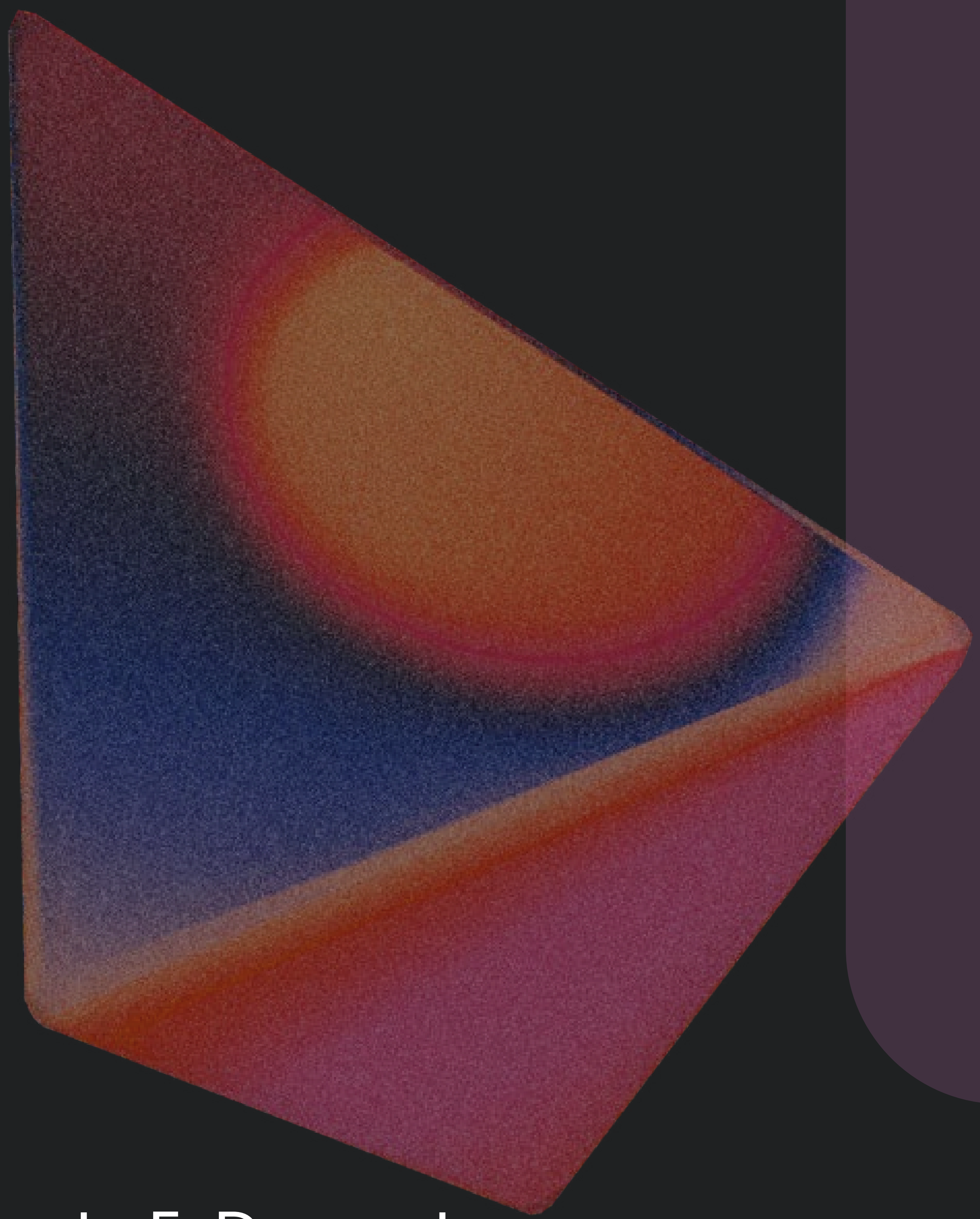
Nino AUDREN | Timothé DESMARQUET

PROJET NUMÉRIQUE PHYSIQUE MODERNE

Encadrant : E. Dupont

Préing 2 | Groupe MI1 - G | 2024–2025

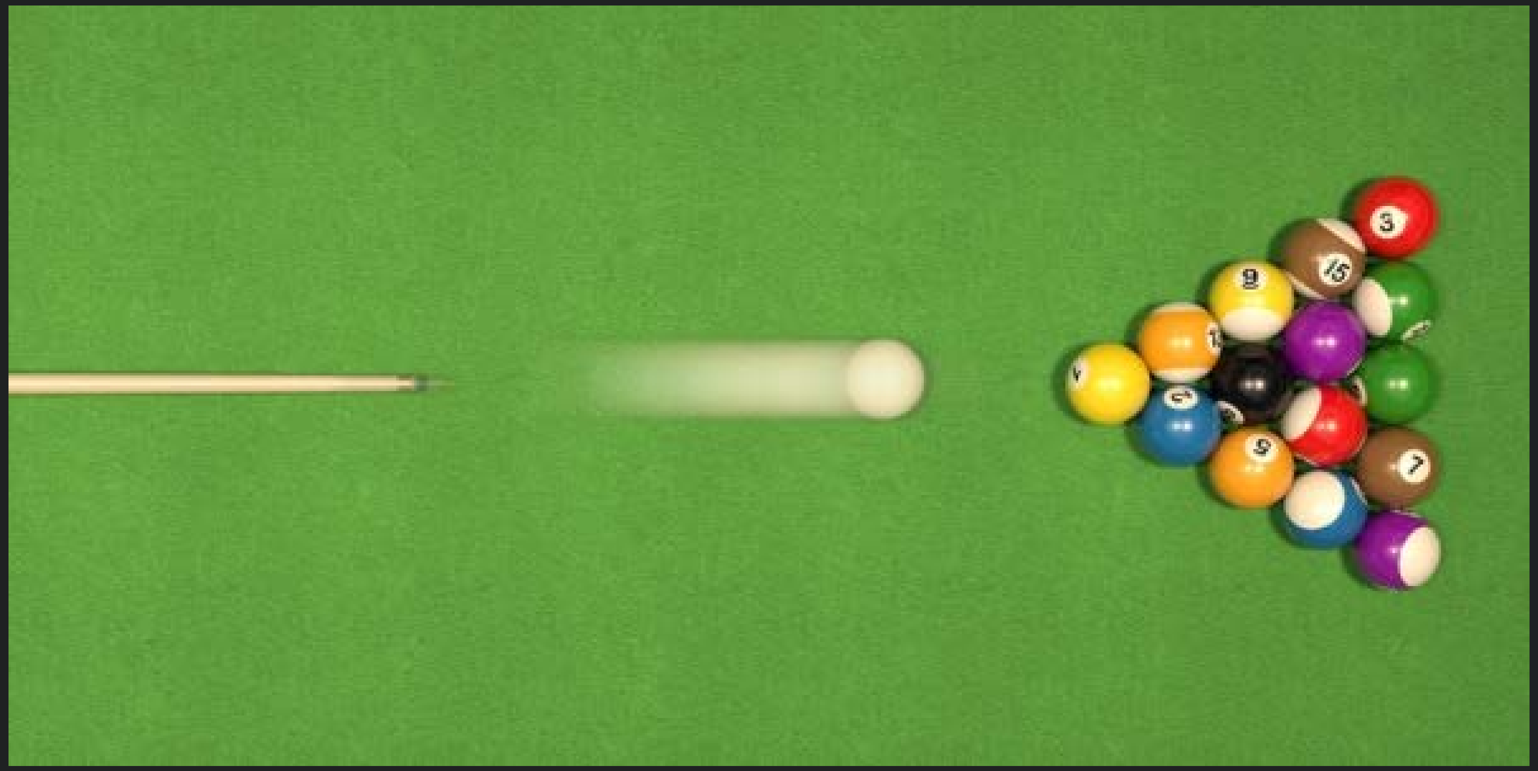


SOMMAIRE

1. INTRODUCTION DU PROJET

CONTEXTE

En physique à l'échelle <u>macroscopique</u>



En physique à l'échelle <u>microscopique</u>

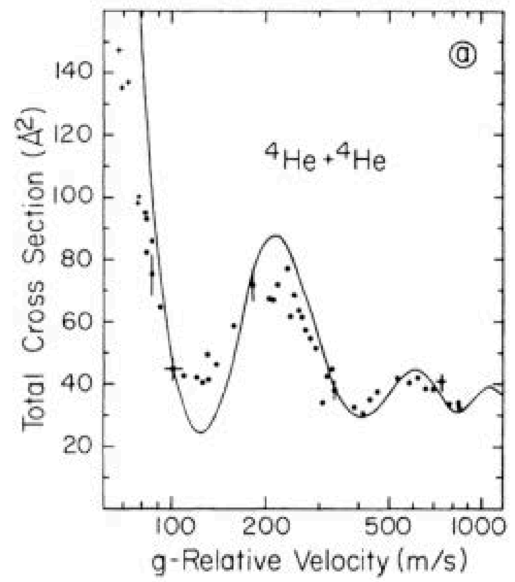


