



Projet Numérique de Physique moderne

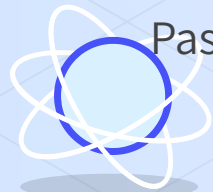
QURESHI Hussain LEMENAND Tom
MANCHEC Sergueï



Introduction

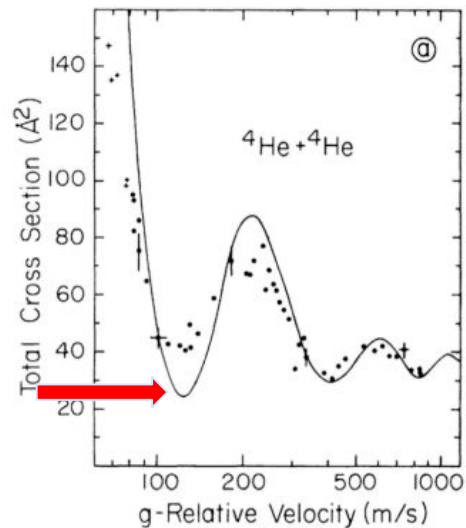
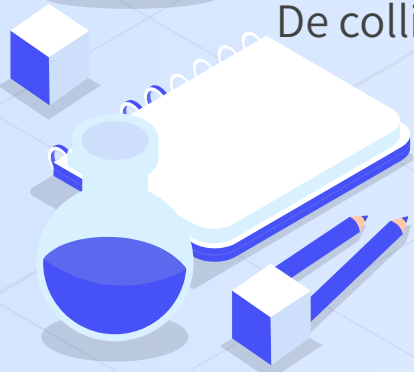


Contexte général



Passage de la physique classique à la physique quantique

De collisions “classiques” aux ondes



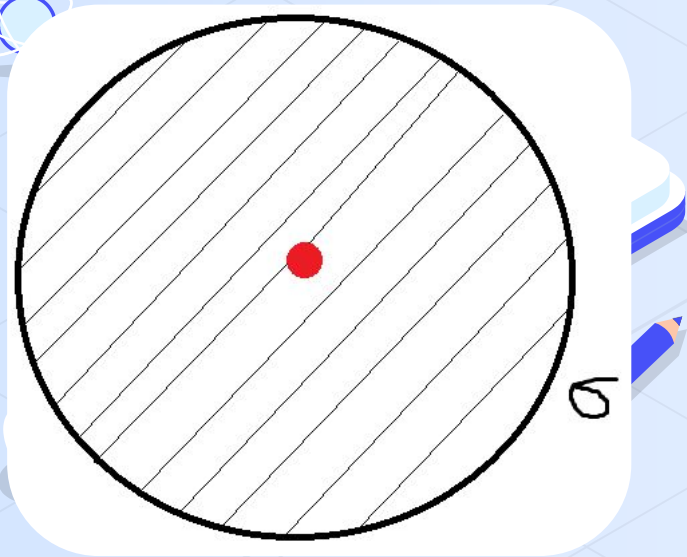
An isometric illustration of various objects on a light blue grid background. In the top left, there are two stylized atomic models with a central blue sphere and three white elliptical orbits. Below them is a large spiral-bound notebook with a white cover and blue spine. To the left of the notebook are a pair of blue-rimmed glasses. To the right of the notebook are two blue pens. In the bottom right corner, there is a blue and white calculator and two small blue cubes. The title 'La diffusion' is written in a large, bold, blue font at the top center.

La diffusion

La diffusion correspond à l'interaction entre une particule (comme un électron) et une cible (comme un atome ou un noyau)



