

PHYSICS PROJECT

JÉRÉMIE BEAUVAINS
ALEXANDRE HALOUTE

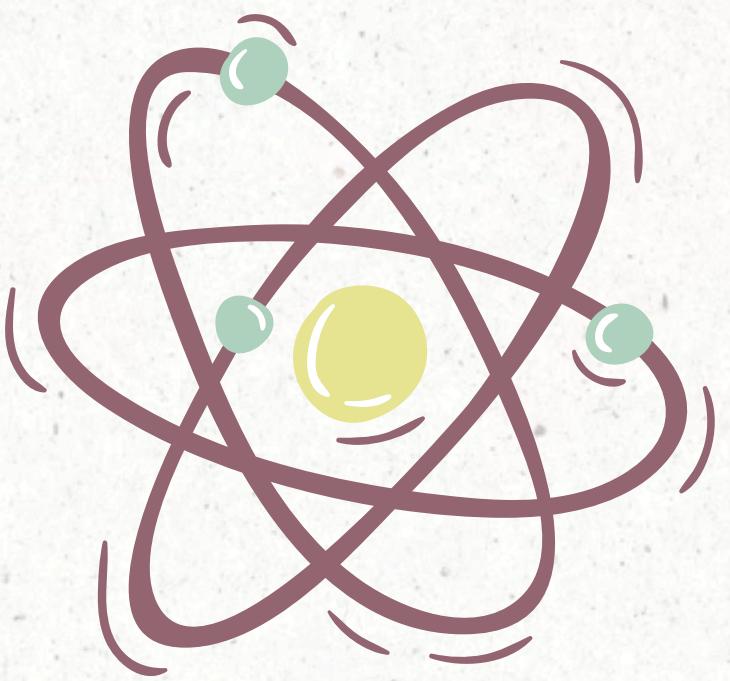
EQUATION DE SCHRÖDINGER

1887-1961



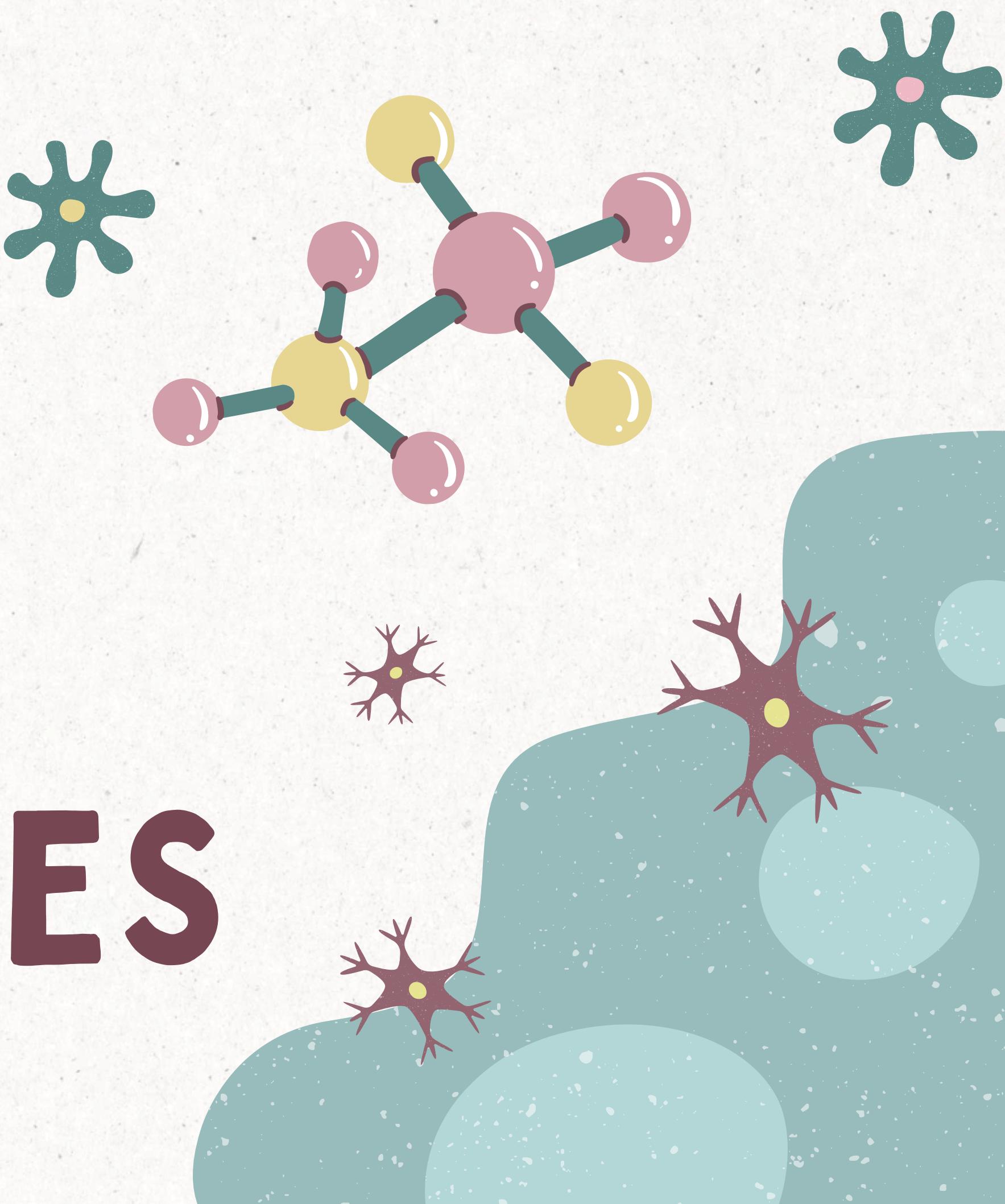
- PRIX NOBEL 1933
- PUBLICATION DE LIVRE
- "CHAT DE SCHRÖDINGER"