FIGURE 1 – Observation de l'effet Ramsauer–Townsend lors de la collision d'atomes d'hélium 4. Figure issue de [G76].

2. OBJECTIFS DU PROJET

OBJECTIFS

Comprendre l'effet Ramsauer–Townsend

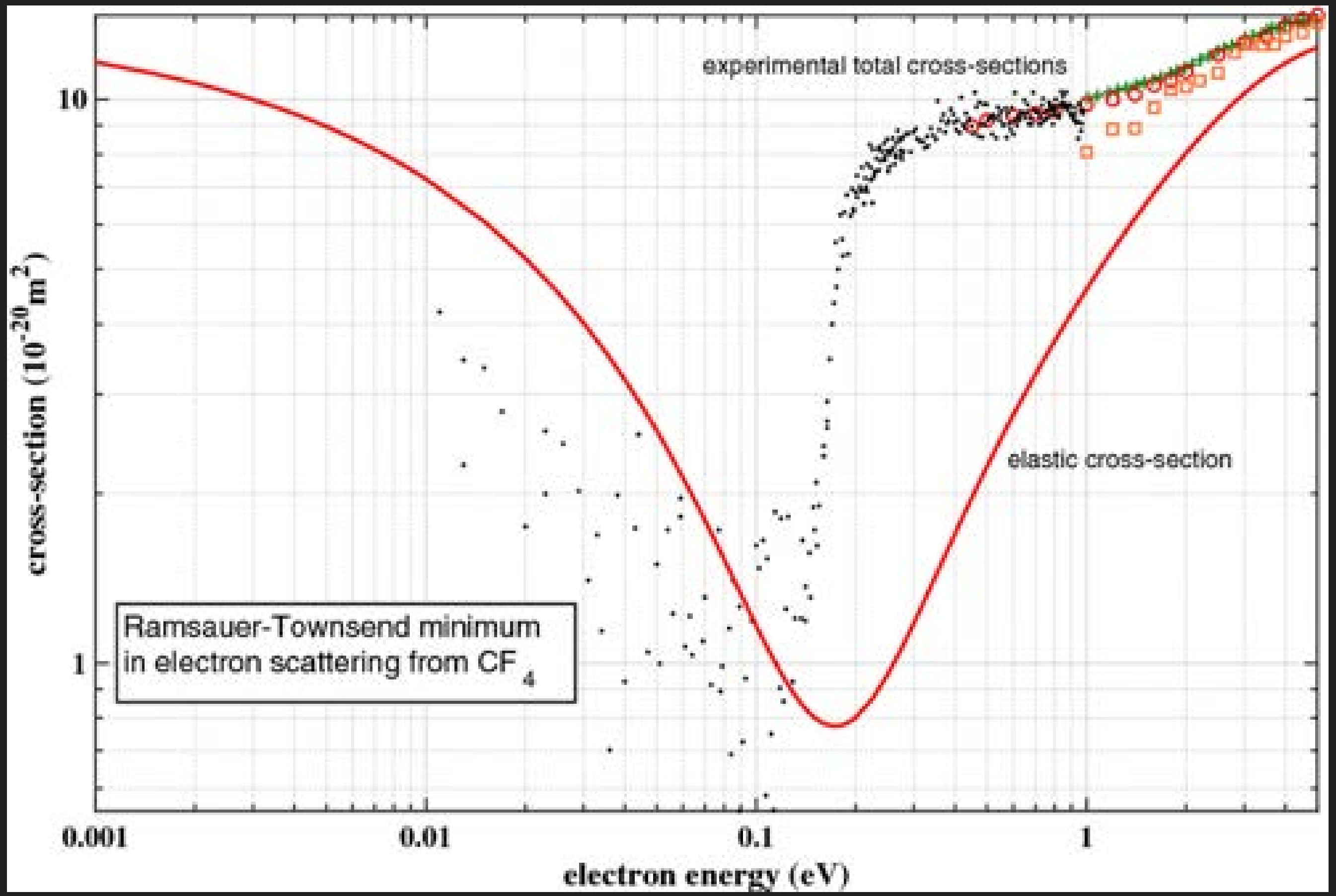
Coder en python des algorithmes de résolution d'équation différentielle / états stationnaires

Comparer les prédictions avec les mesures expérimentales et **reprendre** avec un modèle plus réaliste

