

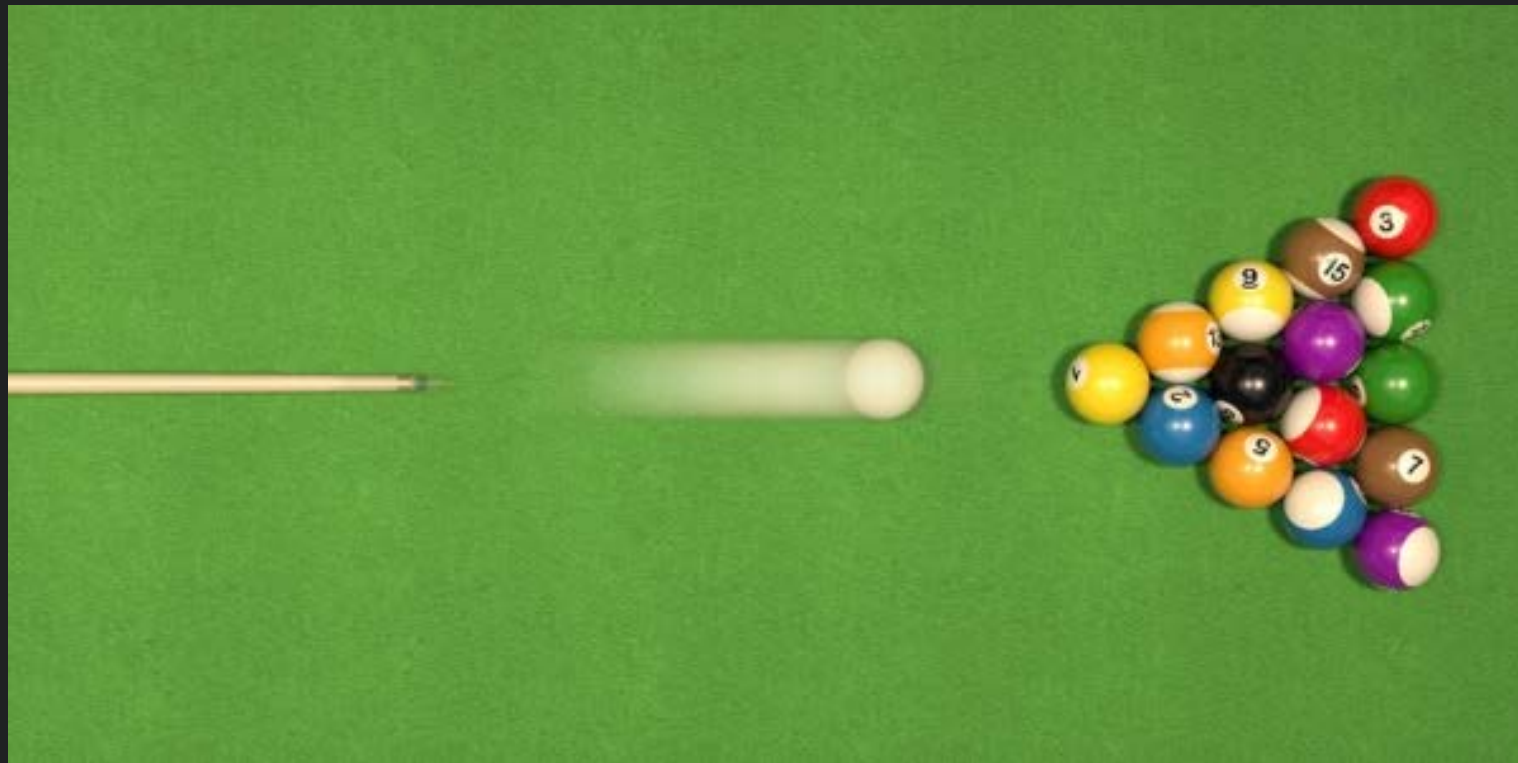
PROJET NUMÉRIQUE PHYSIQUE MODERNE

SOMMAIRE

1. Introduction du projet
2. Objectifs du projet
3. Compréhension du phénomène et résolution analytique
4. Méthodes numériques utilisées et résultats
5. Comparaison des résultats et limites
6. Conclusion

1. INTRODUCTION DU PROJET

En physique à l'échelle macroscopique



En physique à l'échelle microscopique

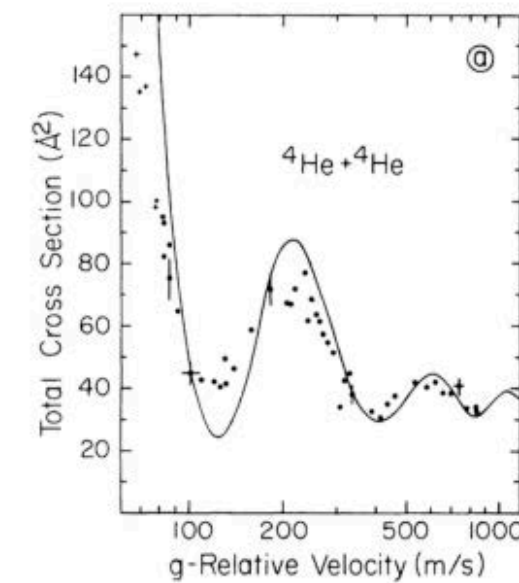
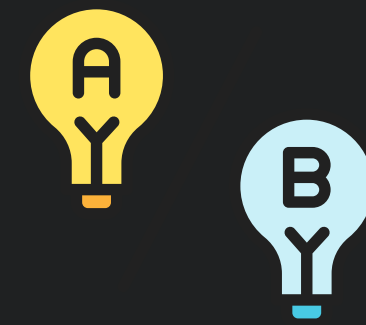


FIGURE 1 – Observation de l'effet Ramsauer-Townsend lors de la collision d'atomes d'hélium 4. Figure issue de [G76].