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t)$$

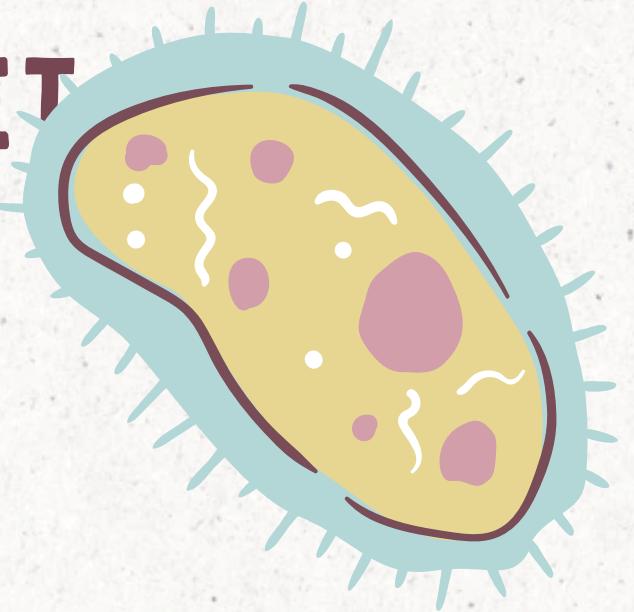


01

CODES ET GRAPHIQUES



SIMULATION DE LA PROPAGATION D'UN PAQUET D'ONDES QUANTIQUE



```
import numpy as np
import math
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.animation as animation
import time

start_time = time.time()

def init():
    line.set_data([], [])
    return line,

def animate(j):
    line.set_data(0, final_densite[j,:]) #Crée un graphique
    return line,

dt=1E-7
dx=0.001
nx=int(1/dx)*2
nt=90000 # En fonction du potentiel il faut modifier ce paramètre
nd=int(nt/1000)+1#nombre d image dans notre animation
n_frame = nd
s=dt/(dx**2)
xc=0.6
sigma=0.05
A=1/(math.sqrt(sigma*math.sqrt(math.pi)))
v0=-4000
e=5#Valeur du rapport E/v0
E=e*v0
k=math.sqrt(2*abs(E))
|
```