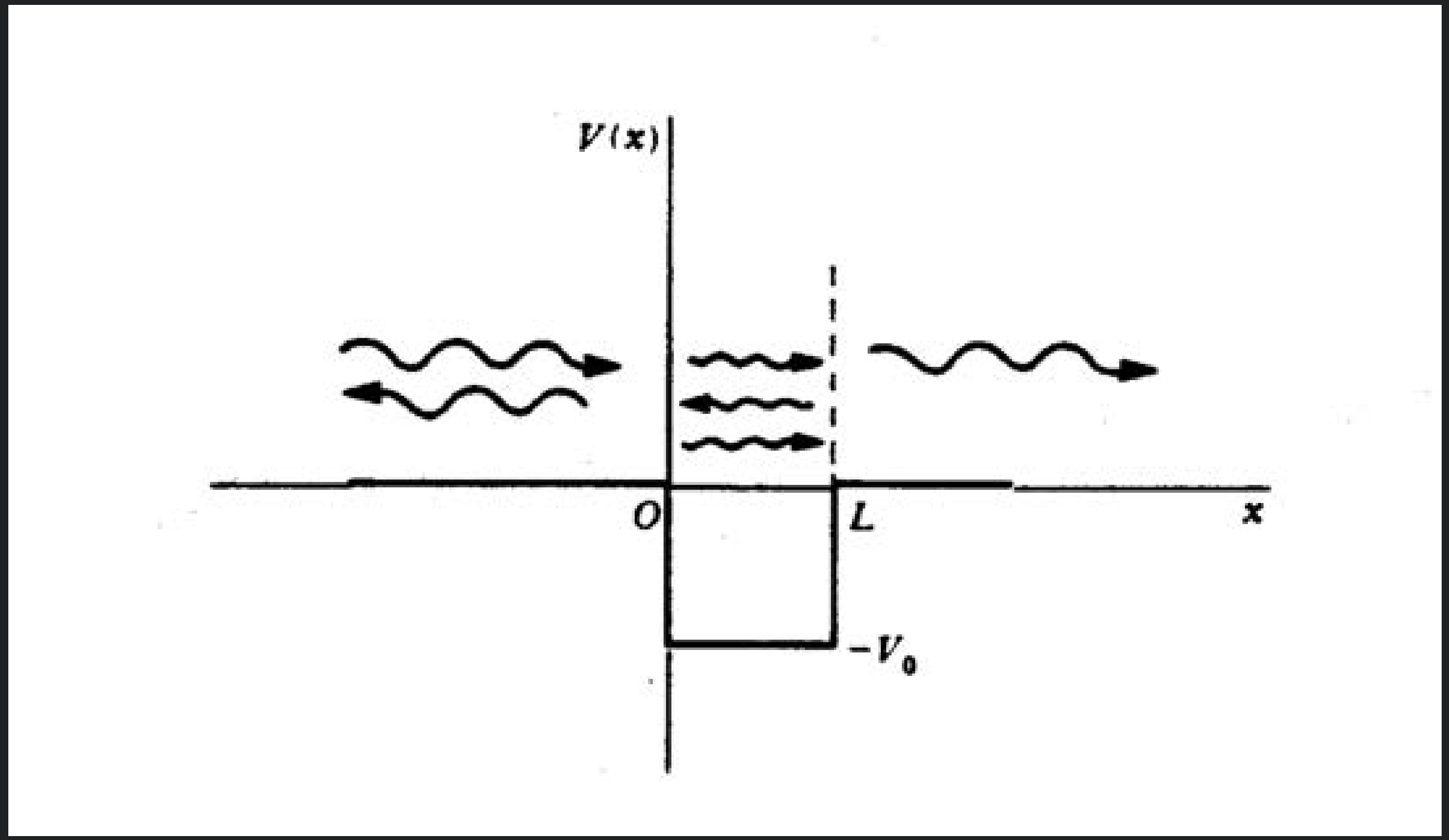
3. COMPRÉHENSION DU PHÉNOMÈNE ET RÉSOLUTION ANALYTIQUE

Compréhension du phénomène et modèle utilisé

Phénomène quantique où une particule incidente traverse un potentiel avec une probabilité de transmission élevée à basse énergie, là où on attendrait plutôt une forte diffusion.



Notre modèle : Puit fini à une dimension



Résolution analytique du problème

Noms : Desmarquet Timothé / Audren Nino
Groupe : MI1-G

Équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

avec $V(x)$:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \\ -V_0 & \text{pour } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{pour } x > a \end{cases}$$

Région 1 :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_1(x)}{\partial x^2} = E\Psi_1(x) \Rightarrow \frac{\partial^2\Psi_1(x)}{\partial x^2} = -k^2\Psi_1(x)$$

où $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, donc $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

Solution générale :

$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

Région 2 :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_2(x)}{\partial x^2} - V_0\Psi_2(x) = E\Psi_2(x) \Rightarrow \frac{\partial^2\Psi_2(x)}{\partial x^2} = -K^2\Psi_2(x)$$

où $K = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$.

Solution générale :

$$\Psi_2(x) = A_2 e^{iKx} + B_2 e^{-iKx}$$

Région 3 :

Même équation que région 1, mais sans onde incidente :

$$\Psi_3(x) = A_3 e^{ikx}$$

Conditions aux bords :

À $x = 0$:

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \Rightarrow A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \quad (1)$$

$$\frac{\partial\Psi_1}{\partial x}(0) = \frac{\partial\Psi_2}{\partial x}(0) \Rightarrow ikA_1 - ikB_1 = iKA_2 - iKB_2$$

$$\Rightarrow k(A_1 - B_1) = K(A_2 - B_2) \quad (2)$$

À $x = a$:

$$\Psi_2(a) = \Psi_3(a) \Rightarrow A_2 e^{iKa} + B_2 e^{-iKa} = A_3 e^{ika} \quad (3)$$

$$\frac{\partial\Psi_2}{\partial x}(a) = \frac{\partial\Psi_3}{\partial x}(a) \Rightarrow iKA_2 e^{iKa} - iKB_2 e^{-iKa} = ikA_3 e^{ika}$$

$$\Rightarrow K(A_2 e^{iKa} - B_2 e^{-iKa}) = kA_3 e^{ika} \quad (4)$$

Calcul de la transmission $T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2$:

À partir de (3) :

$$B_2 e^{-iKa} = A_3 e^{ika} - A_2 e^{iKa}$$

Injection dans (4) :

$$K(A_2 e^{iKa} - (A_3 e^{ika} - A_2 e^{iKa})) = kA_3 e^{ika}$$

$$2KA_2 e^{iKa} = (k + K)A_3 e^{ika}$$

$$A_2 = \frac{k+K}{2K} A_3 e^{i(ka-Ka)} \quad (5)$$

Puis :

$$\begin{aligned} B_2 e^{-iKa} &= A_3 e^{ika} - A_2 e^{iKa} \\ &= A_3 e^{ika} - \frac{k+K}{2K} A_3 e^{i(ka-Ka)} e^{iKa} \\ &= A_3 e^{ika} \left(1 - \frac{k+K}{2K}\right) \\ &= A_3 e^{ika} \left(\frac{K-k}{2K}\right) \end{aligned}$$

$$B_2 = \frac{K-k}{2K} A_3 e^{i(ka+Ka)} \quad (6)$$

Utilisation de (1) et (2) :