2. OBJECTIFS DU PROJET

OBJECTIFS



Comprendre l'effet
Ramsauer–Townsend

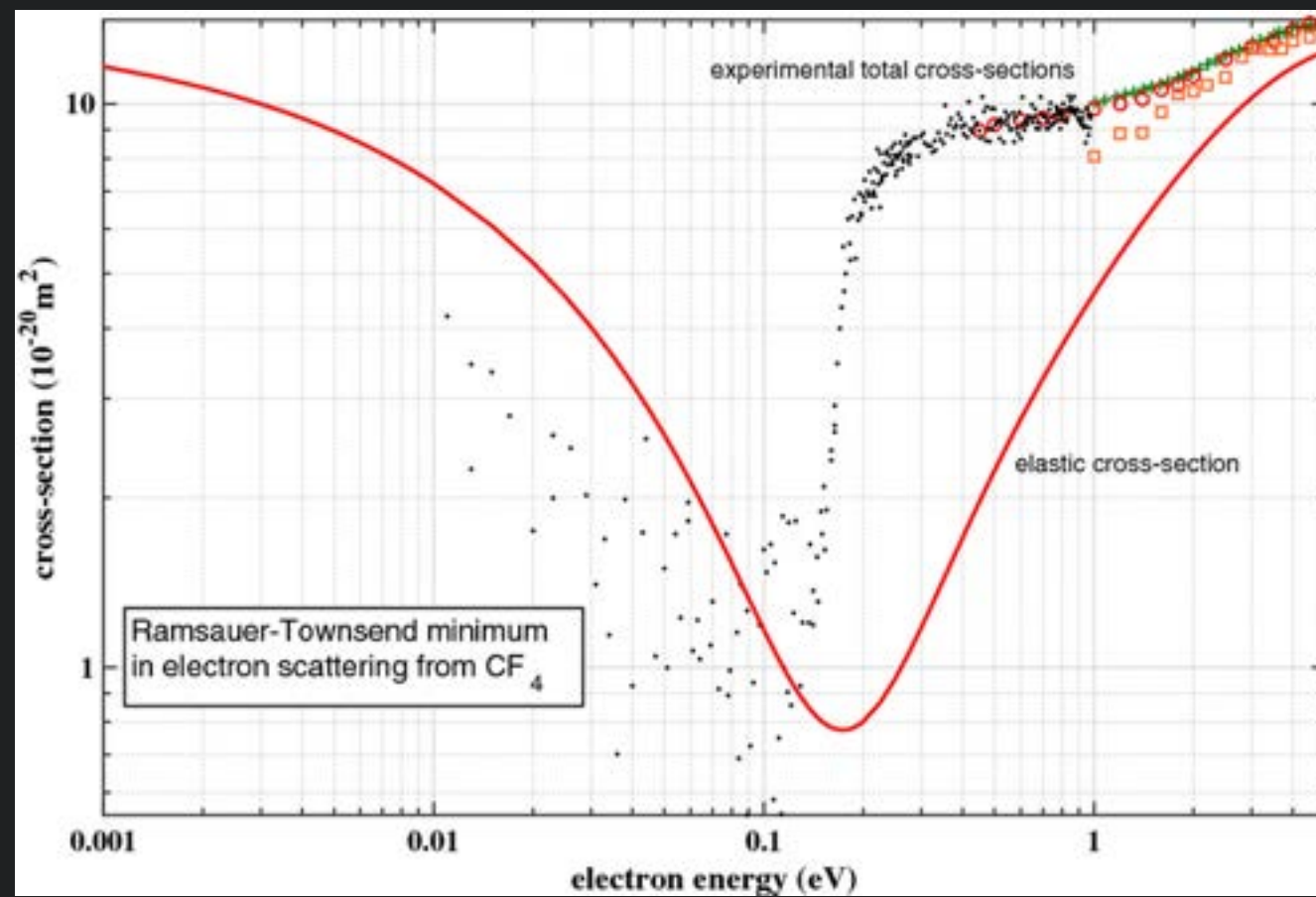
Coder en python des algorithmes
de résolution d'équation
différentielle / états stationnaires

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

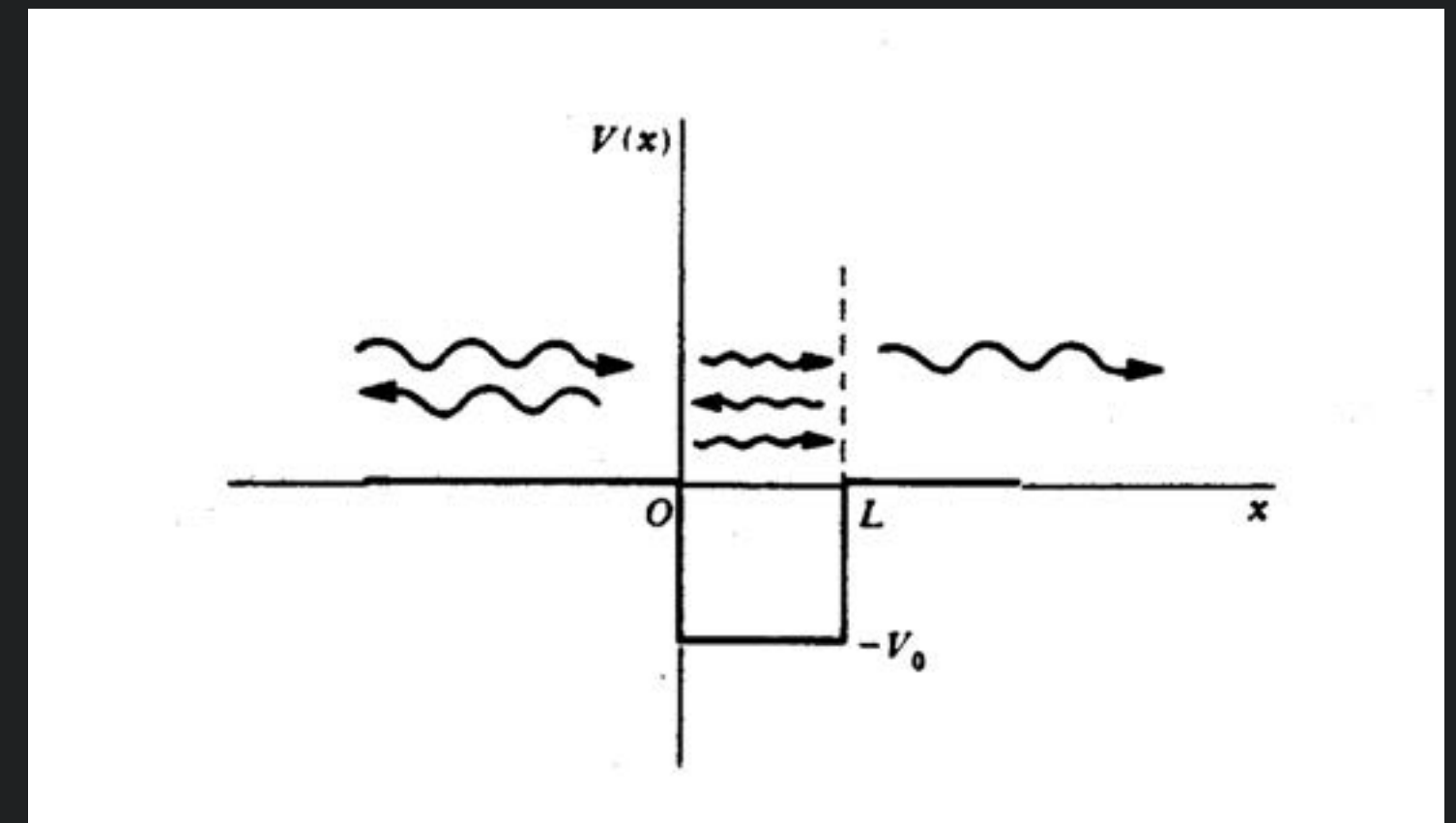
3. COMPRÉHENSION DU PHÉNOMÈNE ET RÉOLUTION ANALYTIQUE