La section efficace

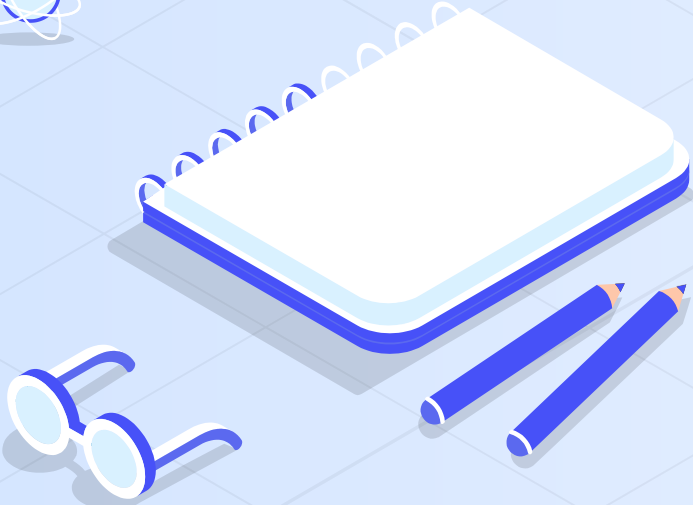
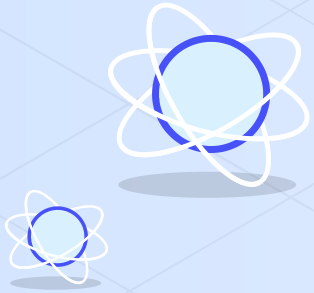


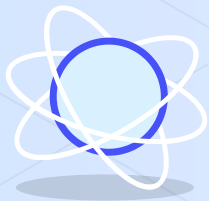
La section efficace peut être apparentée à une “surface virtuelle” où la particule incidente peut être déviée.



L'effet Ramsauer-Townsend

$$\sigma \rightarrow 0$$





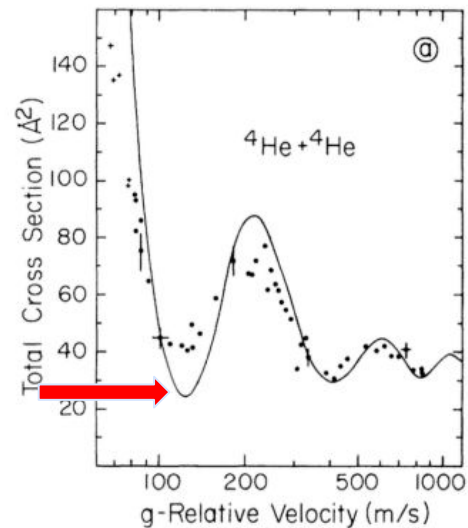
Objectif scientifique



Comprendre l'annulation de la diffusion des électrons

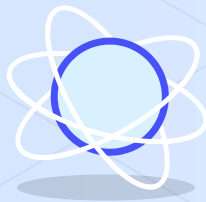
Modélisation par un puits de potentiel

Validation des modèles

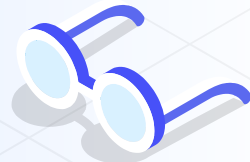
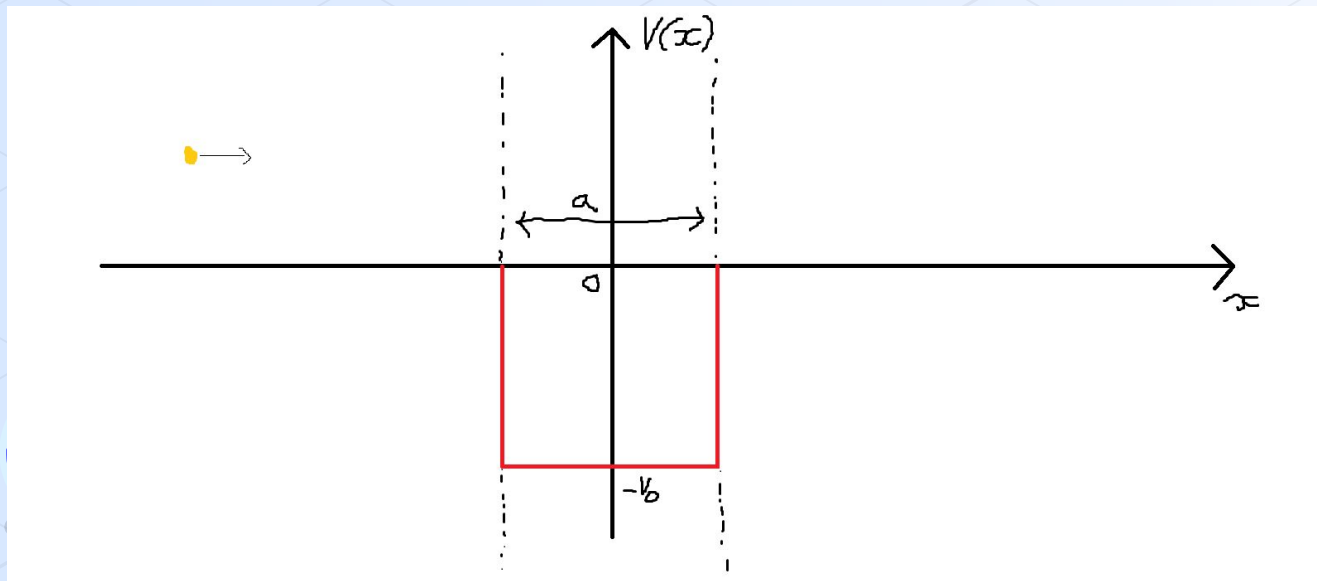