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$A_1 - B_1 = \frac{K}{k}(A_2 - B_2)$$

Addition :

$$2A_1 = A_2\left(1+\frac{K}{k}\right) + B_2\left(1-\frac{K}{k}\right)$$
$$2kA_1 = (k+K)A_2 + (k-K)B_2$$

Substitution de (5) et (6) :

$$2kA_1 = \frac{A_3}{2K}\left[(k+K)^2 e^{i(ka-Ka)} - (k-K)^2 e^{i(ka+Ka)}\right]$$
$$= \frac{A_3}{2K}e^{ika}\left[(k+K)^2 e^{-iKa} - (k-K)^2 e^{iKa}\right]$$

Développement :

$$(k^2+2kK+K^2)e^{-iKa} - (k^2-2kK+K^2)e^{iKa}$$
$$= (k^2+K^2)(e^{-iKa}-e^{iKa}) + 2kK(e^{-iKa}+e^{iKa})$$

Avec les identités d'Euler :

$$e^{-iKa}-e^{iKa} = -2i\sin(Ka), \quad e^{-iKa}+e^{iKa} = 2\cos(Ka)$$

Donc :

$$2kA_1 = \frac{A_3}{2K}e^{ika}\left[-2i(k^2+K^2)\sin(Ka) + 4kK\cos(Ka)\right]$$
$$\frac{A_1}{A_3} = e^{ika}\left[\cos(Ka) - i\frac{k^2+K^2}{2kK}\sin(Ka)\right]$$

Ainsi :
Comme $|e^{ika}|^2 = e^{ika}\cdot e^{-ika} = 1$, on a $|e^{ika}|^2 = 1$.

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{1}{\left|\frac{A_1}{A_3}\right|^2} = \frac{1}{\cos^2(Ka) + \left(\frac{k^2+K^2}{2kK}\right)^2\sin^2(Ka)}$$

Utilisation de $\cos^2(Ka) = 1-\sin^2(Ka)$:

$$T = \frac{1}{1+\sin^2(Ka)\left[\left(\frac{k^2+K^2}{2kK}\right)^2-1\right]}$$

$$T = \frac{1}{1+\sin^2(Ka)\left[\frac{(k^2-K^2)^2}{4k^2K^2}\right]} = \frac{4k^2K^2}{4k^2K^2+(k^2-K^2)^2\sin^2(Ka)}$$

Quand la transmission est maximale :

La transmission est maximale ($T=1$) lorsque :

$$\sin^2(Ka) = 0 \Rightarrow Ka = n\pi \Rightarrow K = \frac{n\pi}{a}$$

$$\frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} = \frac{n\pi}{a} \Rightarrow E+V_0 = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \Rightarrow E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} - V_0$$

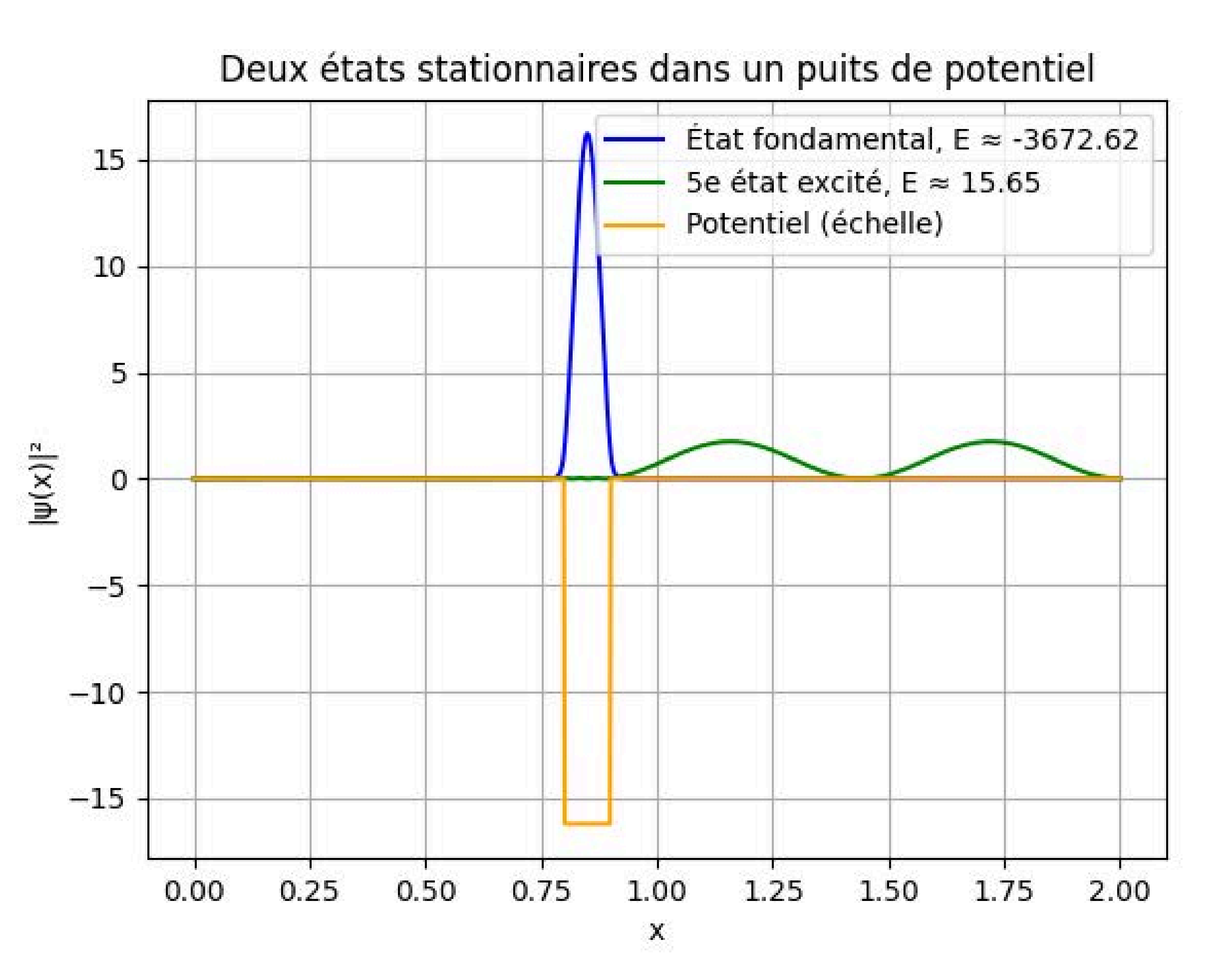
Ces énergies correspondent aux résonances, avec transmission parfaite (sans réflexion).

