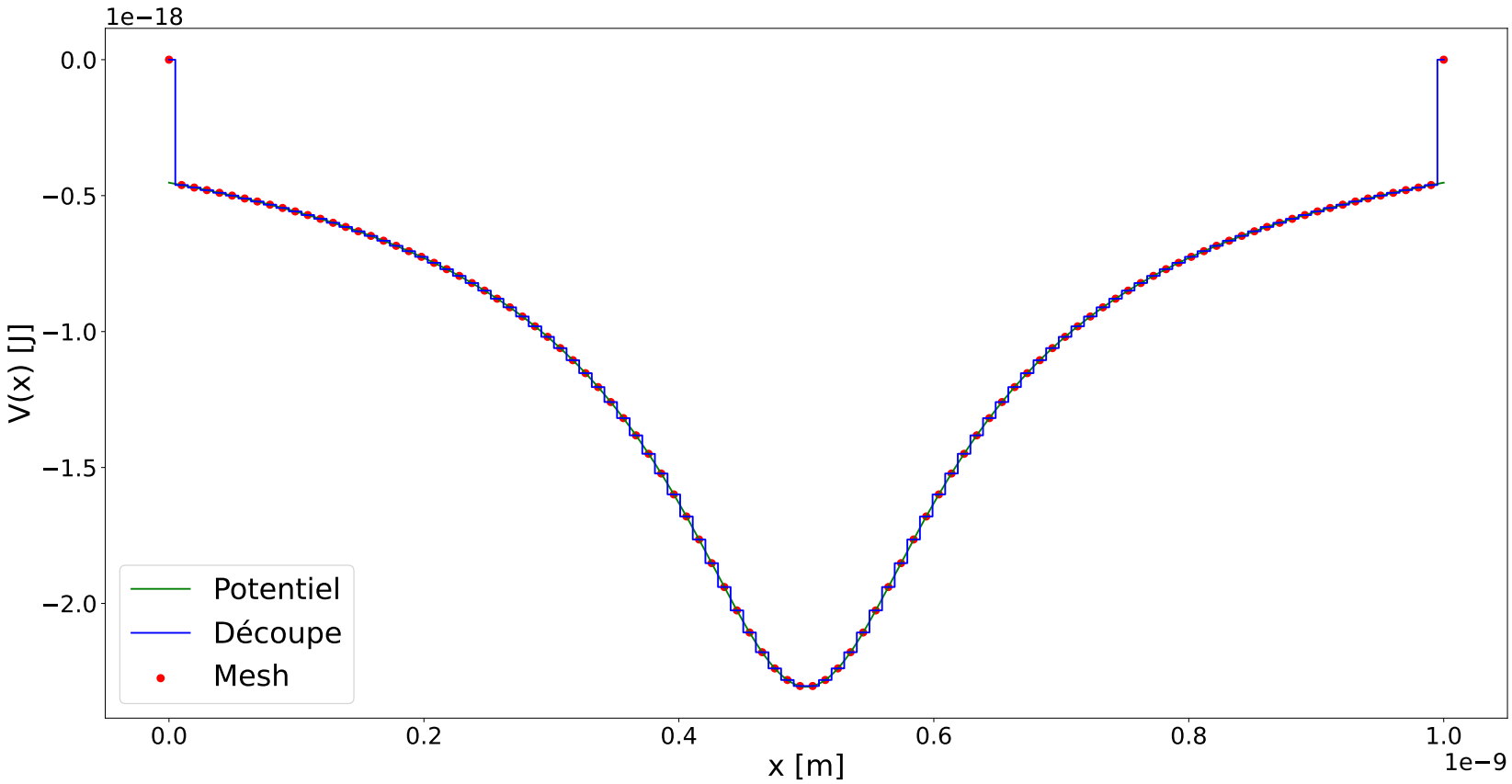


Figure 4: Découpe pour $N = 1$, $n = 101$ $a = 0.1$ nm et $Q = e$.