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 $x = 0$:

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_1}{\partial x}(0) &= \frac{\partial \Psi_2}{\partial x}(0) \Rightarrow ikA_1 - ikB_1 = iKA_2 - iKB_2 \\ &\Rightarrow k(A_1 - B_1) = K(A_2 - B_2) \quad (2) \end{aligned}$$

À $x = a$:

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_2}{\partial x}(a) &= \frac{\partial \Psi_3}{\partial x}(a) \Rightarrow iKA_2 e^{iKa} - iKB_2 e^{-iKa} = ikA_3 e^{ika} \\ &\Rightarrow K(A_2 e^{iKa} - B_2 e^{-iKa}) = kA_3 e^{ika} \quad (4) \end{aligned}$$

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) :

$$\begin{aligned} K(A_2 e^{iKa} - (A_3 e^{ika} - A_2 e^{iKa})) &= kA_3 e^{ika} \\ 2KA_2 e^{iKa} &= (k + K)A_3 e^{ika} \\ A_2 &= \frac{k + K}{2K} A_3 e^{i(ka - Ka)} \quad (5) \end{aligned}$$

Puis :

$$\begin{aligned} B_2 e^{-iKa} &= A_3 e^{ika} - A_2 e^{iKa} \\ &= A_3 e^{ika} - \frac{k + K}{2K} A_3 e^{i(ka - Ka)} e^{iKa} \\ &= A_3 e^{ika} \left(1 - \frac{k + K}{2K} \right) \\ &= A_3 e^{ika} \left(\frac{K - k}{2K} \right) \\ B_2 &= \frac{K - k}{2K} A_3 e^{i(ka + Ka)} \quad (6) \end{aligned}$$

Utilisation de (1) et (2) :

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\ A_1 - B_1 &= \frac{K}{k} (A_2 - B_2) \end{aligned}$$

Addition :

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

Substitution de (5) et (6) :

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

Développement :

$$\begin{aligned} (k^2 + 2kK + K^2)e^{-iKa} - (k^2 - 2kK + K^2)e^{iKa} \\ = (k^2 + K^2)(e^{-iKa} - e^{iKa}) + 2kK(e^{-iKa} + e^{iKa}) \end{aligned}$$

Avec les identités d'Euler :

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

Donc :

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

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

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

Quand la transmission est maximale :

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

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

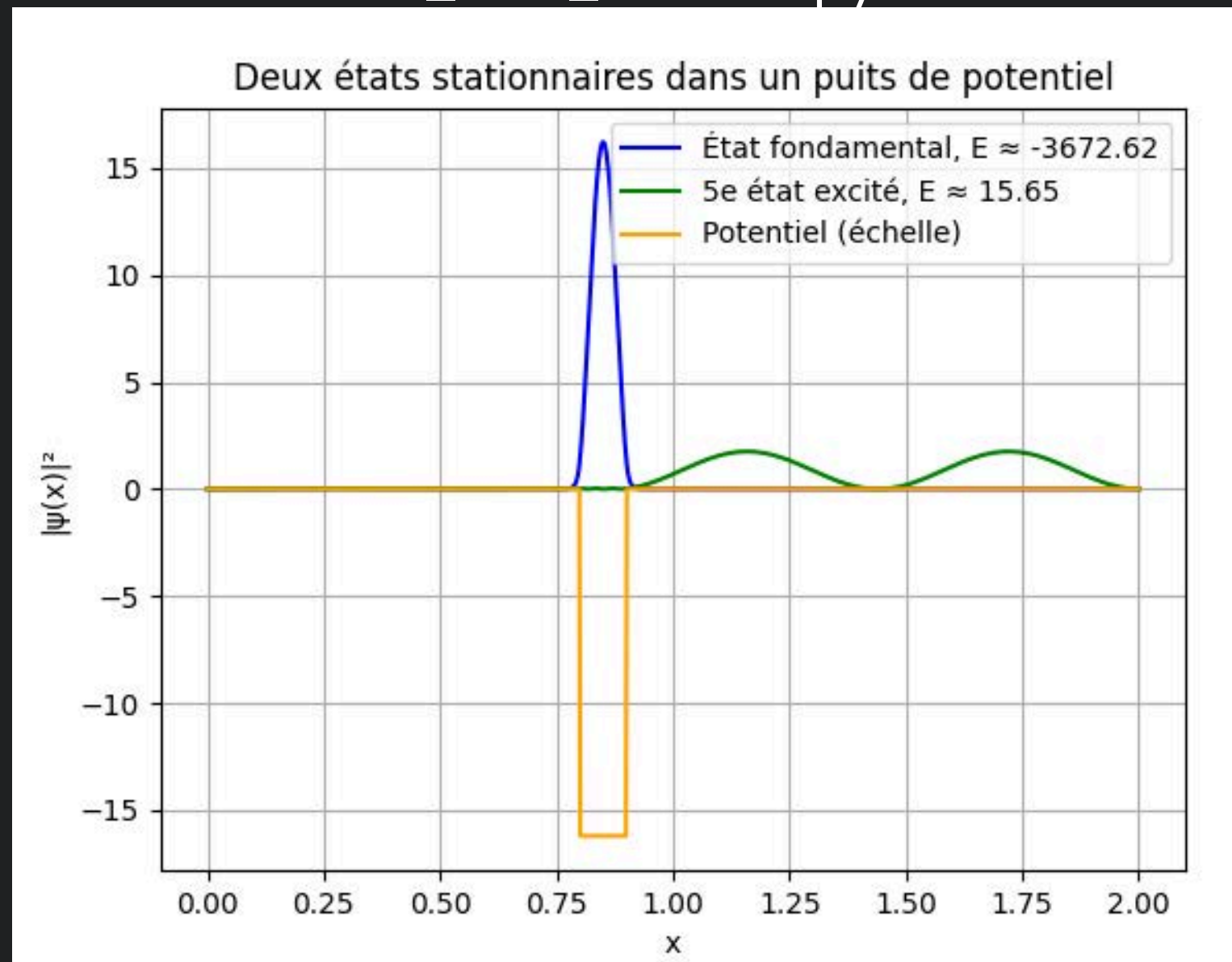
$$\frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} = \frac{n\pi}{a} \Rightarrow E + V_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \Rightarrow E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} - V_0$$