4. MÉTHODES NUMÉRIQUES UTILISÉES ET RÉSULTATS

CY TECH

Densité de probabilité des états stationnaires dans un puit de potentiel

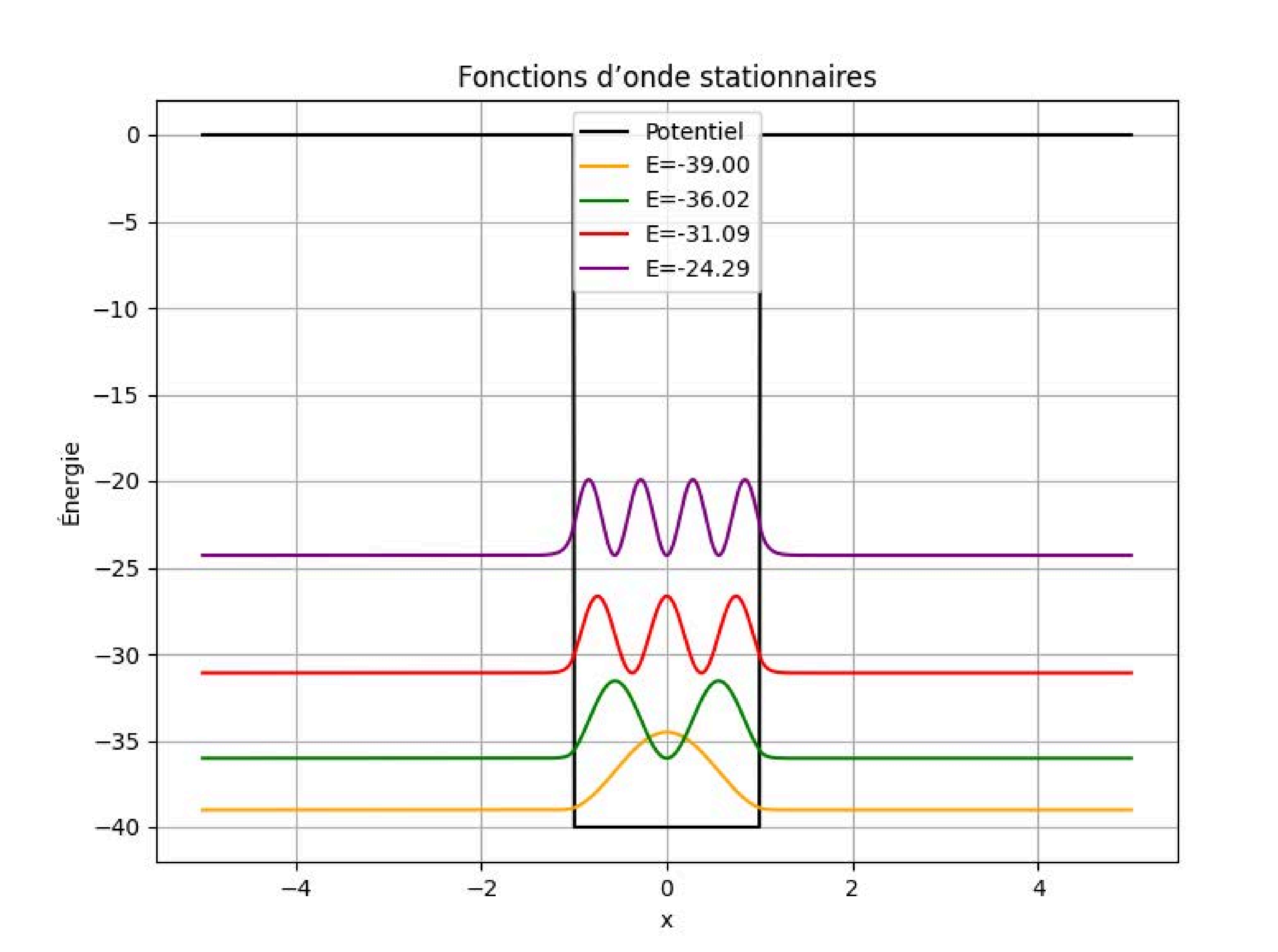
Code : etat_stat_densité.py




```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

#plan
L = 2.0
nx = 1000
dx = L / nx
x = np.linspace(0, L, nx)

#Potentiel : puits entre x = 0.8 et 0.9
V0 = -400
V = np.zeros(nx)
V[(x >= 0.8) & (x <= 0.9)] = V0

#hamiltonien
coeff = 1 / (2 * dx**2)
main_diag = np.ones(nx) * (2 * coeff) + V
off_diag = np.ones(nx - 1) * (-coeff)
H = np.diag(main_diag) + np.diag(off_diag, 1) + np.diag(off_diag, -1)

#Diagonalisation du hamiltonien
E, psi = np.linalg.eigh(H)

#Etat propres
psi0 = psi[:, 0]
psi1 = psi[:, 1]
psi0 /= np.sqrt(np.sum(psi0**2) * dx)
psi1 /= np.sqrt(np.sum(psi1**2) * dx)

#Tracé des courbes
plt.plot(x, psi0**2, label=f"État fondamental, E ≈ {E[0]:.2f}", color="blue")
plt.plot(x, psi1**2, label=f"1er état excité, E ≈ {E[1]:.2f}", color="green")
plt.plot(x, V / np.abs(V0) * np.max(psi0**2), label="Potentiel (échelle)", color="orange")
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("|ψ(x)|²")
plt.title("Deux premiers états stationnaires dans un puits de potentiel")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

Fonctions d’onde stationnaires et niveaux d’énergie quantifiés

Code : etat_stat_énergie.py

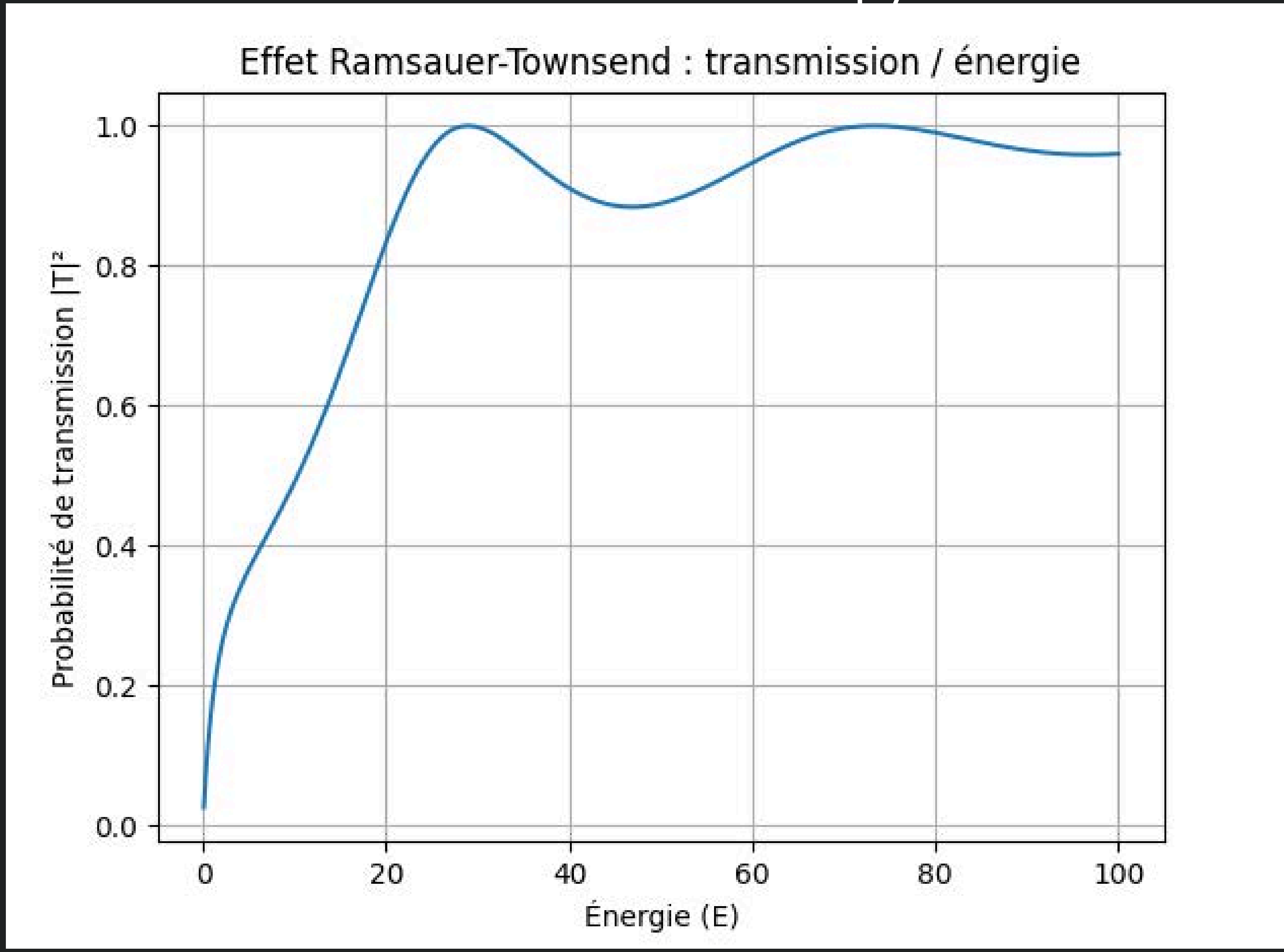