Résolution analytique



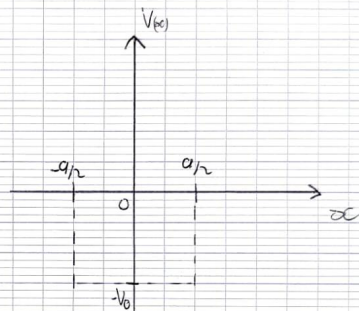


Modèle physique retenu



$$k_1 = k_3 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$$

$$\begin{cases} \phi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \\ \phi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \\ \phi_3(x) = Fe^{ik_1x} \end{cases}$$



Continuité:

En $a/2$:

$$\textcircled{1} \phi_2(a/2) = \phi_3(a/2) \Rightarrow Ce^{ik_2 a/2} + De^{-ik_2 a/2} = Fe^{ik_1 a/2}$$

$$\begin{aligned} \textcircled{2} \phi_2'(a/2) &= \phi_3'(a/2) \Rightarrow (k_2 Ce^{ik_2 a/2} - k_2 De^{-ik_2 a/2}) = k_1 Fe^{ik_1 a/2} \\ &\Rightarrow k_2 (Ce^{ik_2 a/2} - De^{-ik_2 a/2}) = k_1 Fe^{ik_1 a/2} \end{aligned}$$

En $-a/2$:

$$\textcircled{3} \phi_1(a/2) = \phi_2(a/2) = Ae^{ik_1 a/2} + Be^{-ik_1 a/2} = Ce^{-ik_2 a/2} + De^{ik_2 a/2}$$

$$\textcircled{4} \phi_1'(a/2) = \phi_2'(a/2) = k_1(Ae^{-ik_1 a/2} - Be^{ik_1 a/2}) = k_2(Ce^{-ik_2 a/2} + De^{ik_2 a/2})$$

On cherche $T = \frac{F}{A}$ le coefficient de transmission

$R = \frac{B}{A}$ le coefficient de réflexion

De $\textcircled{1}$ et $\textcircled{2}$ On a:

$$\textcircled{1} Ce^{ik_2 a/2} + De^{-ik_2 a/2} = Fe^{ik_1 a/2}$$

$$\textcircled{2} Ce^{ik_2 a/2} - De^{-ik_2 a/2} = \frac{k_1}{k_2} Fe^{ik_1 a/2}$$

$$\Rightarrow 2Ce^{ik_2 a/2} = Fe^{ik_1 a/2} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \Rightarrow C = \frac{F}{2} e^{\frac{i a}{2}(k_1 - k_2)} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)$$

$$\Rightarrow 2De^{-ik_2 a/2} = Fe^{ik_1 a/2} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \Rightarrow D = \frac{F}{2} e^{\frac{i a}{2}(k_1 + k_2)} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)$$

De $\textcircled{3}$ et $\textcircled{4}$:

$$Ae^{-ik_1 a/2} + Be^{ik_1 a/2} = Ce^{-ik_2 a/2} + De^{ik_2 a/2}$$

$$\begin{aligned} \textcircled{3} \quad &= \frac{F}{2} e^{ik_1 a/2} \left(e^{-ik_2 a/2} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) + e^{ik_2 a/2} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \right) \\ &= \frac{F}{2} e^{ik_1 a/2} \left(e^{-ik_2 a/2} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) + e^{ik_2 a/2} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \right) \end{aligned}$$

$$\textcircled{4} \quad k_1(Ae^{-ik_1 a/2} - Be^{ik_1 a/2}) = k_2 \frac{F}{2} e^{ik_1 a/2} \left(e^{-ik_2 a/2} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) - e^{ik_2 a/2} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \right)$$