Image d'une découpe de suite de potentiel

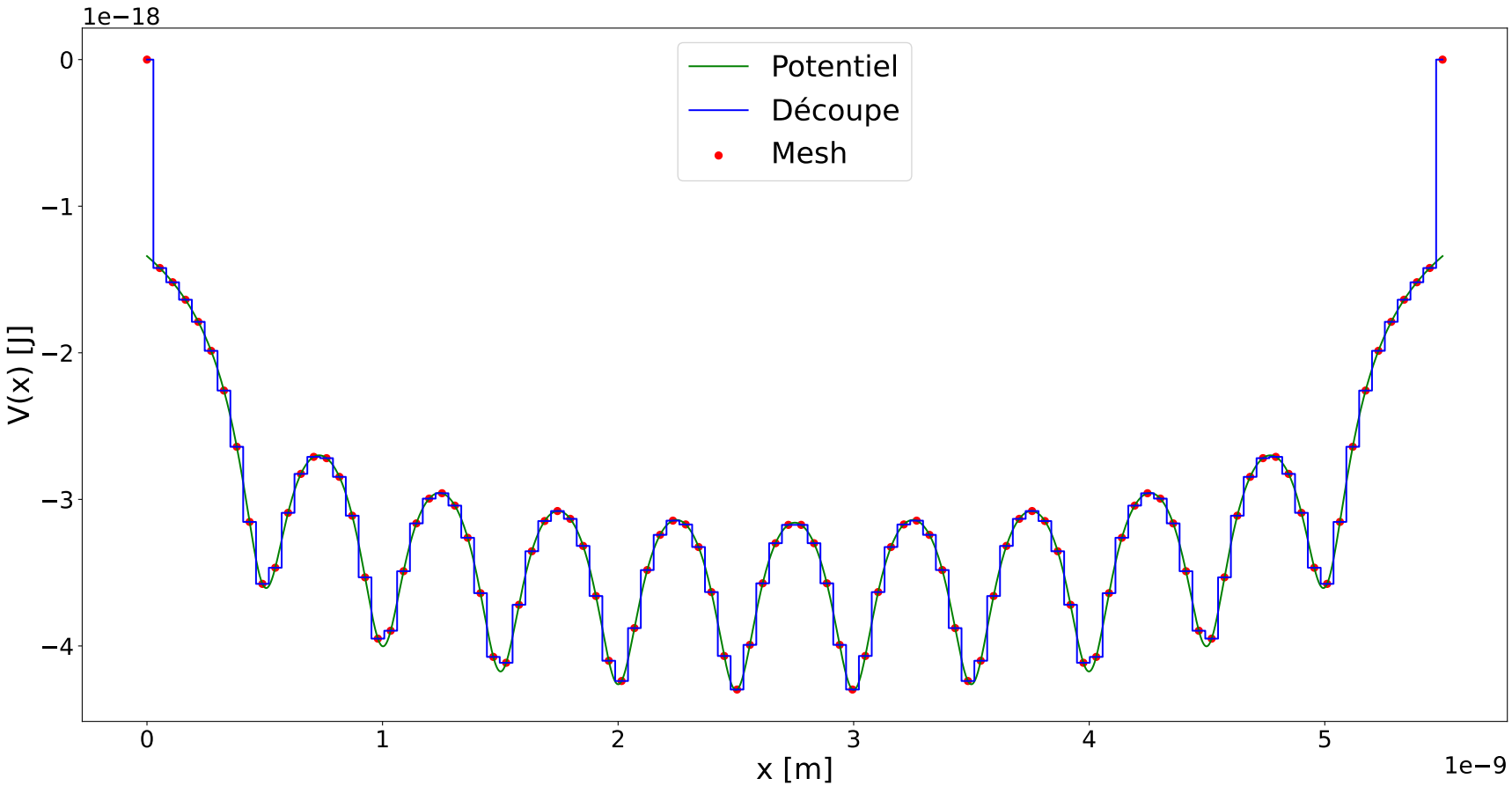


Figure 5: Découpe pour $N = 10$, $n = 101$, $a = 0.1$ nm et $Q = e$.

Niveaux d'énergies

Utiliser les conditions limites de l'ensemble du domaine pour trouver une condition sur les éléments de la matrice M.

Trouver le(s) niveau(x) d'énergie compatible(s) avec cette condition.

Vérification physique : On cherche des états liés...