```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

L = 10.0
nx = 1000
dx = L / nx
x = np.linspace(-L/2, L/2, nx)

#Potentiel : puits entre -1 et 1
V0 = -400
V = np.zeros(nx)
V[(x >= -1) & (x <= 1)] = V0

#hamiltonien
coeff = 1 / (2 * dx**2)
main_diag = np.ones(nx) * (2 * coeff) + V
off_diag = np.ones(nx - 1) * (-coeff)
H = np.diag(main_diag) + np.diag(off_diag, 1) + np.diag(off_diag, -1)

#Diagonalisation du hamiltonien
E, psi = np.linalg.eigh(H)

#Tracé des courbes
plt.figure(figsize=(8,6))
plt.plot(x, V, color='black', label='Potentiel')

n_states = 5  # Nombre d'états à afficher
colors = ['orange', 'green', 'red', 'purple', 'blue']

for n in range(n_states):
    psi_n = psi[:, n]
    psi_n /= np.sqrt(np.sum(psi_n**2) * dx)  # normalisation
    scale = 5  # pour étirer visuellement la fonction d'onde
    plt.plot(x, psi_n**2 * scale + E[n], label=f"E={E[n]:.2f}", color=colors[n])

plt.xlabel("x")
plt.ylabel("Énergie")
plt.title("Fonctions d'onde stationnaires")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

