

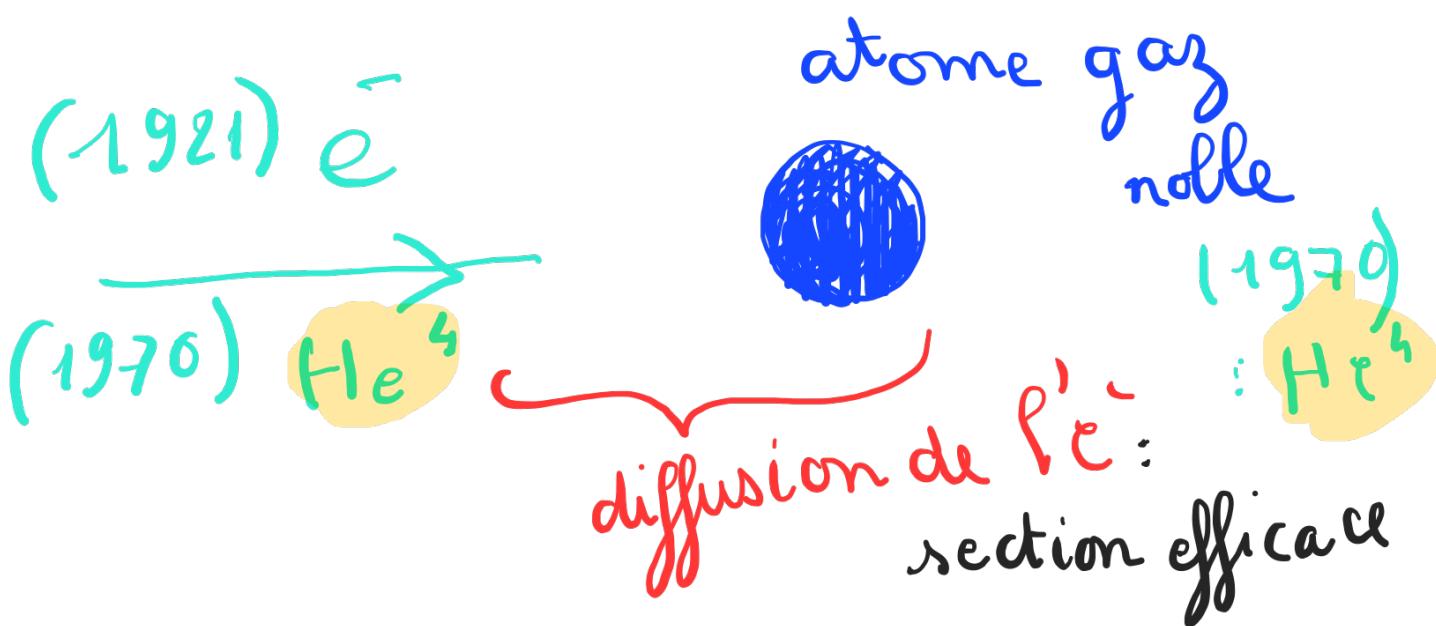
<Https://www.f-legrand.fr/scidoc/>

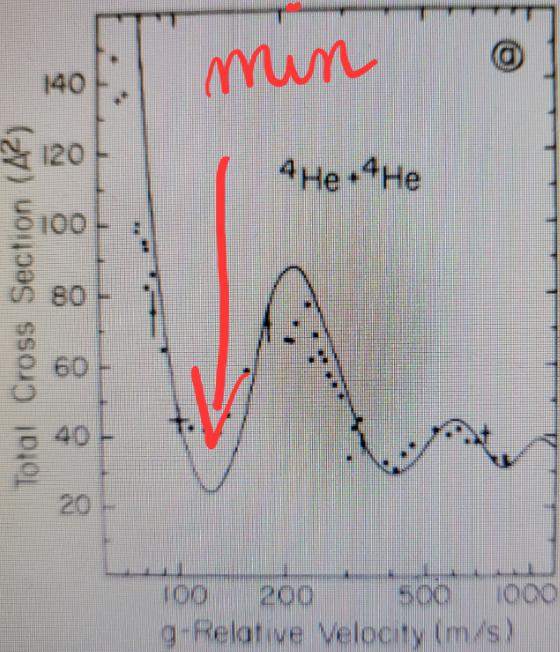
[Https://phet.colorado.edu/fr/simulations/
bound-states](Https://phet.colorado.edu/fr/simulations/bound-states)

www.overleaf.com/

Unisciel

Reference G76 sur le sujet: Méthode
numérique et simulation : cours PHQ404
David serechal, univ de sherkrooke, quebec





vation de l'effet Ramsauer-Townsend lors de la collision issue de [170].