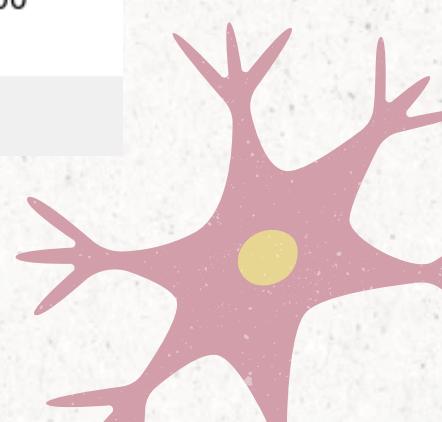
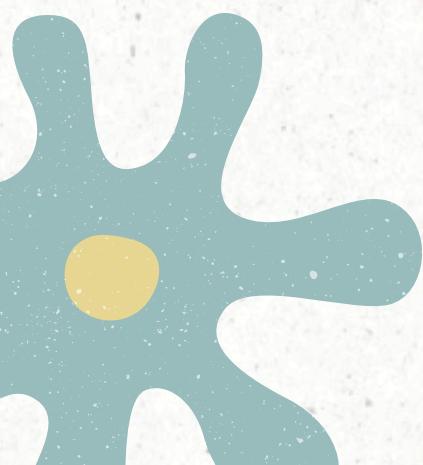
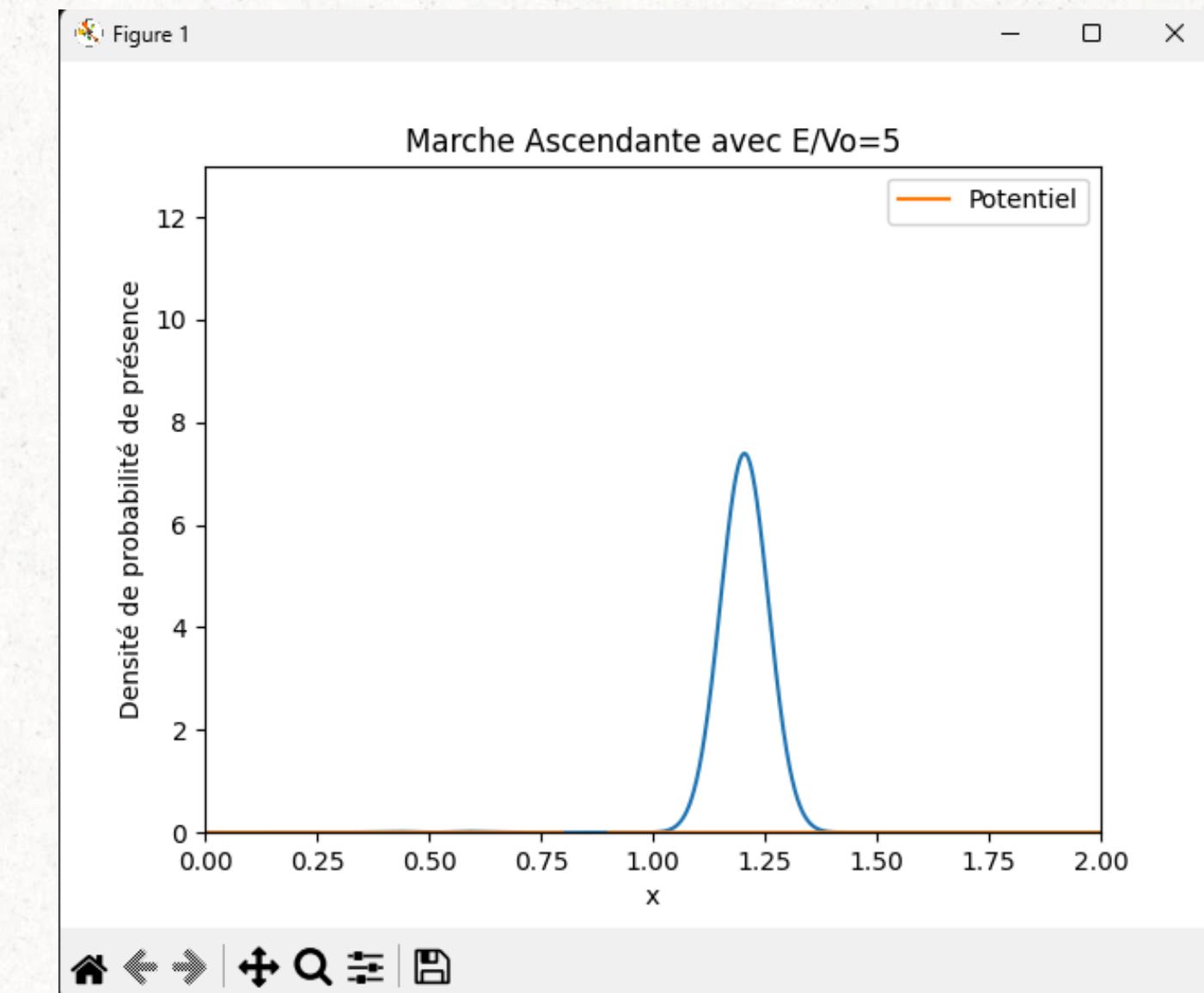