Simulation numérique de la transmission quantique

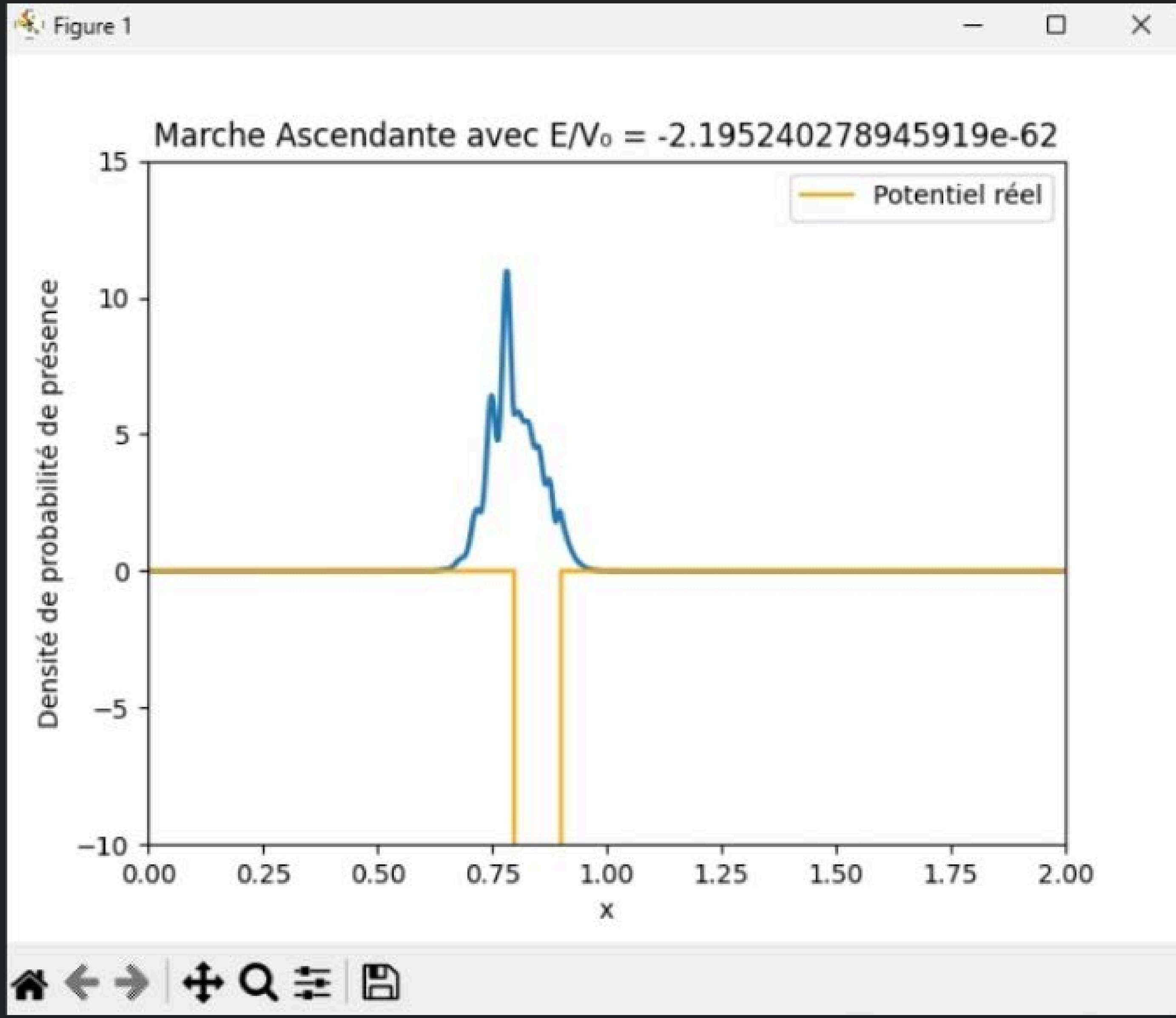
Code : courbe_transmission.py

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

#Const
V0 = 50      # Profondeur du puits
a = 1        # Largeur du puits
E_vals = np.linspace(0.1, 100, 500)

def transmission(E):
    k = np.sqrt(2 * E)
    K = np.sqrt(2 * (E + V0))

    num = 4 * k**2 * K**2
    denom = (k**2 - K**2)**2 * np.sin(K * a)**2 + 4 * k**2 * K**2

    return num / denom

T_vals = transmission(E_vals)