Figure 1 page 2

État stationnaire:

$$\psi(x, t) = \varphi(x) e^{\frac{-iEt}{\hbar}} \quad \text{et}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} + [E - V(x)] \varphi(x) = 0$$

$L > E$ énergie totale de la particule

$V(x)$: potentiel constant par morceaux

$$\text{cas } : \boxed{E > 0 > -V_0} \rightarrow E - V(x) \\ = E - (-V_0) \\ = E + V_0 > 0$$

\Rightarrow Comportement sinusoïdal

b) forme de $V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{pour } a < x < a + \varepsilon \\ 0 & \text{si } x \in \mathbb{R} \setminus [a, a + \varepsilon] \end{cases}$

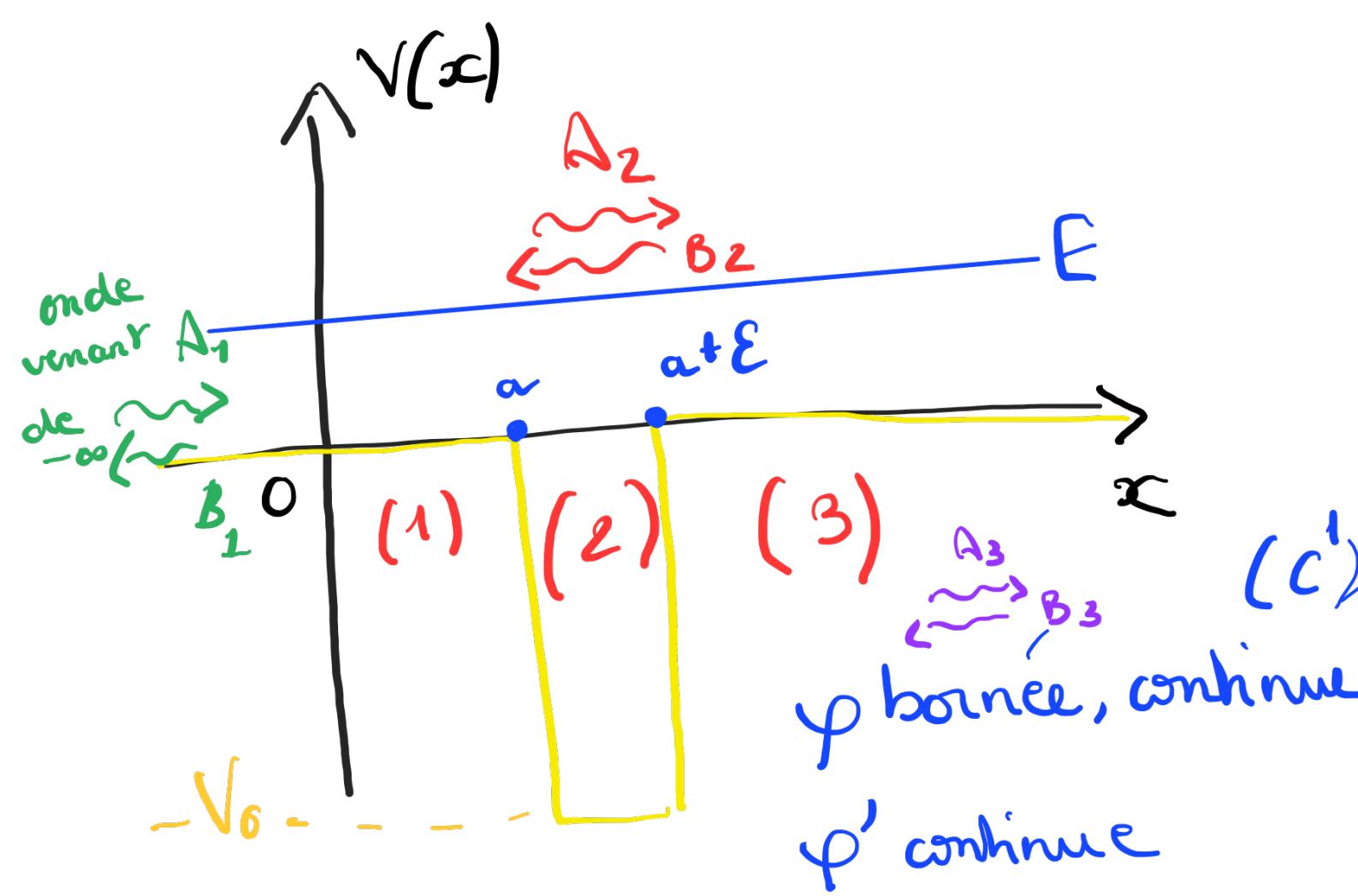
$\varepsilon = \text{taille du puit}$

3 régions:

$$(1) \quad x \in]-\infty, a]$$

$$(2) \quad x \in [a, a + \varepsilon], \quad \varepsilon = \text{taille du puit}$$

$$(3) \quad x \in [a + \varepsilon, +\infty[$$



1)