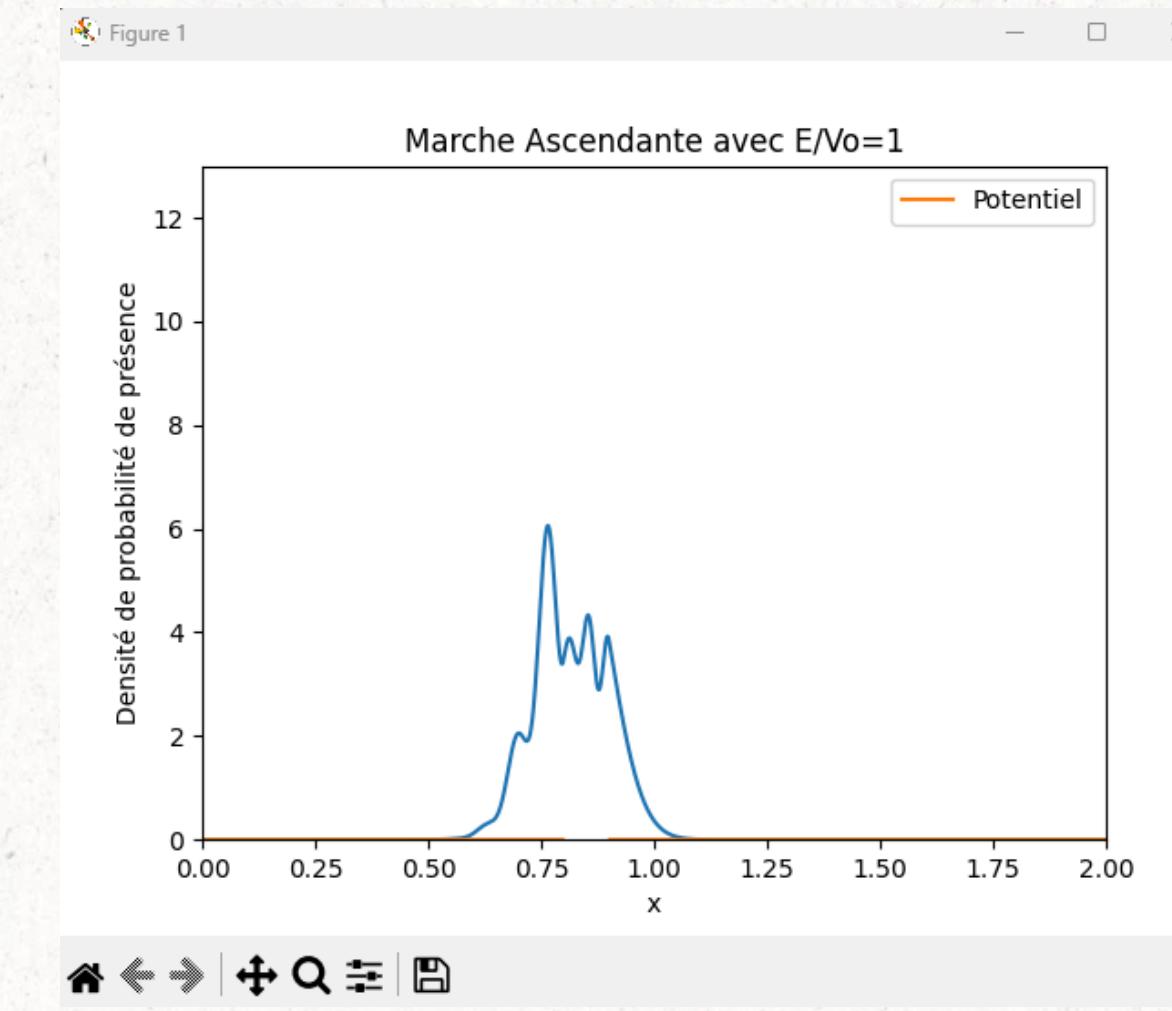
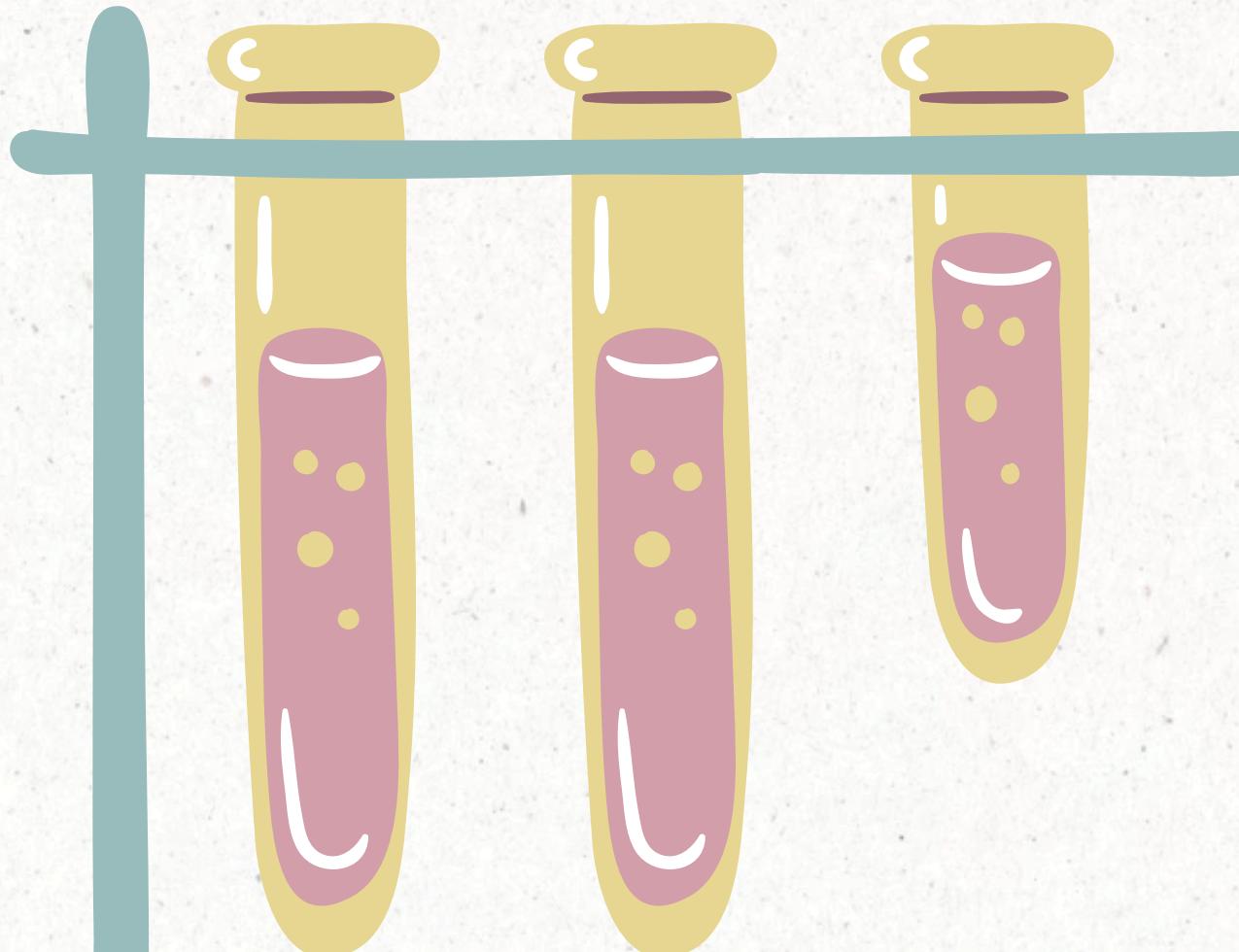