Il n'y pas de correctif pour les énergies. Elles vont dépendre de vos marches,...

Plan

Solve bvp

Le fonction *scipy.integrate.solve_bvp* résout un problème aux conditions aux limites. Ici, les solutions sont les fonctions d'onde.

Son utilisation n'est pas évidente $\rightarrow$ **Consulter la documentation !**

Les conditions aux limites : valeur nulle de la fonction d'onde aux bornes du domaine.

Les valeurs des énergies trouvées précédemment sont nécessaires pour résoudre le problème !

Solve_bvp demande une estimation initiale, un *guess* dont la solution numérique peut (va) **fortement** dépendre.

Résultat

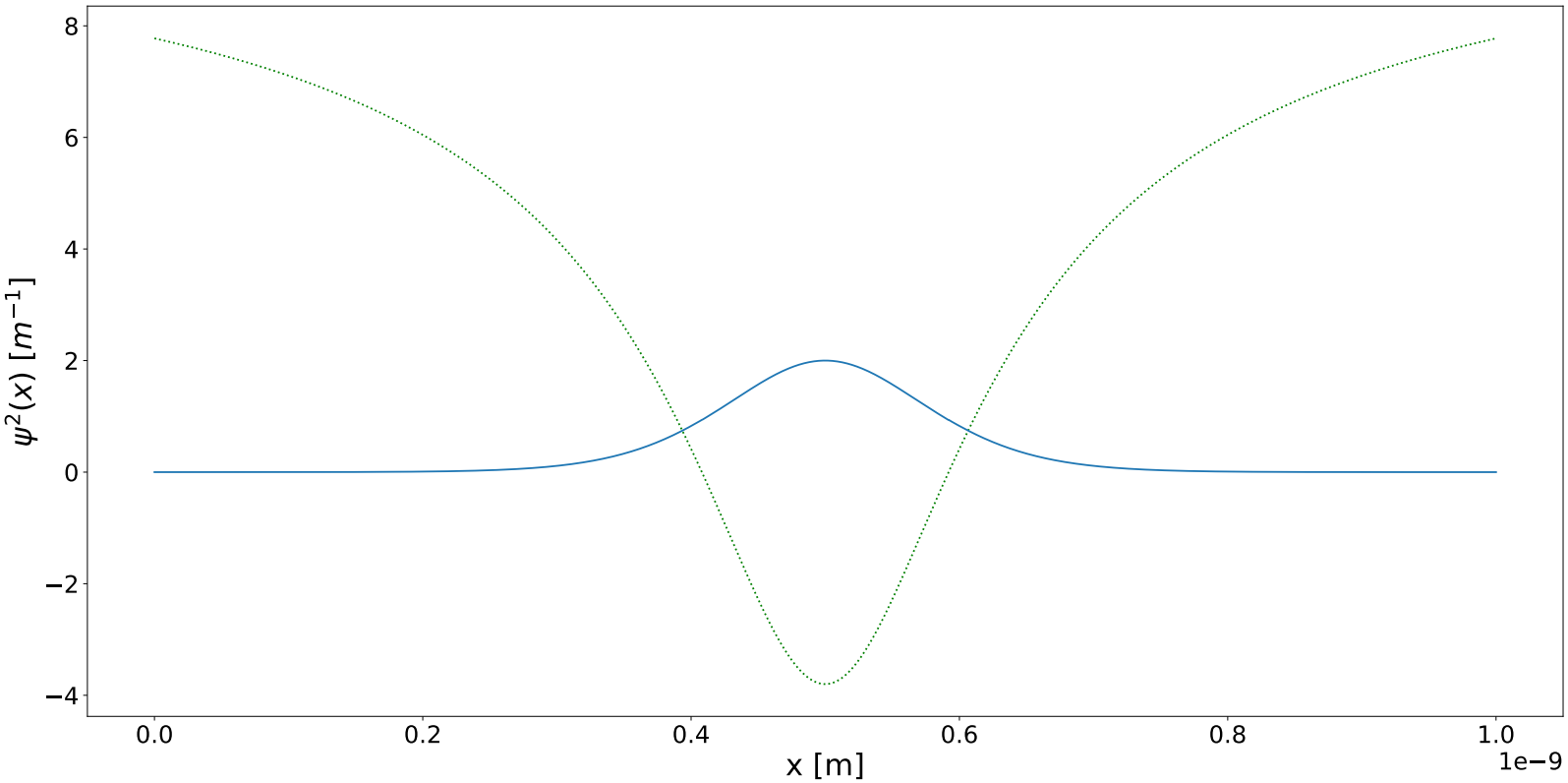


Figure 6: Fonction d'onde pour $N = 1$, $n = 101$, $a = 0.1\ nm$, $Q = e$ et $E = -10.6\ eV$.