On obtient donc les équations suivantes :

$$[1] A e^{-ik_1 a} + B e^{ik_1 a} = \frac{F}{2} e^{ik_1 a} \left(e^{-ik_1 a} \left(1 + \frac{k_1}{k_2} \right) + e^{ik_1 a} \left(1 - \frac{k_1}{k_2} \right) \right)$$

$$[2] K_1 (A e^{-ik_1 a} - B e^{ik_1 a}) = \frac{k_2 F}{2} e^{ik_1 a} \left(e^{-ik_1 a} \left(1 + \frac{k_1}{k_2} \right) - e^{ik_1 a} (k_2 - k_1) \right)$$

$$[1] + [2] \Leftrightarrow 2A e^{-ik_1 a} = \frac{F}{2} e^{ik_1 a} \left(e^{-ik_1 a} \left(1 + \frac{k_1}{k_2} \right) + e^{ik_1 a} \left(1 - \frac{k_1}{k_2} \right) + \frac{k_2}{k_1} \left(e^{-ik_1 a} \left(1 + \frac{k_1}{k_2} \right) - e^{ik_1 a} (k_2 - k_1) \right) \right)$$

$$\Leftrightarrow 2A e^{-ik_1 a} = \frac{F}{2} e^{ik_1 a} \left(e^{-ik_1 a} \left(2 + \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) + e^{ik_1 a} \left(2 - \frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right) \right)$$

$$\Leftrightarrow A = \frac{F}{4} e^{ik_1 a} \left(e^{-ik_1 a} \left(2 + \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) + e^{ik_1 a} \left(2 - \frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right) \right)$$

$$[1] - [2] \Leftrightarrow 2B e^{ik_1 a} = \frac{F}{2} e^{ik_1 a} \left(e^{-ik_1 a} \left(1 + \frac{k_1}{k_2} \right) + e^{ik_1 a} \left(1 - \frac{k_1}{k_2} \right) - \frac{k_2}{k_1} \left(e^{-ik_1 a} \left(1 + \frac{k_1}{k_2} \right) - e^{ik_1 a} (k_2 - k_1) \right) \right)$$

$$\Leftrightarrow B = \frac{F}{4} e^{ik_1 a} \left(e^{-ik_1 a} \left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right) + e^{ik_1 a} \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \right)$$

$$\Rightarrow \frac{B}{A} = \frac{e^{-ik_1 a} \left(2 + \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right) + e^{ik_1 a} \left(2 - \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)}{e^{-ik_1 a} \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{k_1 k_2} \right) + e^{ik_1 a} \left(\frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \right)}$$

$$\text{avec } \frac{k_1}{k_2} = \frac{k_2}{k_1} = \frac{k_1^2 - k_2^2}{k_1 k_2}$$

$$\begin{aligned} \frac{B}{A} &= \frac{4 e^{-ik_1 a}}{e^{-ik_1 a} \left(2 + \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right) + e^{ik_1 a} \left(2 - \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)} \\ &= \frac{2 e^{-ik_1 a}}{2 \left(e^{ik_1 a} + e^{-ik_1 a} \right) - \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \left(e^{ik_1 a} - e^{-ik_1 a} \right)} \\ &= \frac{4 e^{-ik_1 a}}{4 \cos(k_1 a) - i 2 \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \sin(k_1 a)} \end{aligned}$$

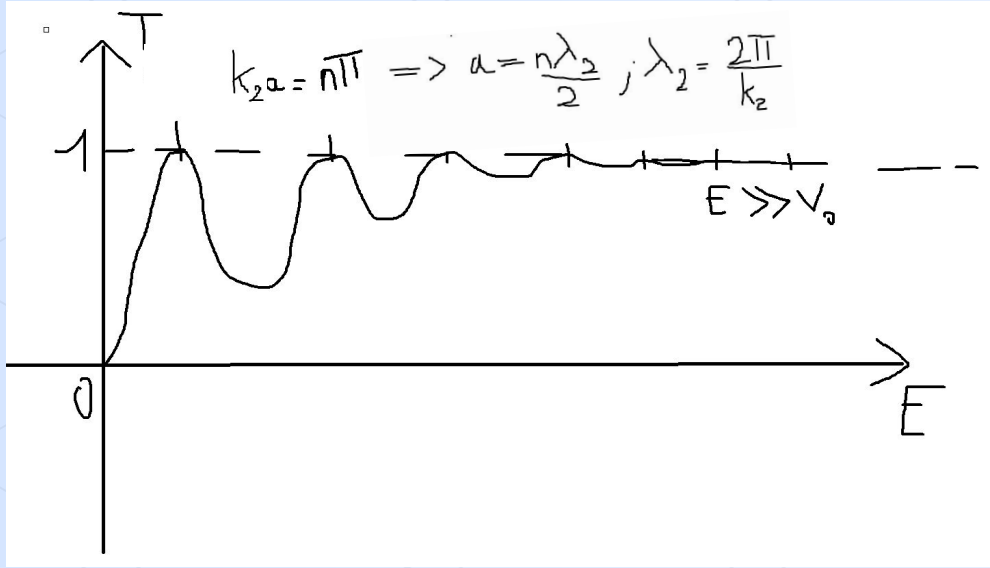
$$\text{On a } T+R=1 \quad (\Leftrightarrow) \left(\frac{F}{A}\right)^2 + \left(\frac{B}{A}\right)^2 = 1$$