Figure 1



Home | Back | Forward | Crosshair | Zoom | Pan | Save



```

import numpy as np
import math
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.animation as animation
import time

start_time = time.time()

def init():
    line.set_data([], [])
    return line,

def animate(j):
    line.set_data(o, final_densite[j,:]) #Créé un graphique pour chaque
    return line,

dt=1E-7
dx=0.001
nx=int(1/dx)*2
nt=90000 # En fonction du potentiel il faut modifier ce paramètre car si
nd=int(nt/1000)+1#nombre d'image dans notre animation
n_frame = nd
s=dt/(dx**2)
xc=0.6
sigma=0.05
A=1/(math.sqrt(sigma*sqrt(math.pi)))
v0=-1000 ←
e=1#Valeur du rapport E/V0
E=e*v0 ←
k=math.sqrt(2*abs(E))

```

$v_0 = -1000$

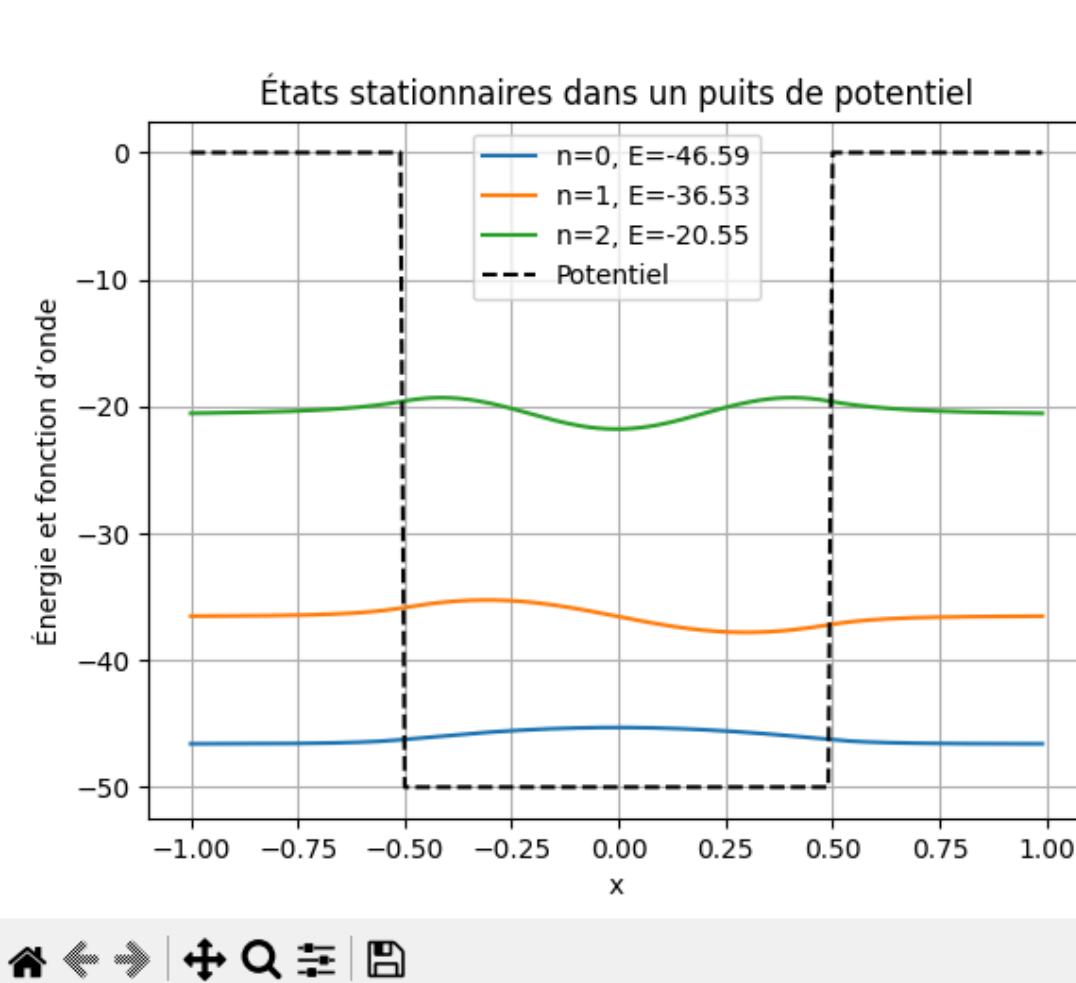
$e = 1$

02

ÉTAT STATIONNAIRE



Figure 1



QU'EST-CE QU'UN ÉTAT STATIONNAIRE ?



```

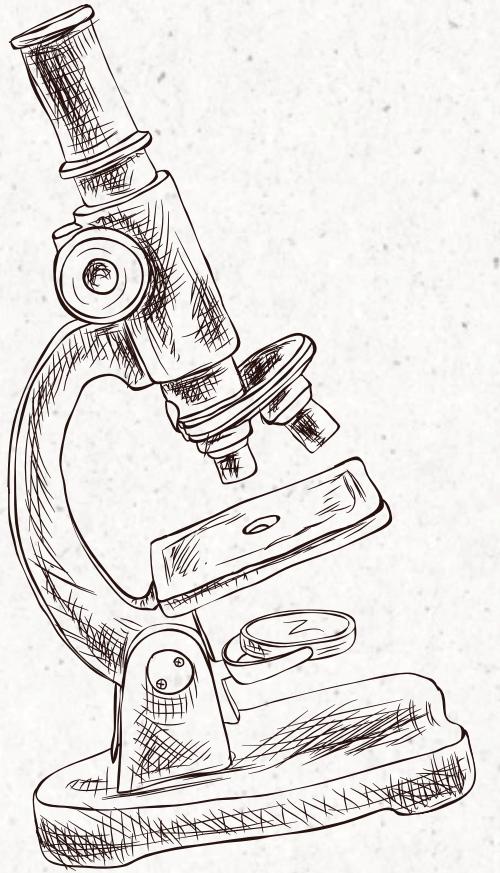
