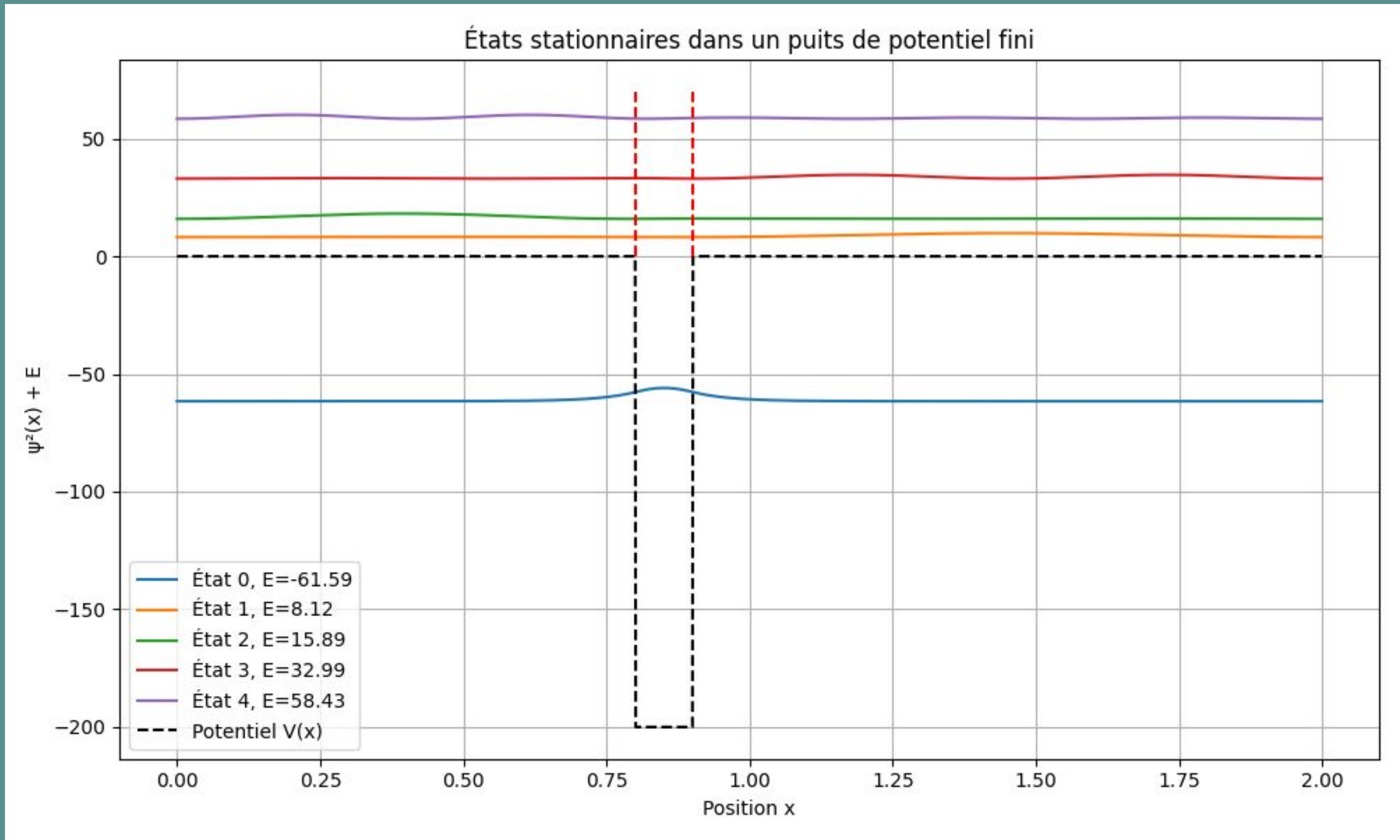
Projet numérique de Physique Moderne

Hugo Tran Phat - Sam Procoppe - Jules Pelissier
MI3

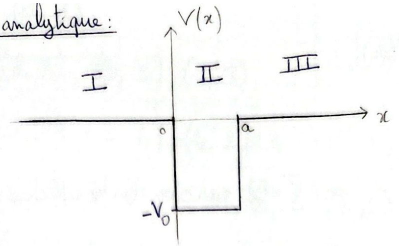
Sommaire:

1. Graphique des états stationnaires



2. Résolution analytique de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

Résolution analytique :



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \quad \text{Région I} \\ -V_0 & \text{si } x \in [0, a] \quad \text{Région II} \\ 0 & \text{si } x > a \quad \text{Région III} \end{cases}$$

Equation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) = E\,\phi(x) \qquad (1)$$

· Région I :

$$(1) \Longrightarrow \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E\,\phi(x)$$

$$\Longrightarrow \phi''(x) + k^2\phi(x) = 0 \qquad \text{avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\rightarrow \boxed{\phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}}$$