Résultat

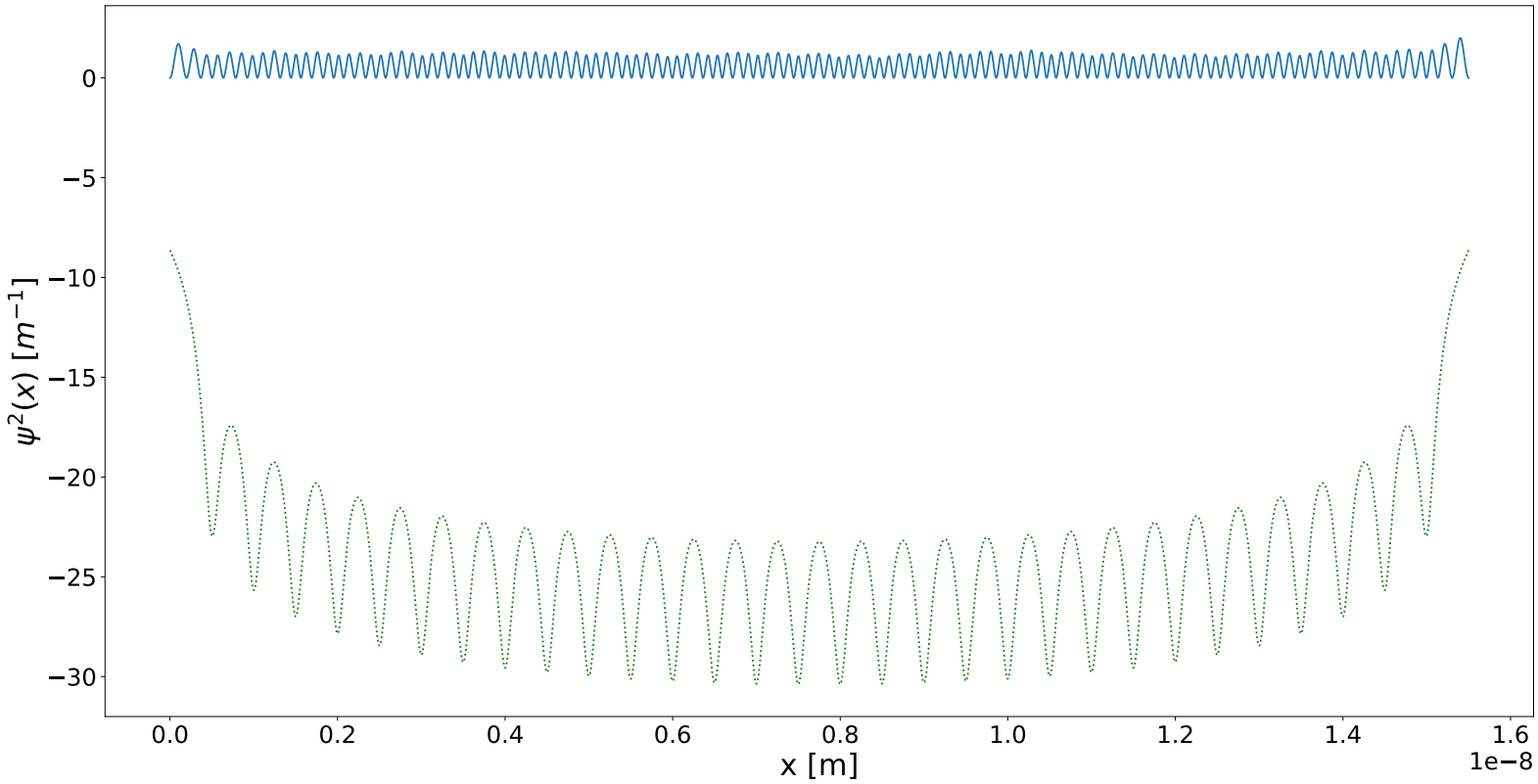


Figure 7: Fonction d'onde pour $N = 30$, $n = 101$, $a = 0.1$ nm, $Q = e$ et $E = -2.8$ eV.