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.linalg import eigh # pour résoudre  $H \psi = E \psi$ 

hbar = 1
m = 1
dx = 0.01
x = np.arange(-1, 1, dx)
N = len(x)

V0 = 50
a = 0.5
V = np.zeros(N)
V[np.abs(x) < a] = -V0
diag = -2.0 * np.ones(N)
off_diag = np.ones(N - 1)
D = (np.diag(diag) + np.diag(off_diag, 1) + np.diag(off_diag, -1)) / dx**2

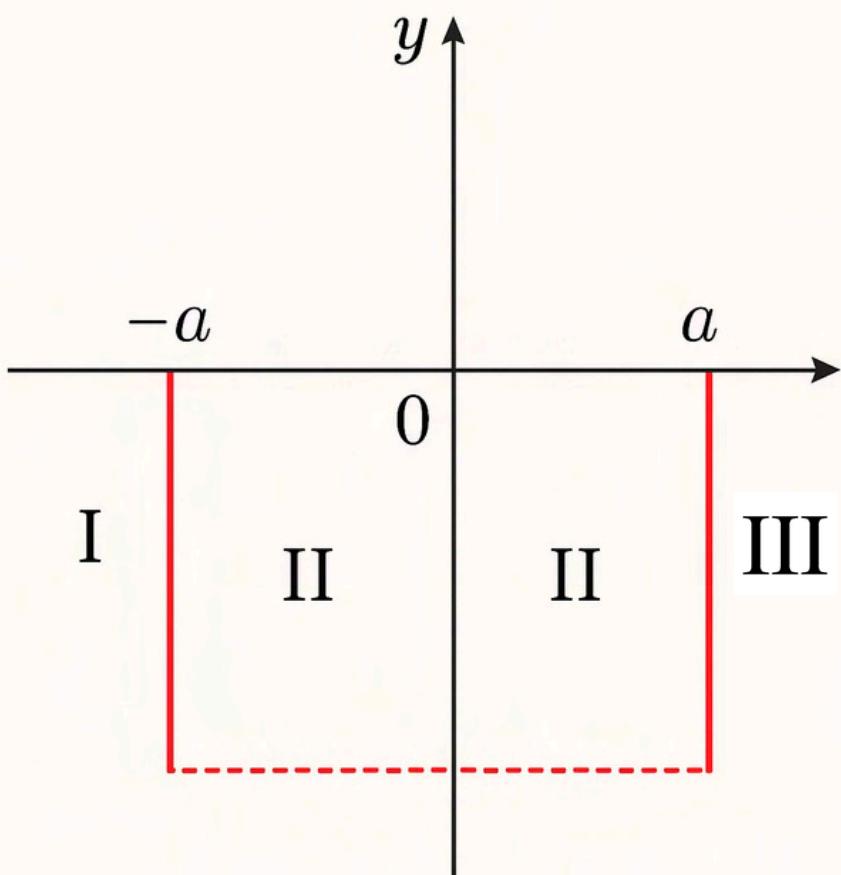
H = -(hbar**2 / (2 * m)) * D + np.diag(V)
energies, states = eigh(H)
plt.figure()
for n in range(3):
    psi = states[:, n]
    psi = psi / np.sqrt(np.trapz(psi**2, x)) # normalisation
    plt.plot(x, psi + energies[n], label=f'n={n}, E={energies[n]:.2f}')
plt.plot(x, V, 'k--', label="Potentiel")
plt.legend()
plt.title("Etats stationnaires dans un puits de potentiel")
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("Énergie et fonction d'onde")
plt.grid(True)
plt.show()