Région II :

$$(1) \Longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} - V_0\phi(x) = E\phi(x)$$

$$\Longrightarrow \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + (E+V_0)\frac{2m}{\hbar^2}\phi(x) = 0$$

$$\Longrightarrow \phi''(x) + q^2\phi(x) = 0 \qquad \text{avec } q = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$$

$$\rightarrow \boxed{\phi(x) = C e^{iqx} + D e^{-iqx}}$$

· Région III :

$$(1) \Longrightarrow \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E\phi(x)$$

$$\Longrightarrow \phi''(x) + k^2\phi(x) = 0$$

$$\rightarrow \phi(x) = E e^{ikx} + F e^{-ikx}$$ or $F = 0$ car pas d'ondes réfléchies depuis l'infini $(+\infty)$

$$\boxed{\phi(x) = E e^{ikx}}$$

· Continuité :

$$\phi_I(0) = \phi_{II}(0) \quad (1) \qquad \phi_{II}(a) = \phi_{III}(a) \quad (3)$$

$$\phi'_I(0) = \phi'_{II}(0) \quad (2) \qquad \phi'_{II}(a) = \phi'_{III}(a) \quad (4)$$

$$\rightarrow \begin{cases} A + B = C + D & (1) \\ Ak - Bk = Cq - Dq & (2) \\ Ce^{iqa} + De^{-iqa} = Ee^{ika} & (3) \\ qCe^{iqa} - qDe^{-iqa} = kEe^{ika} & (4) \end{cases}$$

Résolution du système →

$$\rightarrow \begin{cases} A + B = C + D & (1) \\ k(A - B) = q(C - D) & (2) \\ Ce^{iqa} + De^{-iqa} = Ee^{ika} & (3) \\ q(Ce^{iqa} - De^{-iqa}) = kEe^{ika} & (4) \end{cases}$$

$*\ (1)\times k \Rightarrow k(A+B) = k(C+D) \quad (5)$

$\bullet\ (5)+(2) \Rightarrow 2kA = C(k+q) + D(k-q)$

$$\rightarrow A = \frac{C(k+q) + D(k-q)}{2k}$$

$\bullet\ (5)-(2) \Rightarrow 2kB = C(k-q) + D(k+q)$

$$\rightarrow B = \frac{C(k-q) + D(k+q)}{2k}$$

$*\ (3)\times q \Rightarrow q(Ce^{iqa} + De^{-iqa}) = qEe^{ika} \quad (6)$

$\bullet\ (6)+(4) \Rightarrow 2qCe^{iqa} = (q+k)Ee^{ika}$

$$\rightarrow C = \frac{(k+q)}{2q} Ee^{ia(k-q)}$$

$\bullet\ (6)-(4) \Rightarrow 2qDe^{-iqa} = (q-k)Ee^{ika}$

$$\rightarrow D = \frac{(q-k)}{2q} Ee^{ia(k+q)}$$

On a l'onde transmise T qui s'écrit : $T = \left|\frac{E}{A}\right|^2$

Or, $A = E\left(\frac{(k+q)^2}{4kq} e^{ia(k-q)} - \frac{(k-q)^2}{4kq} e^{ia(k+q)}\right)$

$$= \frac{Ee^{iak}}{4kq}\left[(k+q)^2 e^{-iaq} - (k-q)^2 e^{iaq}\right]$$

$$= \frac{Ee^{iak}}{4kq}\left[(k+q)^2(\cos(aq) - i\sin(aq)) - (k_1-k_2)^2(\cos(aq) + i\sin(aq))\right]$$

$$= \frac{Ee^{iak}}{4kq}\left[\cos(aq)\left((k+q)^2 - (k-q)^2\right) - i\sin(aq)\left((k+q)^2 + (k-q)^2\right)\right]$$

$$= \frac{Ee^{iak}}{4kq}\left[\cos(aq)\times 4kq - i\sin(aq)(2k^2+2q^2)\right]$$

$$= Ee^{iak}\left[\cos(aq) - i\sin(aq)\left(\frac{k^2+q^2}{2kq}\right)\right]$$

Or, $T = \left|\frac{E}{A}\right|^2 = \frac{|E|^2}{|A|^2}$

Donc, $$T = \frac{1}{\left|e^{iak}\left[\cos(aq) - i\sin(aq)\left(\frac{k^2+q^2}{2kq}\right)\right]\right|^2}$$