avec $R=1-T$

$$\text{Donc } T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{16}{16 \cos^2(k_2 a) + 4 \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sin^2(k_2 a)}$$

$$= \frac{4}{4 \cos^2(k_2 a) + \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sin^2(k_2 a)}$$

Effet Ramsauer-Townsend



Le coefficient de transmission analytique et numérique sont légèrement différents.

Le coefficient numérique est un paquet d'ondes tandis que le coefficient analytique est un état stationnaire



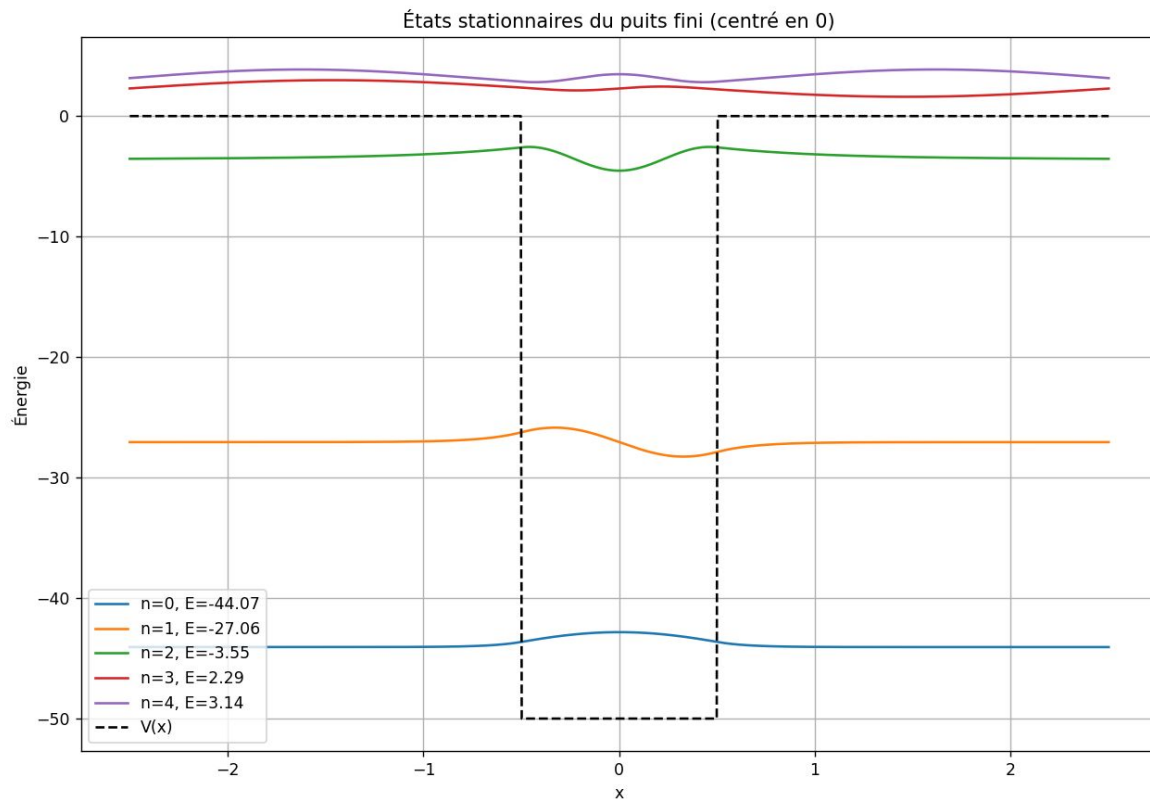
Résolution par simulation

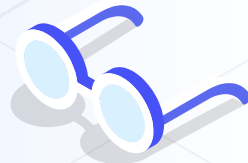


Résolution numérique (Python)