plt.plot(E_vals, T_vals)
plt.xlabel("Énergie (E)")
plt.ylabel("Probabilité de transmission |T|²")
plt.title("Effet Ramsauer-Townsend : transmission / énergie")
plt.grid(True)
plt.show()
```



Propagation du paquet d'onde à travers le puit de potentiel

Code : propagation_paquet_onde.py



À une énergie proche du maximum de transmission, le paquet traverse presque entièrement le puits : visualisation dynamique de l'effet Ramsauer-Townsend. Cette approche illustre la nature ondulatoire et interférentielle du phénomène, en complément de la courbe de transmission.

https://youtu.be/fhbSaT98ToI

5. COMPARAISON DES RÉSULTATS ET LIMITES

CY TECH

COMPARAISON

Résultats expérimentaux

Le fait que notre modèle numérique simplifié puisse reproduire la présence de ces maxima de transmission (minima de diffusion) valide notre approche. Cela démontre que les principes fondamentaux de la mécanique quantique, comme la nature ondulatoire et les interférences, sont bien modélisables. Les différences observées (positions et profondeurs des minima) s'expliquent par les simplifications de notre modèle, notamment le potentiel unidimensionnel du puits carré face à une interaction atomique plus complexe en 3D.

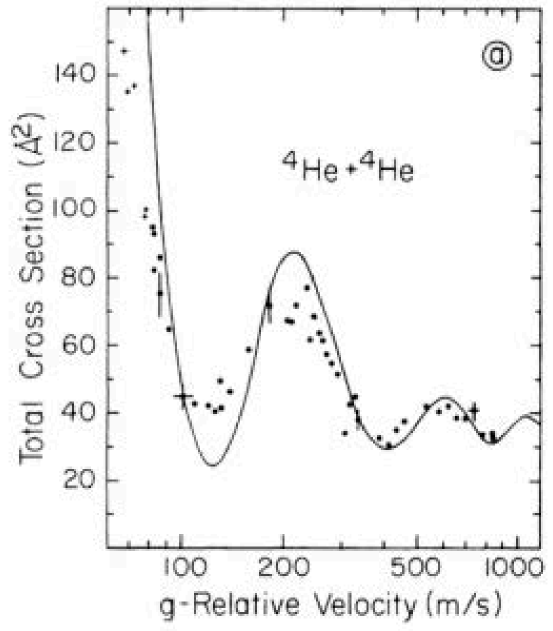
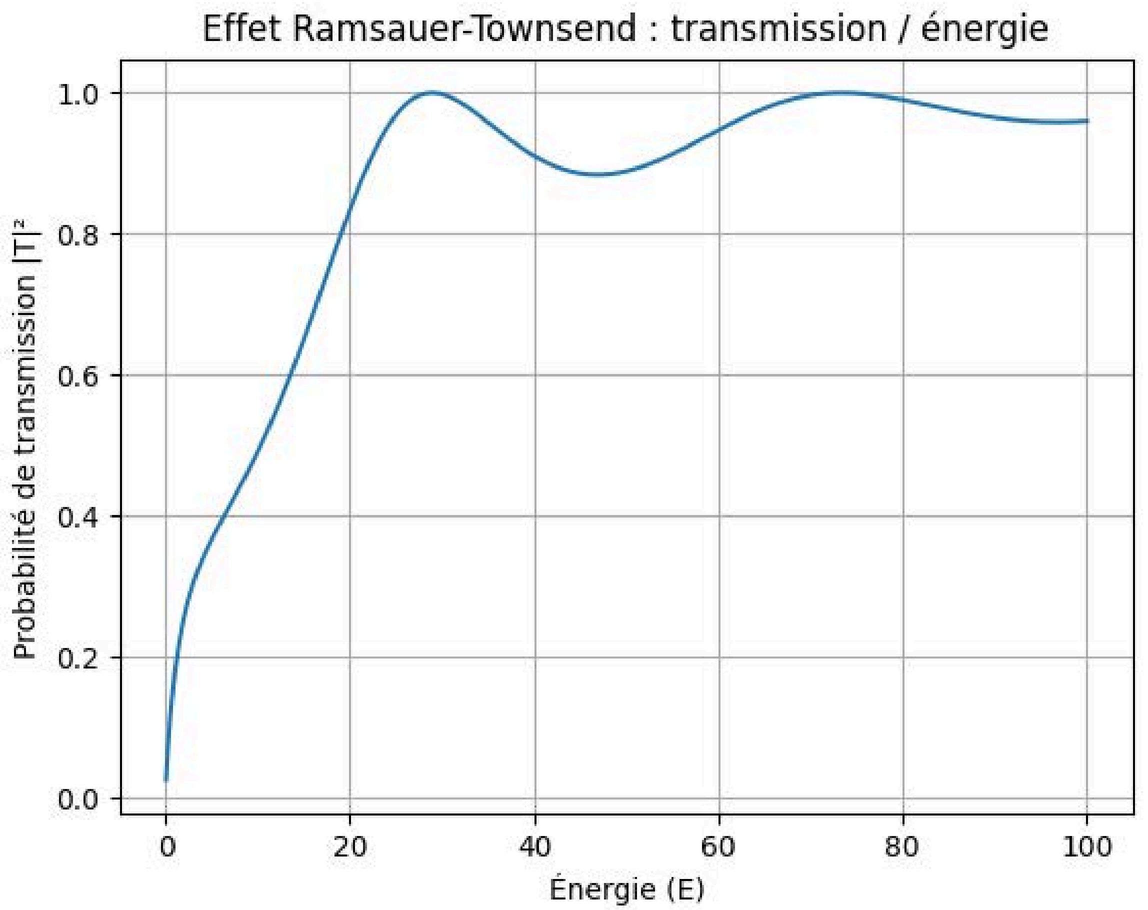


FIGURE 1 – Observation de l'effet Ramsauer–Townsend lors de la collision d'atomes d'hélium 4. Figure issue de [G76].



POINTS POSITIFS ET LIMITES DU MODÈLE

Modèle simplifié

- Approximation raisonnable
- Permet de reproduire l'effet de l'attraction électrostatique

Permet résolution analytique/numérique

- Suffisamment simple une résolution exacte de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

Modèle unidimensionnel

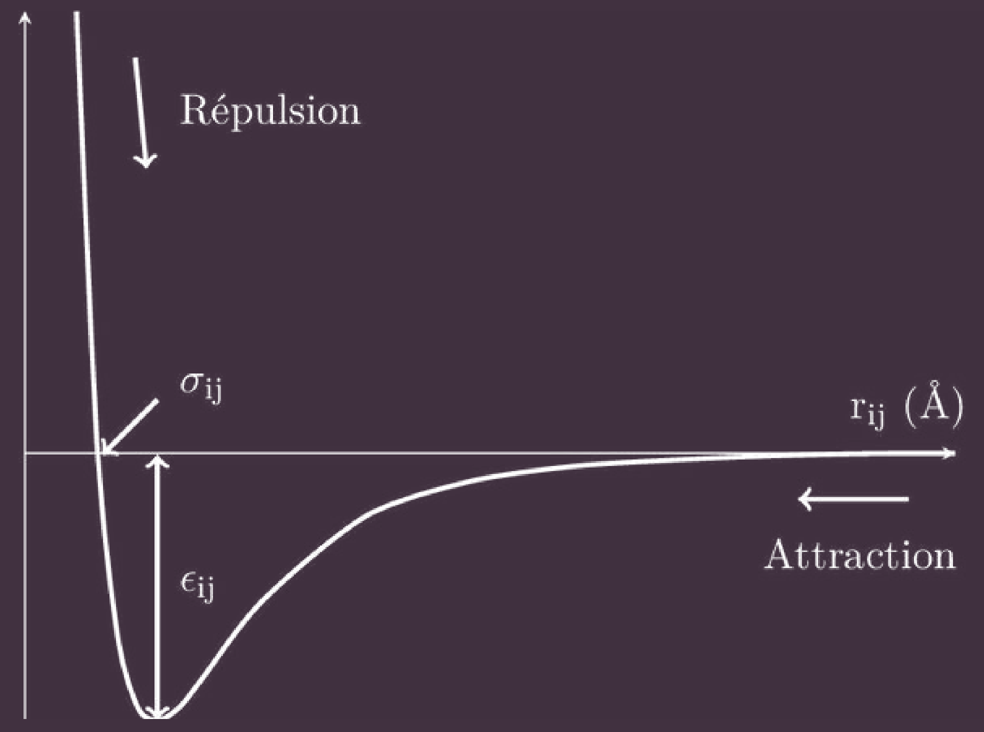
- En réalité, l'espace est en 3D
- Uniquement à une estimation de transmission globale.

Interaction électron-atome simplifiée

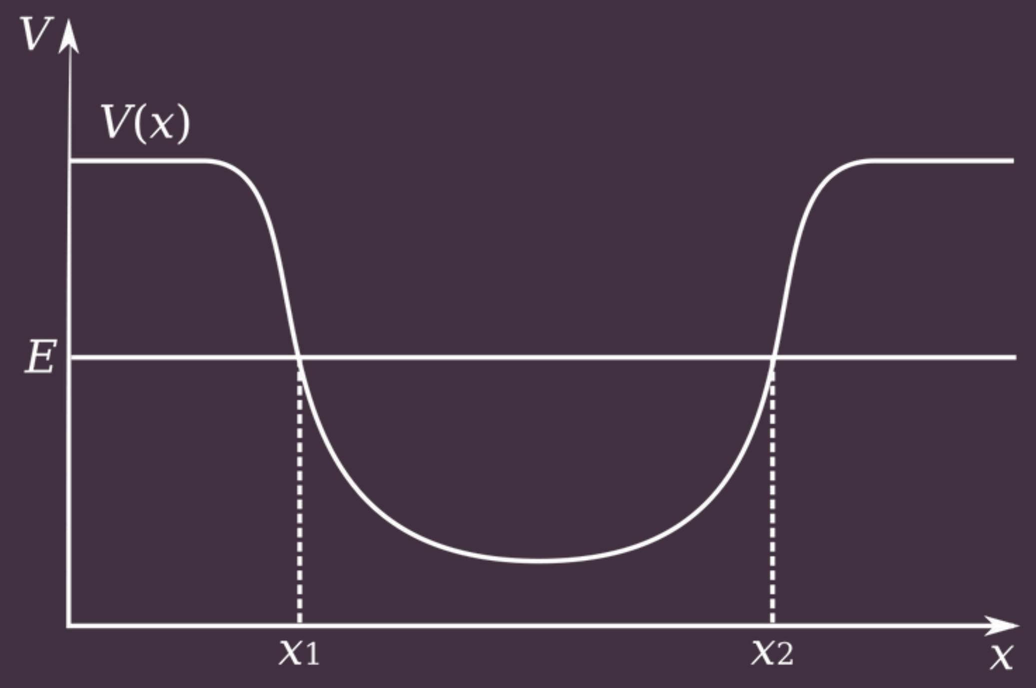
- La structure de l'atome est ignorée : pas de niveaux internes, pas de polarisation.

AUTRES MODÈLES

Modèle de Lennard-Jones



Puit fini gaussien



6. CONCLUSION

CONCLUSION

Ce projet nous a permis de modéliser et de visualiser l'effet Ramsauer–Townsend dans un cadre simple mais révélateur. En simulant numériquement la propagation d'une onde à travers un puit fini, nous avons observé une variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie, et mis en évidence des minima caractéristiques, analogues à ceux observés expérimentalement.

MERCI POUR VOTRE ÉCOUTE