$$= \frac{1}{\cos^2(aq) + \sin^2(aq)\left(\frac{k^2+q^2}{2kq}\right)^2}$$

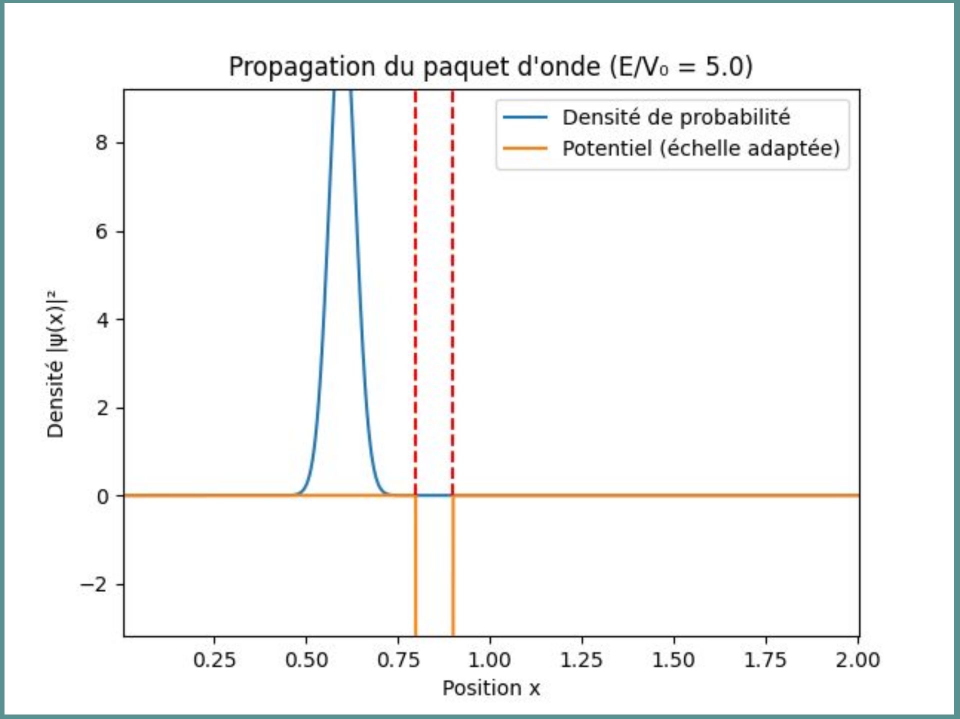
3. Comparaison algorithme et résolution analytique

Lorsqu’une particule est envoyée sur un puits de potentiel, il y a 2 possibilités: soit elle est transmise (traverse), soit elle est réfléchie (rebondit). Et T(E) permet de donner la probabilité qu’elle traverse le puits en fonction de son énergie.
Puis O(E) permet de connaître la déviation de la particule nommée la section efficace de diffusion. Grâce à cela, comparons les prédictions et les mesures expérimentales.

On a observé qu'à certaines énergies bien précises, la fonction de transmission T(E) atteint une valeur proche de 1. Cela signifie que la transmission est quasiment parfaite : les ondes semblent alors en résonance avec la largeur du puits, comme si celui-ci devenait "transparent", ne provoquant aucune déviation.

- Si T(E) est élevé : la particule traverse facilement le puits et O(E) est faible indiquant une faible diffusion
- Si T(E) est faible : la particule est bloquée ou réfléchie par le puits et O(E) est élevé indiquant une forte diffusion

Graphique de la Transmission en fonction de l'Énergie



Approximation pour m et hbarre =1

4. Visualisation de la propagation d'un paquet d'ondes

1) **Paquet d'ondes**

Paquet d'ondes :

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k)\, e^{i(kx - \omega(k)t)}\, dk \quad \text{avec } A(k) \text{ l'amplitude}$$

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \text{relation de dispersion}$$

Un paquet d'ondes est une somme d'états stationnaires ayant des énergies proches.
Chaque composante $e^{i(kx-\omega t)}$ est une onde stationnaire.

4. Visualisation de la propagation d’un paquet d’ondes

2) <u>Quelle est l’importance du paquet d’ondes dans l’effet Ramsauer–Townsend ?</u>

A savoir : le phénomène de transmission totale (T=1) arrive seulement que pour des valeurs précises de l’ énergie.
Un paquet d’ondes contient un spectre d’énergie.

- Si le pic du paquet est au bon endroit, le paquet d’ondes traverse sans être réfléchie (ou presque)
- Sinon il est partiellement réfléchie

Nous remarquons alors une atténuation de la réflexion, différent du cas où T=1 pour une seule énergie.

4. Visualisation de la propagation d'un paquet d'ondes

3) Démonstration qualitative : transmission d'un paquet d'ondes

Soit un paquet d'ondes initial gaussien :

$$\psi(x,0) = \int A(k) e^{ikx} dk = e^{ik_0 x} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

avec k_0 le centre de la largeur du paquet d'ondes et σ^2 la variance spatial du paquet d'ondes

Dans le domaine de Fourier :

$$A(k) = e^{-\frac{(k-k_0)^2\sigma^2}{2}}$$

Chaque composante k a une transmission $T(k)$. Alors l'amplitude est :

$$\psi_T(x,t) = \int A(k)\sqrt{T(k)}\, e^{i(kx-\omega(k)t)} dk$$

$\rightarrow$ La transmission du paquet dépend du profil de $T(k)$ autour de k_0.

4. Visualisation de la propagation d’un paquet d’ondes

4) <u>Conclusion de l’étude analytique</u>

- Le paquet d’ondes ne peut être totalement transmis sauf si toute sa largeur en k soit dans une zone T(k)=1 ou environ égale à 1.

- La transmission globale du paquet dépend de la forme de T(k), la largeur du paquet d’ondes [k] et la position au centre du paquet d’ondes par rapport à la zone où T(k) est maximale.

- SI le paquet est trop large ou le centre du paquet d’ondes est mal positionné alors une partie sera réfléchie, donc le paquet d’ondes sera partiellement transmis.

FIN