Plan

Code

Ultiliser des **fonctions** ; cela donne une structure au code et clarifie la lecture.

Ne pas garder d'anciennes idées abandonnées dans le code final.

Utiliser *matplotlib.pyplot.step* pour afficher un potentiel discret !

Utiliser des fonctions toutes faites sur python.

Faire un code général qui s'adapte.

LaTeX X Python. ($ $)

Commenter... mais pas trop !

Code

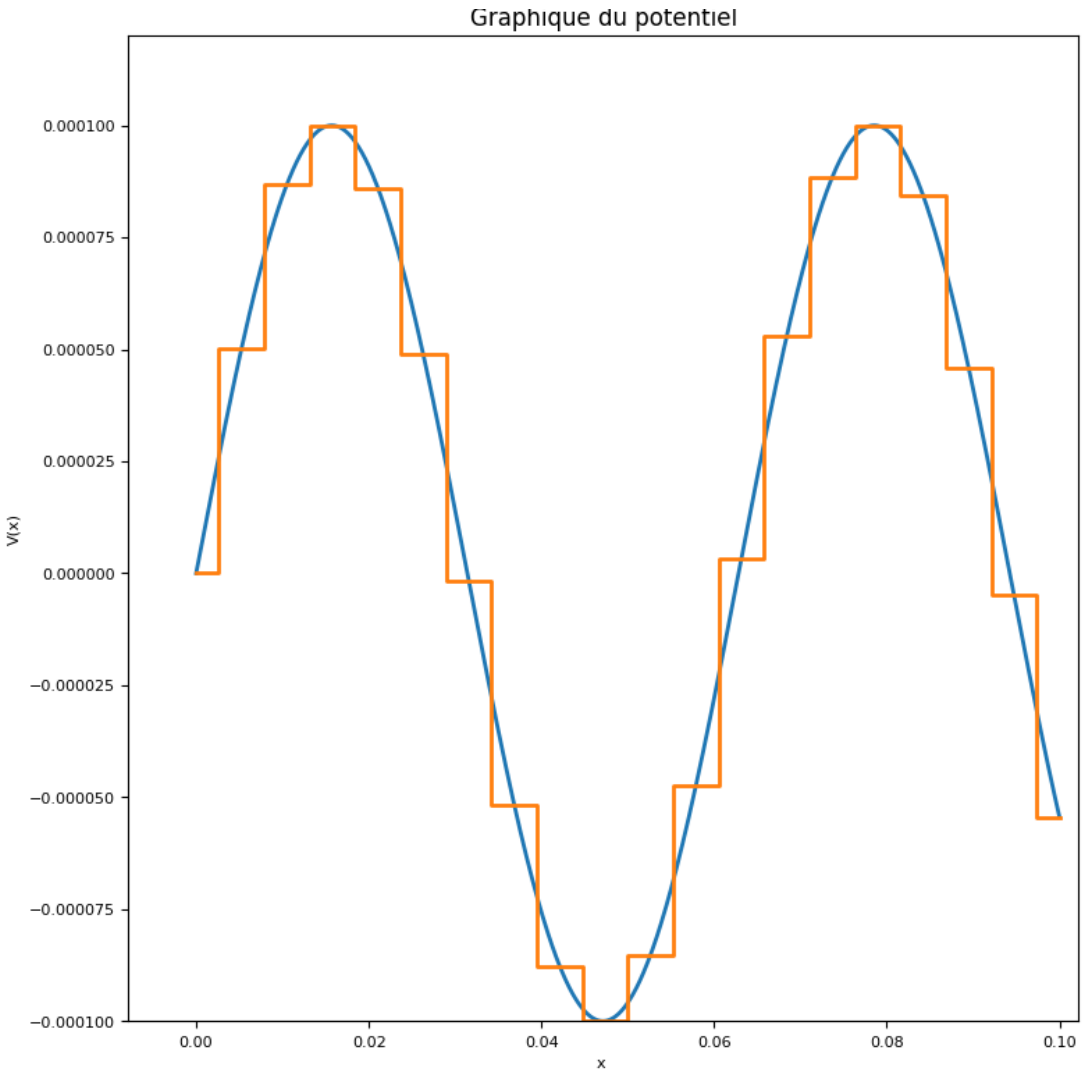
```
def salutations(classe):
""" La fonction salutations prend une classe en argument, et fait ensuite
coucou à chaque étudiant.e ! Elle fonctionne seulement si l'argument
classe est un tableau de chaînes de caractères."""

    for nom in classe:
# On boucle sur la classe

        print("coucou " + nom)
# On imprime "coucou" suivi de chaque nom

    print("Et voilà le travail !")
# On termine l'exécution de la fonction avec un dernier print
```