```



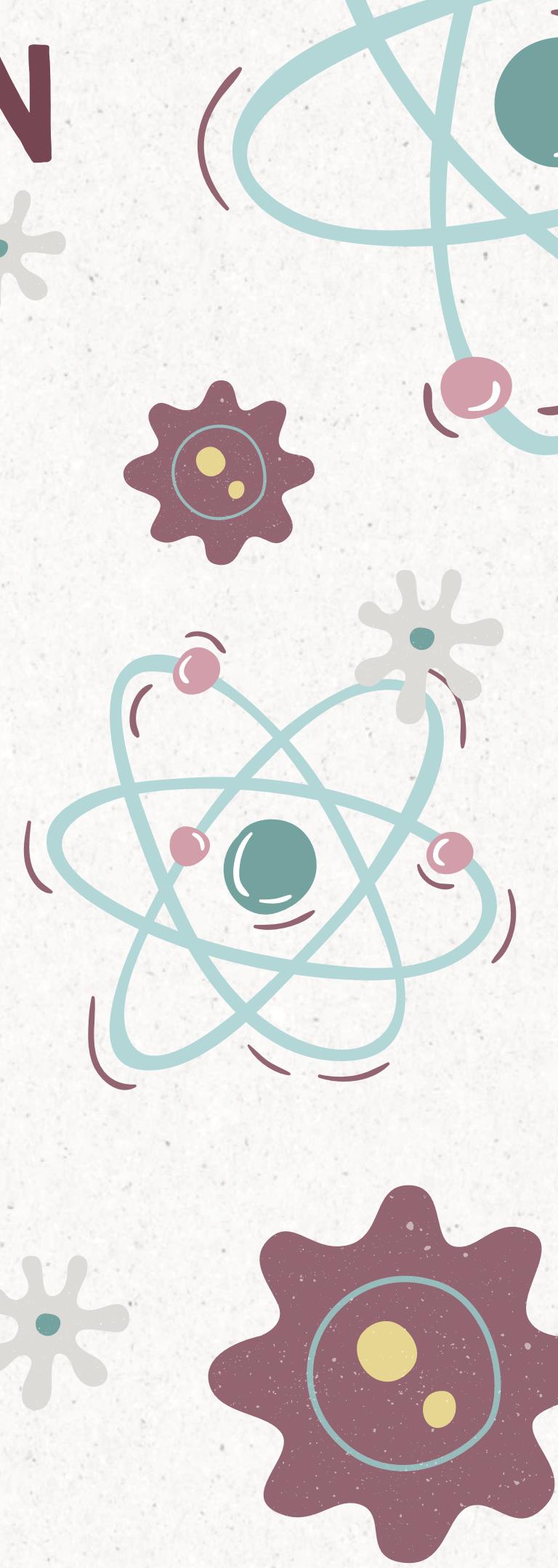
RESOLUTION DE L'EQUATION DE SCHRÖDINGER

SCHÉMA DE L'EXPÉRIENCE

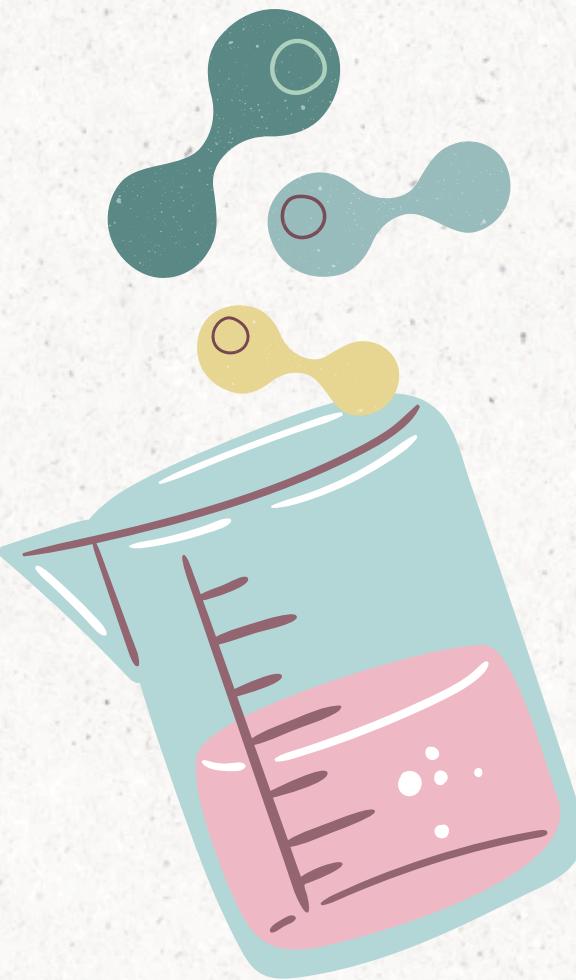


- DANS LA ZONE I ET III
 $V(X)=0$
- DANS LA ZONE II
 $V(X)=-V_0$

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



SECTION EFFICACE



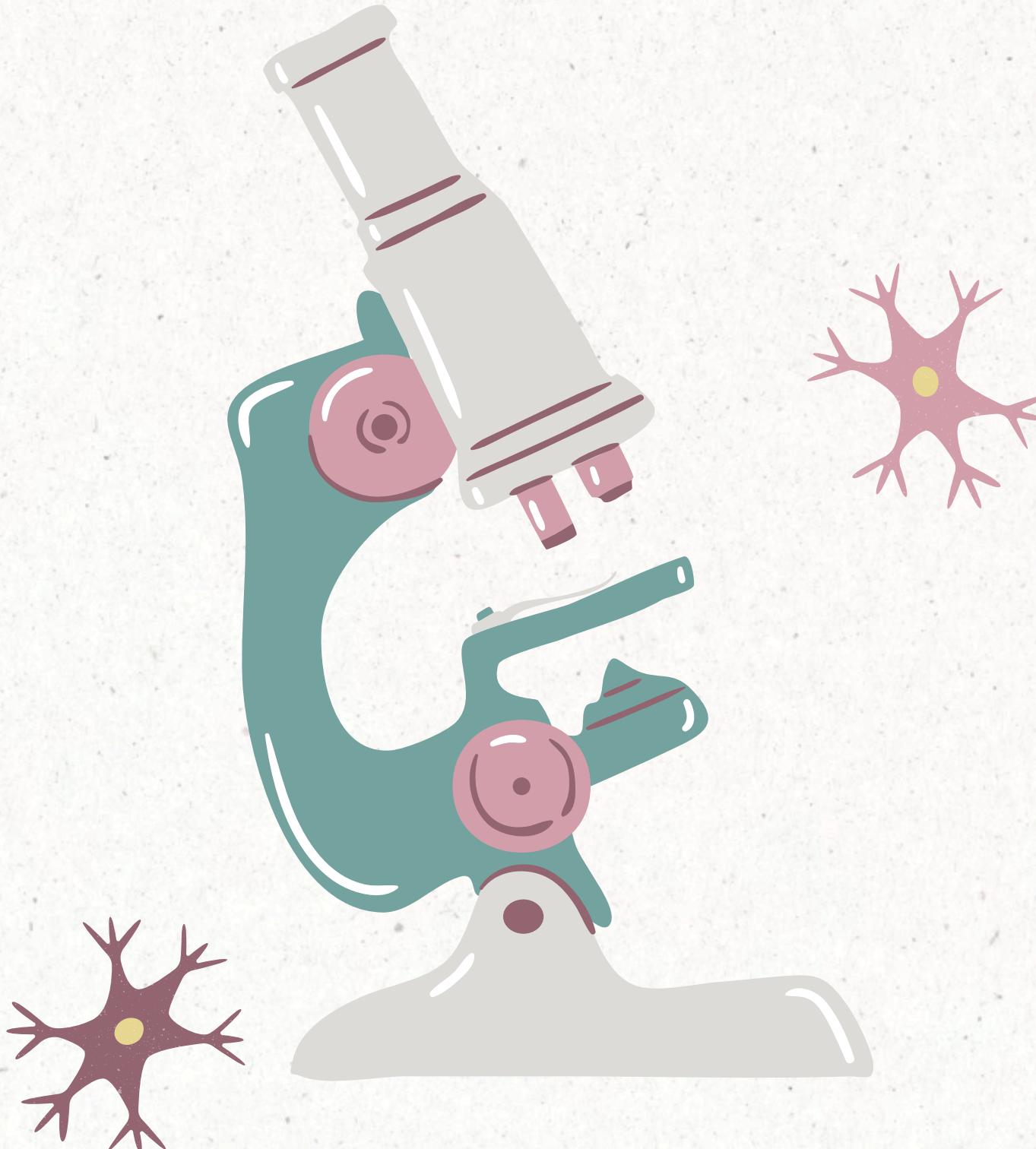
Grandeur σ = “surface virtuelle” associée à une particule, représentant la probabilité qu’elle soit diffusée.