L'objectif final du projet est de parvenir à expliquer cet effet à l'aide d'un modèle à unedimension d'espace. Le potentiel au voisinage de la particule cible sera modélisé par unpuits de potentiel de profondeur finie $-V$

schrodinger 1d et $V(x) = -V_0$ pour x :position

de la particule cible

- coder en python algorithme de résolution d'équation différentielle afin d'observer la propagation d'un paquet d'ondes ;
-> resolution edp: numerov ou leapfrog/
saute-mouton
-> puits de potentiel tel que $E > 0 > -V_0$, E energie de la

- coder un **algorithme** permettant de trouver les états stationnaires
- résoudre analytiquement le problème tel qu'il a été modélisé en cherchant les solutions

- 2) Resolution analytique du probleme:
 - a) equation de schrodinger independante du temps: 1d
etats stationnaire : voir en haut

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} + [E - V(x)] \varphi(x) = 0$$

\hookrightarrow dans (1) et (3): $k^2 > 0$

$$\varphi''(x) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right) \varphi(x) = 0$$

\hookrightarrow dans (2): $q^2 > 0$

$$\varphi''(x) + \left(\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \right) \varphi(x) = 0$$

* Polynôme caractéristiques: EDO du 2nd ordre

\hookrightarrow sol^o de la forme:

2 racines: $\varphi(x) = \alpha e^{r_1 x} + \beta e^{r_2 x}$

r_1 et r_2 donnée par:

• (I) et (III): $r^2 + k^2 = 0 \Rightarrow r = \pm ik$

• (II): $r^2 + q^2 = 0 \Rightarrow r = \pm iq$

$$\text{etc} \dots \Rightarrow |\psi(x)|^2 = \Psi \Psi^*$$

 Symétriser le problème :

potentiel + symétrique :

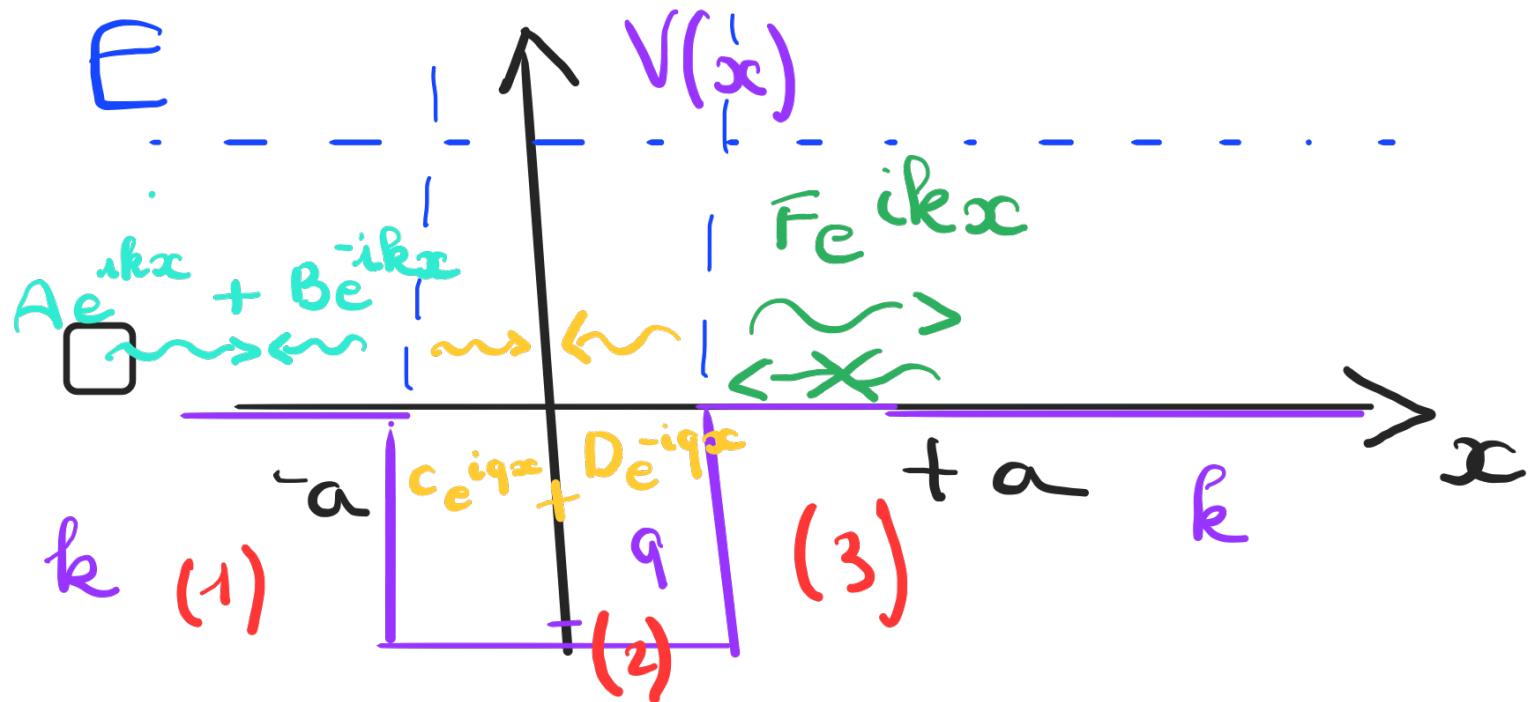
$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } |x| > a, \\ -V_0 & \text{pour } |x| < a \end{cases}$$