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

4. MÉTHODES NUMÉRIQUES UTILISÉES ET RÉSULTATS

Densité de probabilité des états stationnaires dans un puits de potentiel

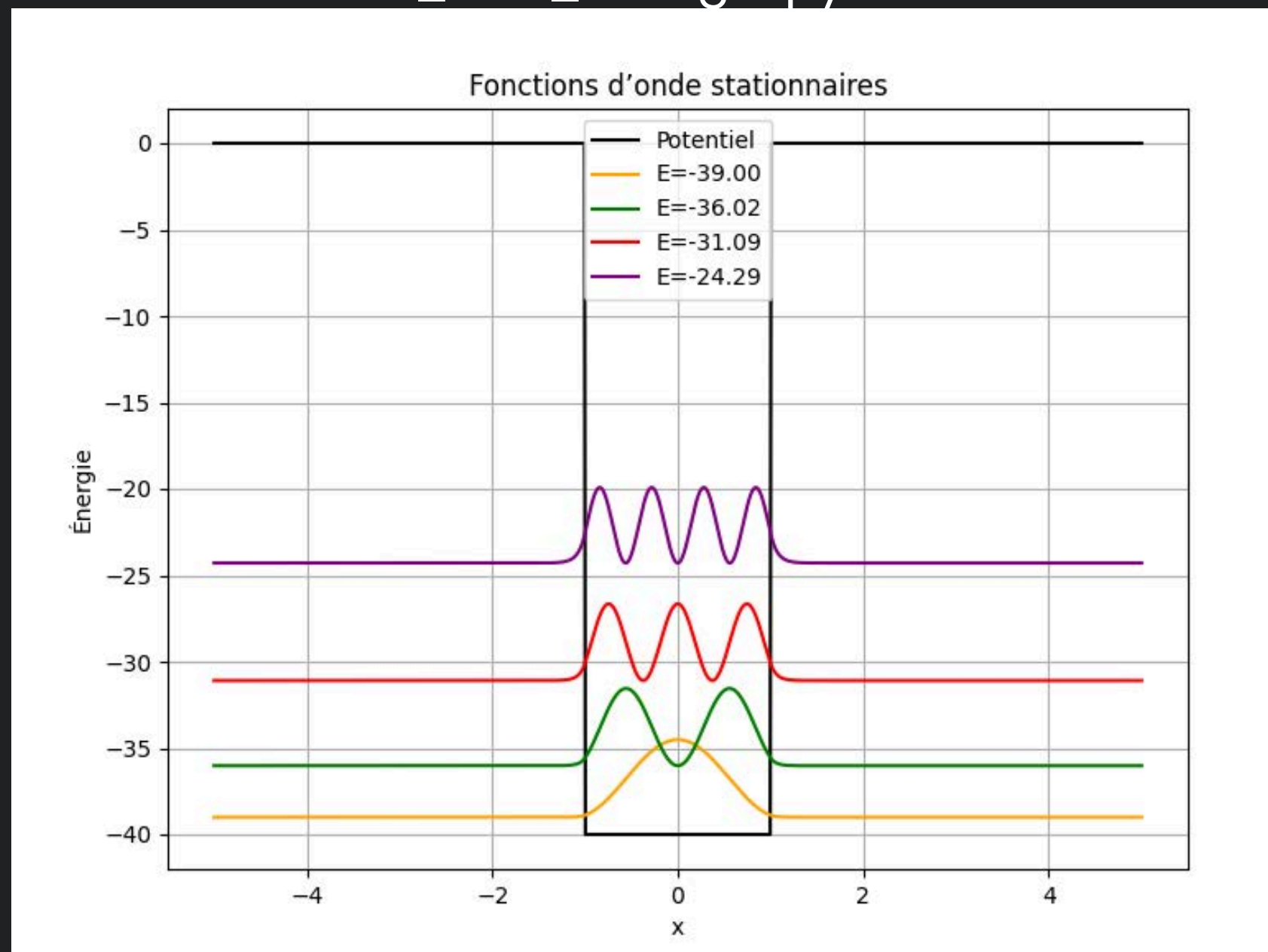
Code : etat_stat_densité.py



```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 #plan
5 L = 2.0
6 nx = 1000
7 dx = L / nx
8 x = np.linspace(0, L, nx)
9
10 #Potentiel : puits entre x = 0.8 et 0.9
11 V0 = -400
12 V = np.zeros(nx)
13 V[(x >= 0.8) & (x <= 0.9)] = V0
14
15 #hamiltonien
16 coeff = 1 / (2 * dx**2)
17 main_diag = np.ones(nx) * (2 * coeff) + V
18 off_diag = np.ones(nx - 1) * (-coeff)
19 H = np.diag(main_diag) + np.diag(off_diag, 1) + np.diag(off_diag, -1)
20
21 #Diagonalisation du hamiltonien
22 E, psi = np.linalg.eigh(H)
23
24 #Etat propres
25 psi0 = psi[:, 0]
26 psi1 = psi[:, 1]
27 psi0 /= np.sqrt(np.sum(psi0**2) * dx)
28 psi1 /= np.sqrt(np.sum(psi1**2) * dx)
29
30 #Tracé des courbes
31 plt.plot(x, psi0**2, label=f"État fondamental, E = {E[0]:.2f}", color="blue")
32 plt.plot(x, psi1**2, label=f"1er état excité, E = {E[1]:.2f}", color="green")
33 plt.plot(x, V / np.abs(V0) * np.max(psi0**2), label="Potentiel (échelle)", color="orange")
34 plt.xlabel("x")
35 plt.ylabel("|ψ(x)|²")
36 plt.title("Deux premiers états stationnaires dans un puits de potentiel")
37 plt.legend()
38 plt.grid(True)
39 plt.show()
```