→ **Illisible !**

Code

```
def salutations(classe):
""" Fait coucou à chaque étudiant.e !
Paramètres : classe (array of string) : Les noms des étudiant.e.s."""
    for nom in classe:
        print("coucou " + nom)
    print("Et voilà le travail !")
```

Mauvaise figure



Mauvaise figure

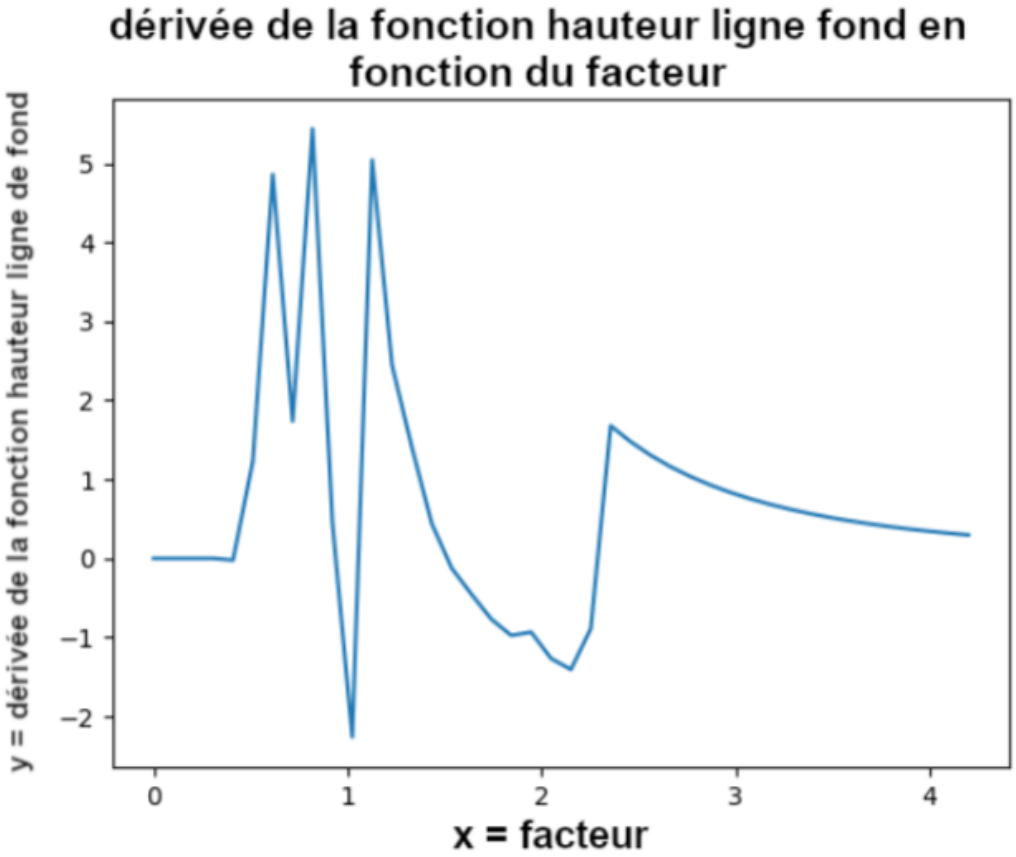


FIGURE 6 – Dérivée de la fonction hauteur ligne de fond en fonction du facteur

Meilleure figure

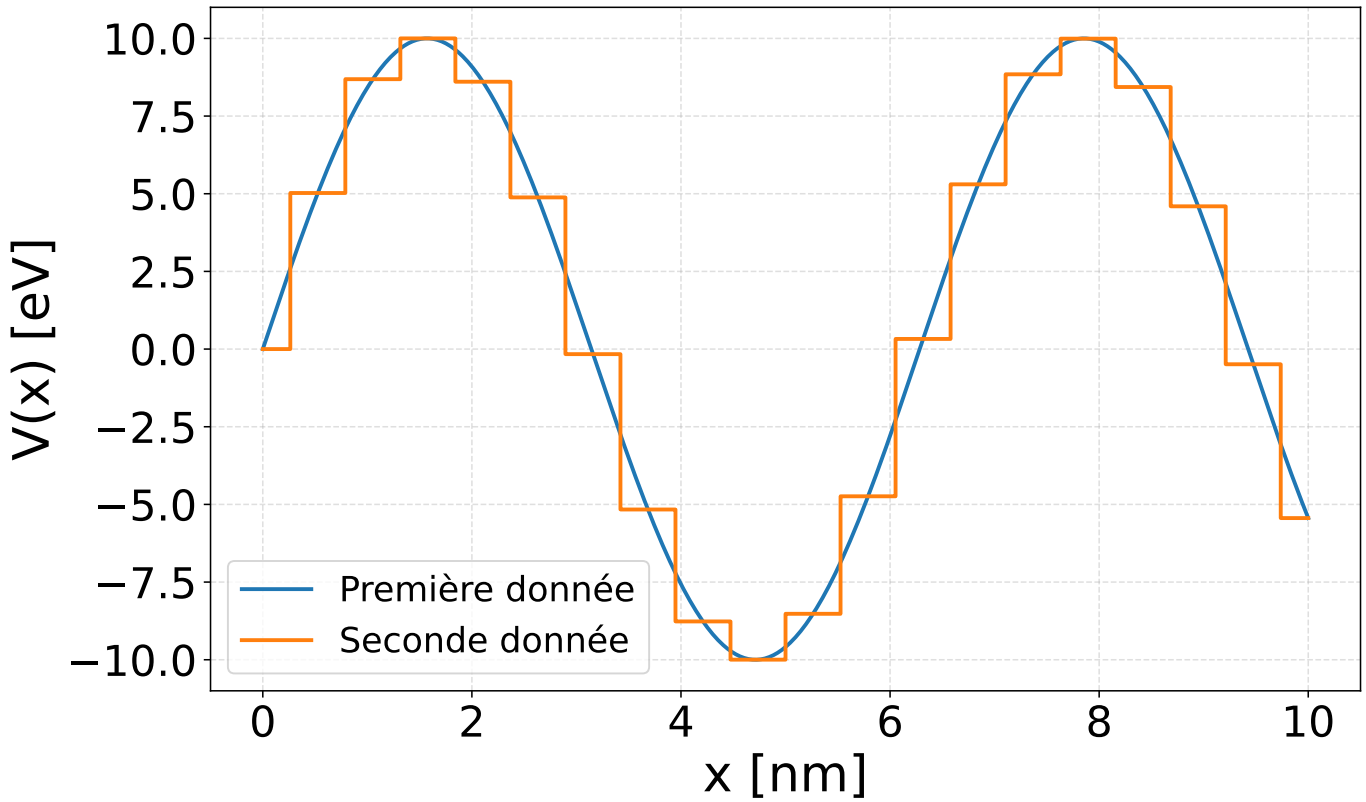


Figure 8: Potentiel en fonction de la position.