et $E > 0 > -V_0$

L> fonction d'ondes $\Psi(x)$

issues de $-\infty$

$$e^{i(kx - \frac{Et}{\hbar})} \rightarrow \psi(x,t) = \Psi(x) X(t)$$



$$\begin{aligned}
 V(x) = 0 \quad (1) \quad x < -a : \Psi(x) &= A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\
 V(x) = -V_0 \quad (2) \quad |x| < a : \Psi &= C e^{iqx} + D e^{-iqx} \\
 V(x) = 0 \quad (3) \quad x > a : \Psi &= F e^{ikx}
 \end{aligned}$$

Equation de Schrödinger:

$$\hat{H} \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (1D)$$

\hat{H} opérateur

potentiel $V(x) \Rightarrow \hat{H} =$

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

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

L> th de superposition
 (i) conditions aux limites

Etats stationnaire : x, t variable séparable

$$\Psi(x,t) = \Psi(x)f(r)$$

dans ce cas

$\Psi(x)$, $f(r)$ fonction de x car

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi(x)} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x) \underbrace{\Psi(x)}_{\text{dimension d'une énergie}} = i\hbar \frac{1}{f(r)} \frac{df}{dt} = \text{consté}$$

E: énergie de la partie au

etc... (1) $i\hbar \frac{df}{dt} = E f(r) \Leftrightarrow i\hbar \frac{df}{f} = Edt$

$$(2) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

(1) $i\hbar \frac{df}{dt} = E f(r) \Leftrightarrow i\hbar \frac{df}{f} = Edt$

$$\int \frac{df}{f} = - \int \frac{iE dt}{\hbar} \Rightarrow \ln(f) = - \frac{iEt + cst}{\hbar}$$

$$f(r) = f(0) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

on prend $f(0) = 1$

$$\Rightarrow \psi(x, t) = \psi(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

eq (2)

eq (1)

les états stationnaires dépendent de la forme de $V(x)$: condition de continuité et k ? q ?

$V(x)$	$\psi(x)$
continue borné	continue borné
	2 fois dérivables
discontinu borné	bornée
borné	continue
	1 fois dérivable

=> continuité de $\psi(x)$ et $\psi'(x)$

en $x = -a$ et $x = +a$

$\hookrightarrow A, B, C, D, F$



$$(2) \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$



$$(2) 0 = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (E - V(x)) \psi(x)$$

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) = 0$$

(3)

$$V(x) = 0 : k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (1)$$

$$V(x) = -V_0 : q^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \quad (2)$$

our polynôme caractéristique

$$\frac{\hbar^2}{2m} r^2 + (V(r) - E) = 0 \Leftrightarrow r^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r))$$

B, C, D et F en fonction de A

$$② \quad 0 = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \right) \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + (E - V(x)) \Psi(x)$$

$$\frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \Psi(x) = 0$$

+ 4 conditions de continuité

$$\begin{cases} V(x) = 0 : \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \\ V(x) = -V_0 : \quad q^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} \end{cases}$$

zone (I) et
zone (II)

car polynôme caractéristique :

$$\frac{\hbar^2}{2m} r^2 + (V(x) - E) = 0 \iff r^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))$$

③ B, C, D et F en fonction de A

$$④ \text{ coefficients de réflexion et transmission : } R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

avec : $R + T = 1$ pour conservation des probabilités

Montrer que : $\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(E+V_0)} \sin^2(2qa)$?

$$t(e) \text{ avec } e = \frac{E}{V_0}$$