Fonctions d'onde stationnaires et niveaux d'énergie quantifiés

Code : etat_stat_énergie.py

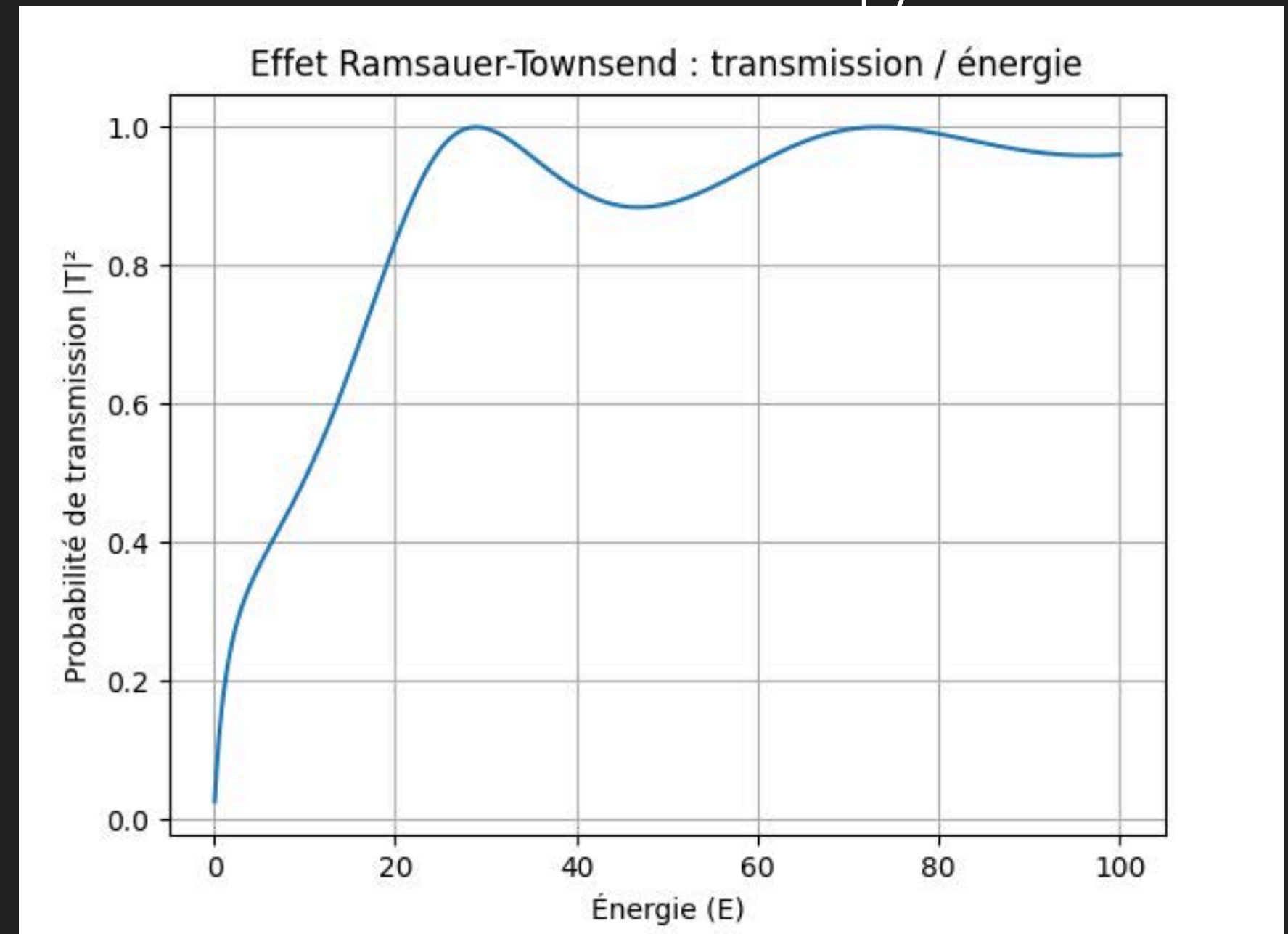


```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 L = 10.0
5 nx = 1000
6 dx = L / nx
7 x = np.linspace(-L/2, L/2, nx)
8
9 #Potentiel : puits entre -1 et 1
10 V0 = -400
11 V = np.zeros(nx)
12 V[(x >= -1) & (x <= 1)] = V0
13
14 #hamiltonien
15 coeff = 1 / (2 * dx**2)
16 main_diag = np.ones(nx) * (2 * coeff) + V
17 off_diag = np.ones(nx - 1) * (-coeff)
18 H = np.diag(main_diag) + np.diag(off_diag, 1) + np.diag(off_diag, -1)
19
20 #Diagonalisation du hamiltonien
21 E, psi = np.linalg.eigh(H)
22
23 #Tracé des courbes
24 plt.figure(figsize=(8,6))
25 plt.plot(x, V, color='black', label='Potentiel')
26
27 n_states = 5 # Nombre d'états à afficher
28 colors = ['orange', 'green', 'red', 'purple', 'blue']
29
30 for n in range(n_states):
31     psi_n = psi[:, n]
32     psi_n /= np.sqrt(np.sum(psi_n**2) * dx) # normalisation
33     scale = 5 # pour étirer visuellement la fonction d'onde
34     plt.plot(x, psi_n**2 * scale + E[n], label=f"E={E[n]:.2f}", color=colors[n])
35
36 plt.xlabel("x")
37 plt.ylabel("Énergie")
38 plt.title("Fonctions d'onde stationnaires")
39 plt.legend()
40 plt.grid(True)
41 plt.show()
```