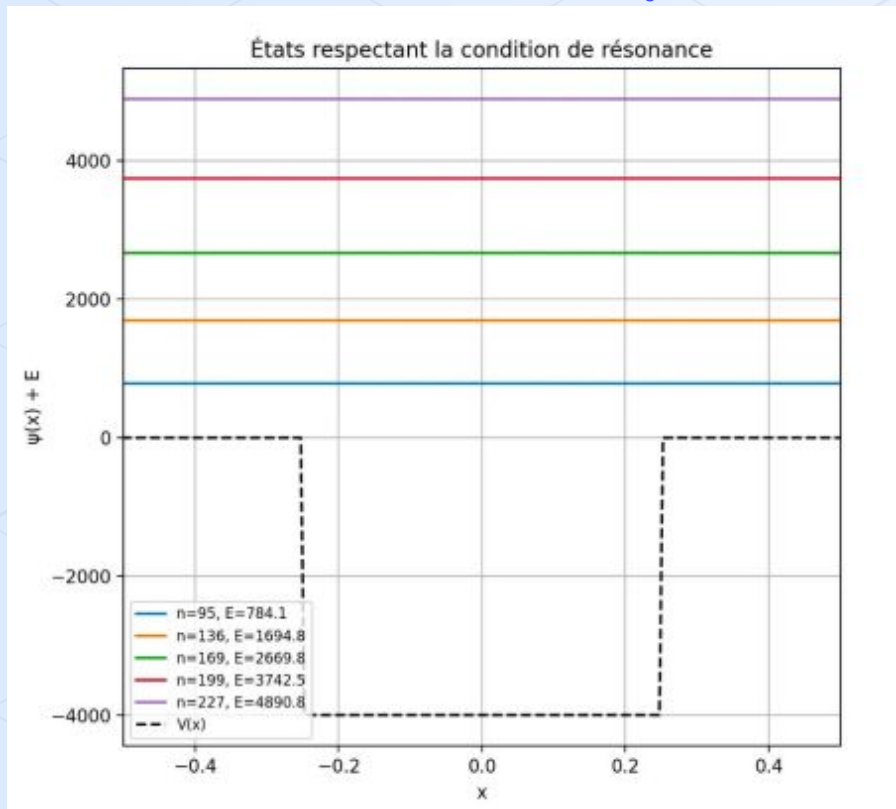


États stationnaires





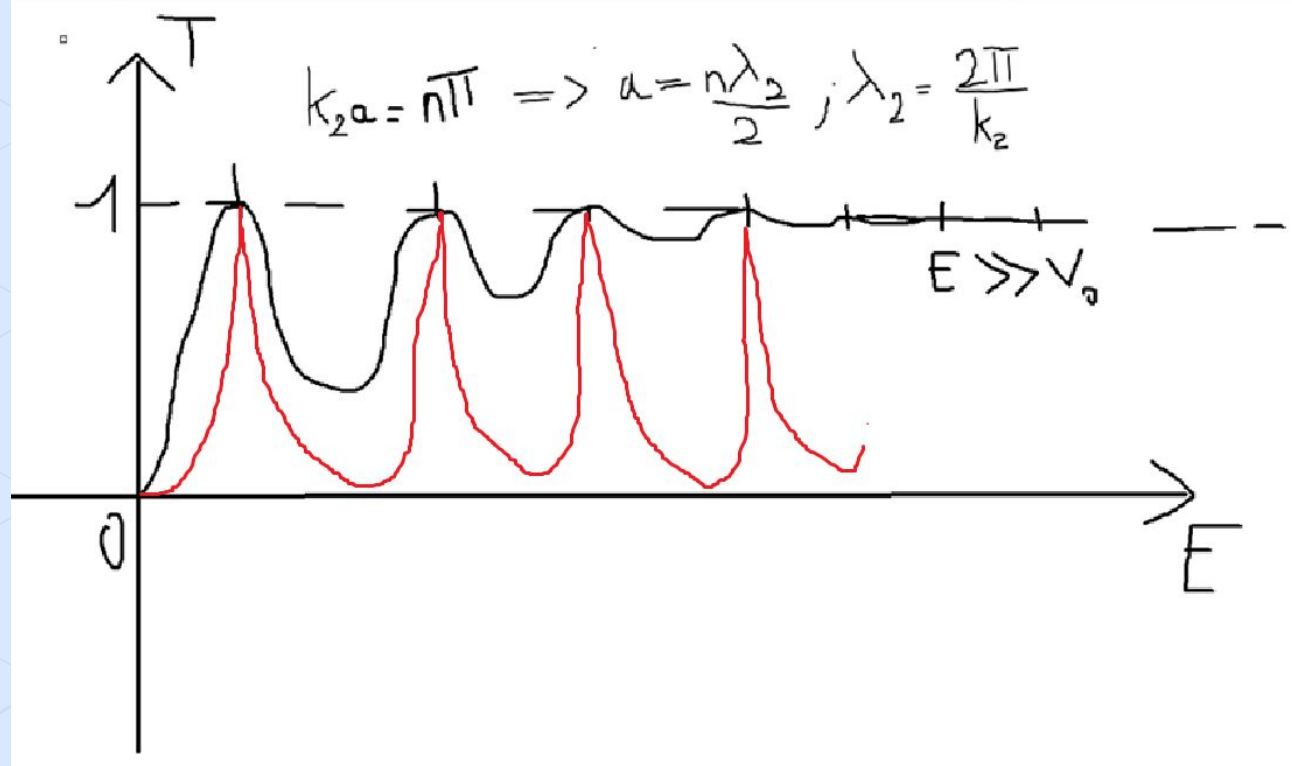
États stationnaires optimaux



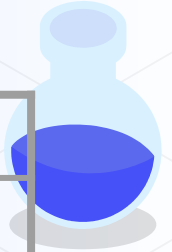
Les différences entre les deux modèles



Effet Ramsauer-Townsend



Comparaison



Type	Analytique	Numérique	Conséquences
Continu/discret	Continu	Discret	Erreurs possibles pour le numérique
Onde utilisée	Onde stationnaire	Paquet d'ondes	Légères différences dans le résultat
Methode de calcul	Séparation en 3 parties puis résolution de l'équation de schrödinger indépendante du temps	Résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps	La méthode analytique sera exacte mais si le potentiel n'est pas constant ne marchera pas
But	Identification des conditions de transmission maximale	Observation numérique directe de la diffusion et de l'effet Ramsauer-Townsend	



Approfondissement : paquet d'ondes vs onde stationnaire



Onde Stationnaire

- Solution théorique idéale
- Calculs analytiques précis : énergies quantifiées, transmission, réflexion
- Infinie dans l'espace, sans localisation
- Statique dans le temps, état figé
- Utile pour comprendre la structure du problème