Meilleure figure

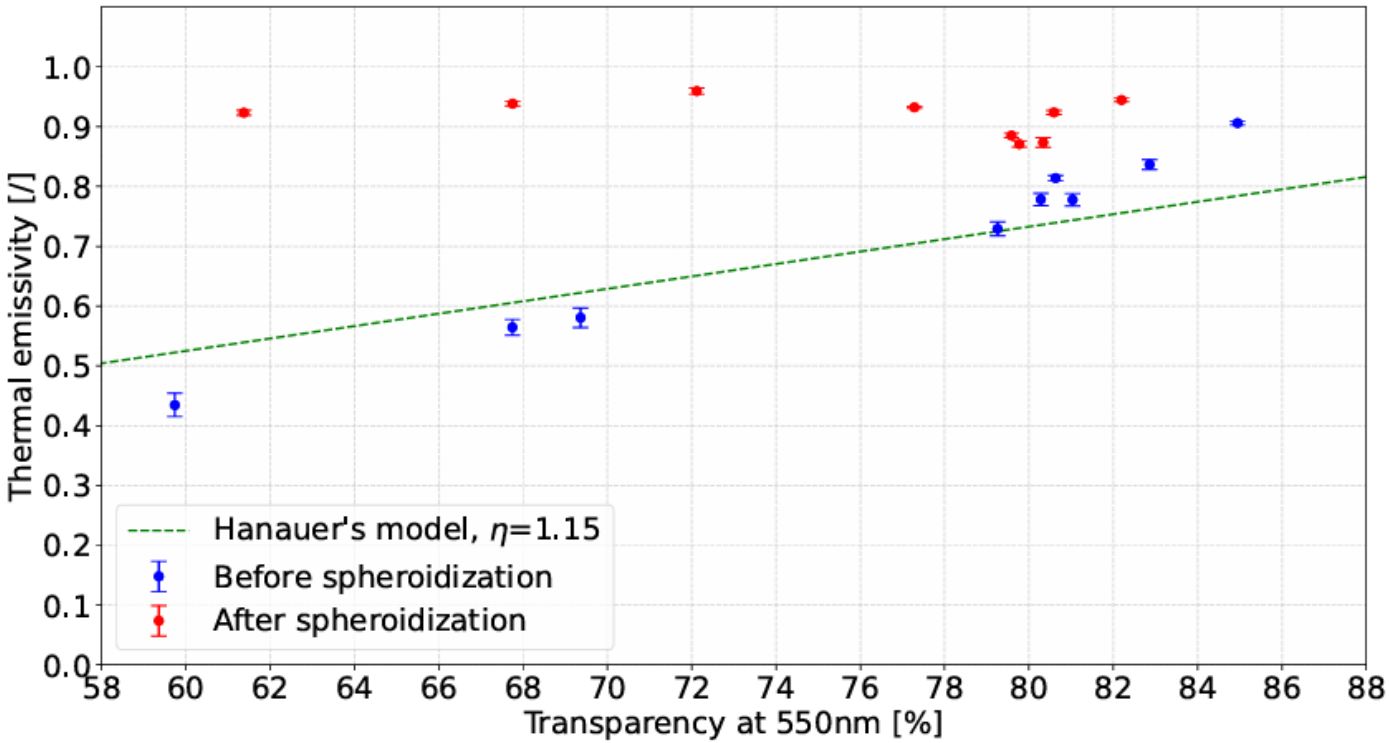


Figure 3: Thermal emissivity of the 90 nm AgNW samples with respect to their transparency, both before and after exposure to temperatures of 325 °C and 350 °C for 15 minutes. The error bars for thermal emissivity are calculated based on the standard deviation of the apparent temperature. Error bars on transparency are not shown, as they solely depend on the instrumental precision, which would here be smaller than the symbol width. The dashed green line is Hanauer's model [5], which offers a reference for the thermal emissivity of pristine AgNW networks.

Rapport

Idéalement, chaque figure est référencée dans le texte.

Aller droit au but !

Utiliser un correcteur orthographique (Sur overleaf : Menu $\rightarrow$ correcteur orthographique $\rightarrow$ français).

Pas de 'nous', 'je', 'on',...

Les figures en PDF ! (ça se voit quand c'est pas le cas)

Tips perso

Ne passez pas trop de temps sur un détail.

Commencez le plus vite possible.

Code fonctionnel et organisé dès le début.

Posez des questions sur Discord, ne restez pas bloqué pendant un mois sur un détail.

Il n'y a pas de correctif de projet. Vous ne devez pas arriver à une solution bien précise.