Simulation numérique de la transmission quantique

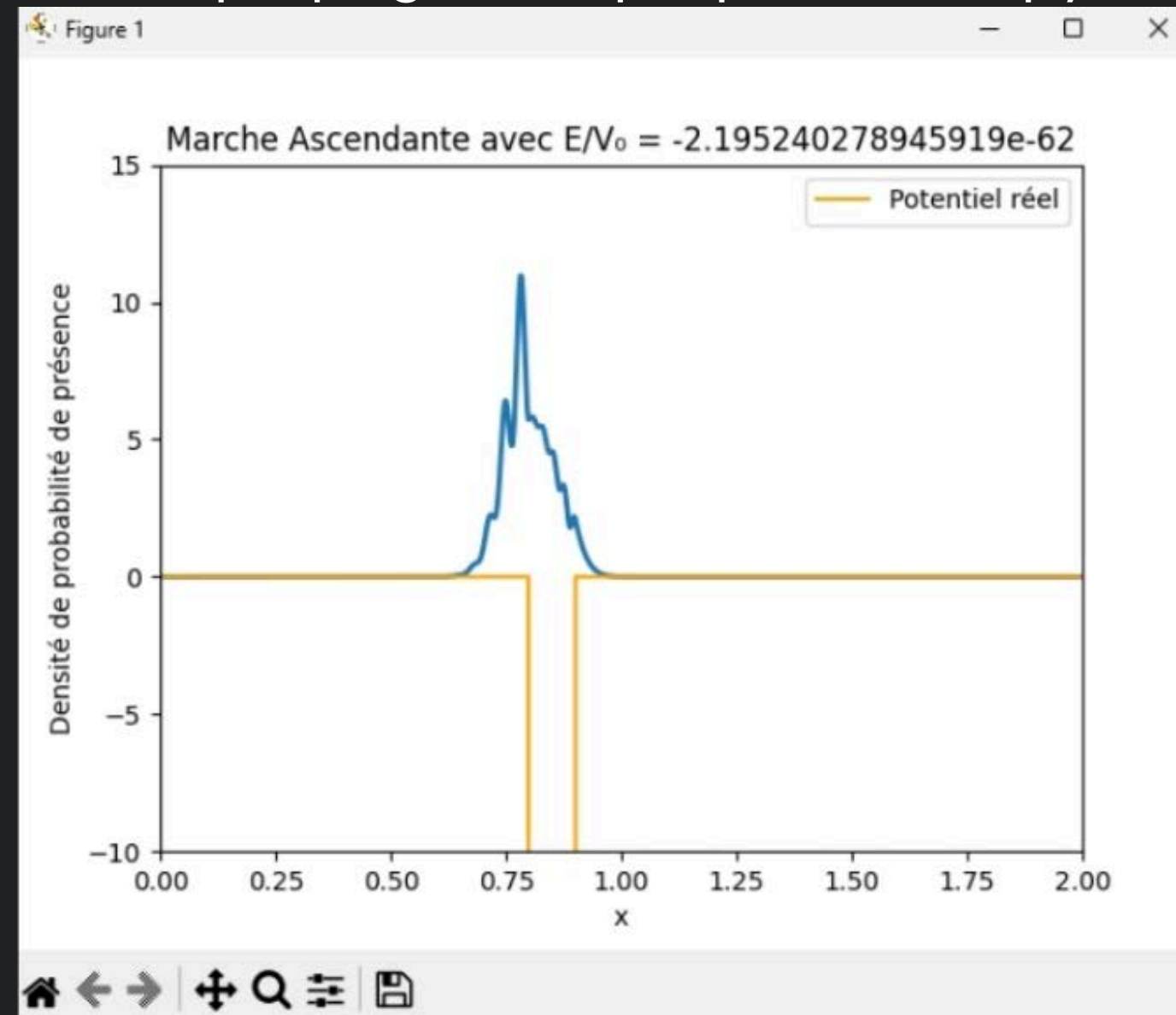
Code : courbe_transmission.py

```
1  import numpy as np
2  import matplotlib.pyplot as plt
3
4  #Const
5  V0 = 50      # Profondeur du puits
6  a = 1        # Largeur du puits
7  E_vals = np.linspace(0.1, 100, 500)
8
9  def transmission(E):
10     k = np.sqrt(2 * E)
11     K = np.sqrt(2 * (E + V0))
12
13     num = 4 * k**2 * K**2