Paquet d'Ondes

- Représente une particule réaliste
- Localisé dans l'espace, visualisation possible
- Évolution dans le temps, dynamique observable
- Permet de simuler :
 - Transmission
 - Interférence
 - Effet tunnel

Application : Effet Ramsauer-Townsend

- Observation visuelle possible uniquement avec un paquet d'ondes
- Permet de voir à quelles énergies la particule traverse sans déviation
- L'onde stationnaire reste un outil théorique, mais la simulation par paquet d'ondes est nécessaire pour étudier cet effet en temps réel



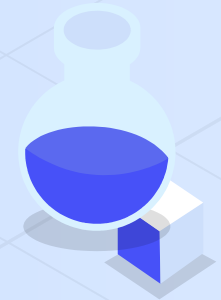
Pourquoi choisir le modèle du puits ?

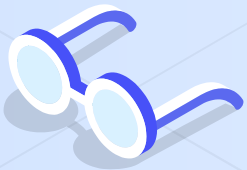
- Modèle simple et intuitif pour comprendre comment un électron peut être piégé
- Il explique par les calculs la nécessité des différents niveaux d'énergie
- Il aide donc à comprendre l'effet Ramsauer



Mais...

- Il simplifie la réalité
- Est en une dimension





Bilan

Ce qu'on a vu

- Un résumé du problème physique
- Une démonstration analytique et numérique de l'effet Ramsauer
- La différence entre les deux types de résolution



Merci de votre écoute !