14     denom = (k**2 - K**2)**2 * np.sin(K * a)**2 + 4 * k**2 * K**2
15
16     return num / denom
17
18  T_vals = transmission(E_vals)
19
20  plt.plot(E_vals, T_vals)
21  plt.xlabel("Énergie (E)")
22  plt.ylabel("Probabilité de transmission |T|²")
23  plt.title("Effet Ramsauer-Townsend : transmission / énergie")
24  plt.grid(True)
25  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

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.

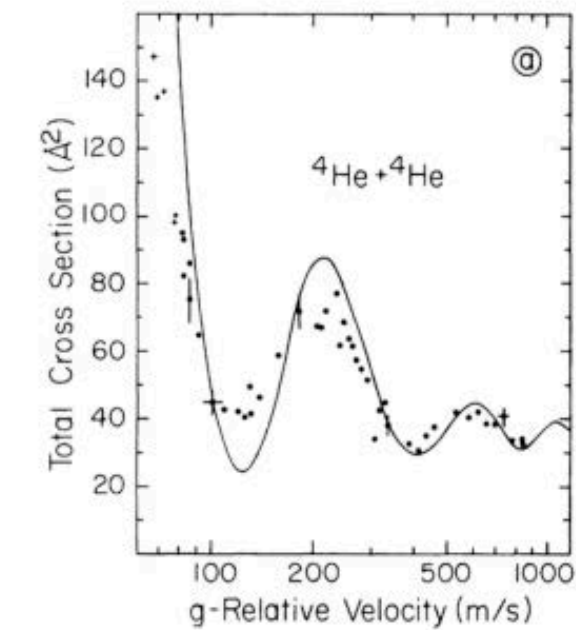
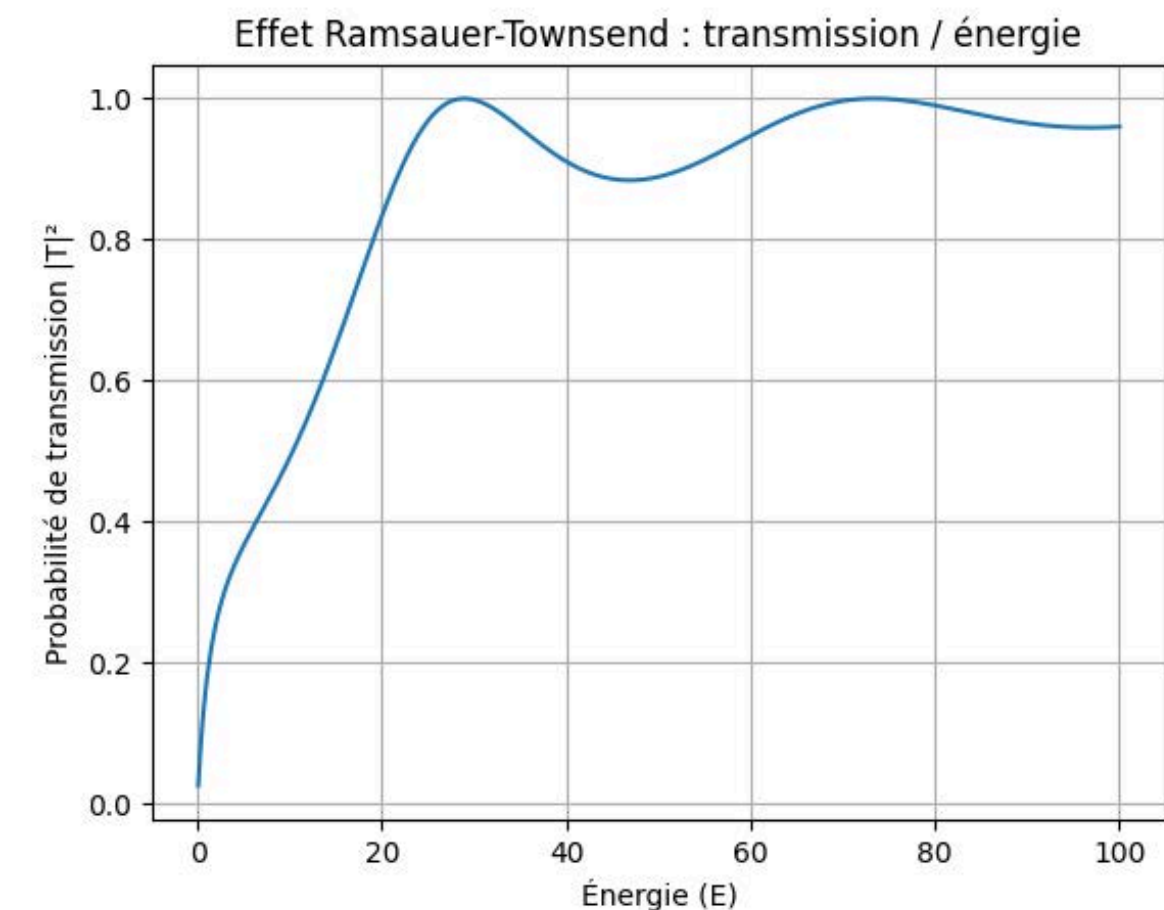
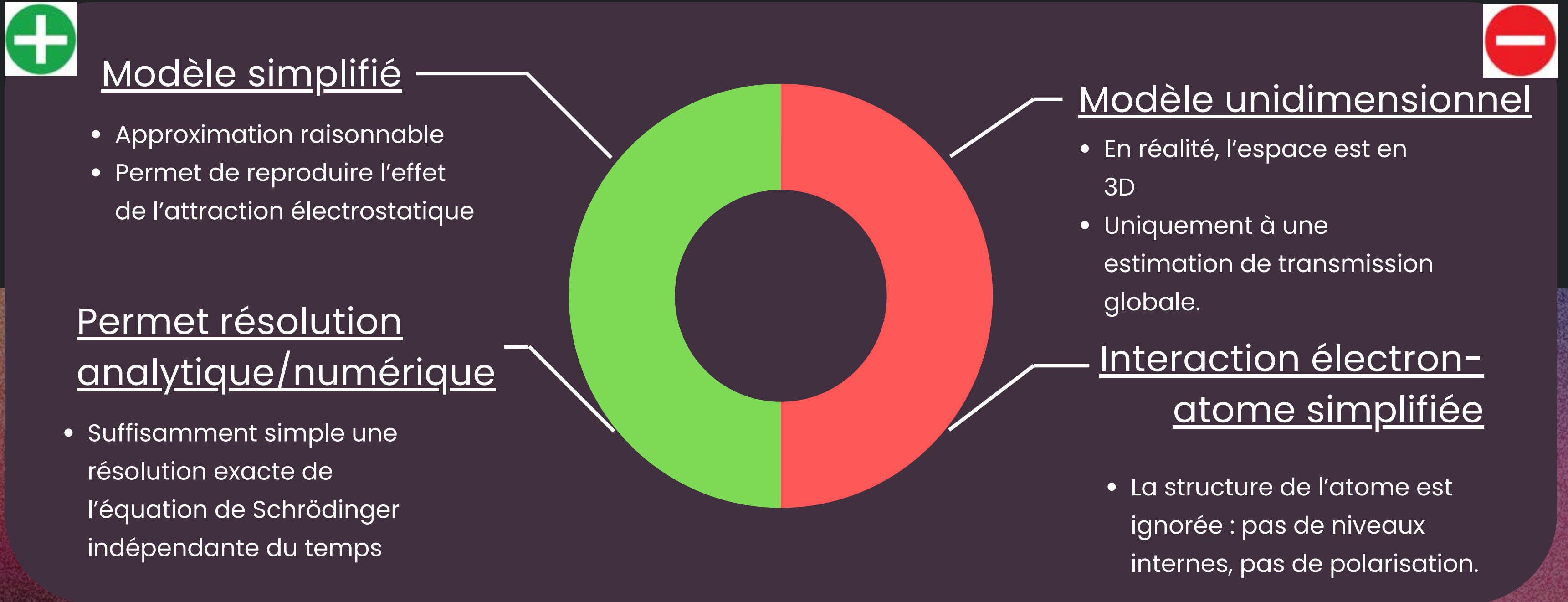


FIGURE 1 – Observation de l'effet Ramsauer-Townsend lors de la collision d'atomes d'hélium 4. Figure issue de [G76].

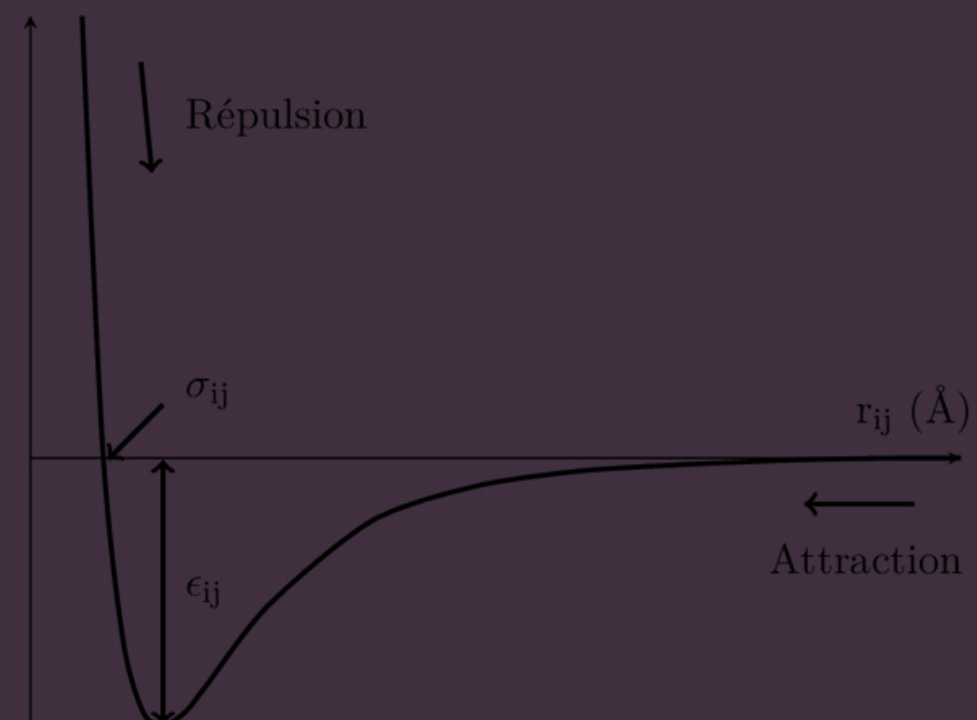


POINTS POSITIFS ET LIMITES DU MODÈLE

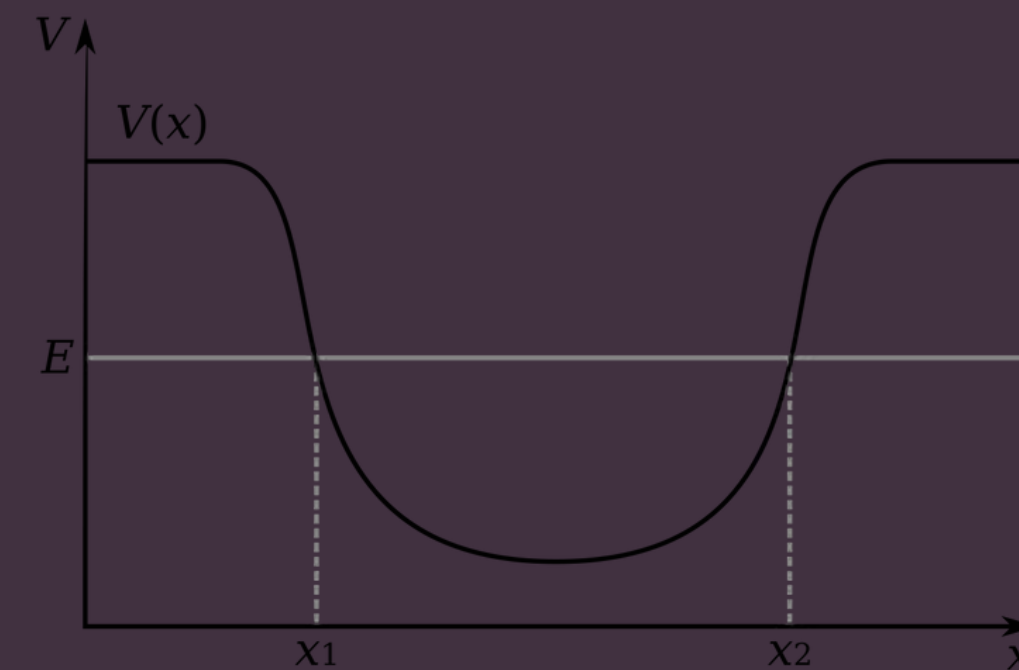


AUTRES MODÈLES

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**