→ Si l’électron a moins de chances d’être diffusé, σ diminue.

→ Cette chute de σ est une signature clé de l’effet Ramsauer.



COMPARAISON DES PRÉDICTIONS AVEC LES MESURES EXPÉRIMENTALES

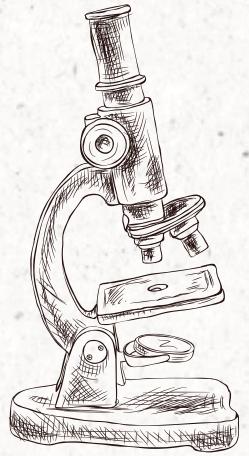


Ce que montre notre modèle numérique :

- Le coefficient de transmission $T(E)$ atteint un maximum à une énergie précise.
- Cela correspond à une transmission quasi totale : le puits devient « transparent ».
- Le coefficient de réflexion $R(E)$ chute fortement à cette même énergie.

Lien avec les mesures expérimentales [G76] :

- À cette même énergie, $\sigma_{\text{exp}}(E)$ montre un minimum marqué.
- Cela signifie que les électrons ne sont pas diffusés, comme dans notre modèle.



L'EFFET RAMSAUER-TOWNSEND

IMPORTANT:

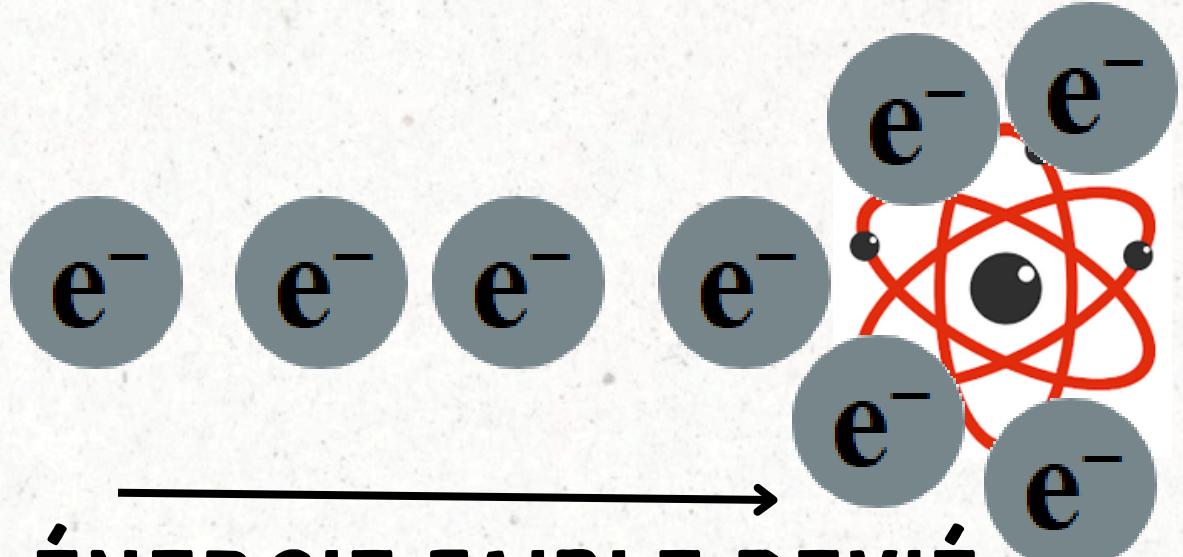
OBSERVÉ EN 1921 PAR RAMSAUER ET TOWNSEND.

À CERTAINES ÉNERGIES, DES ÉLECTRONS TRAVERSENT UN GAZ NOBLE SANS ÊTRE DÉVIÉS.

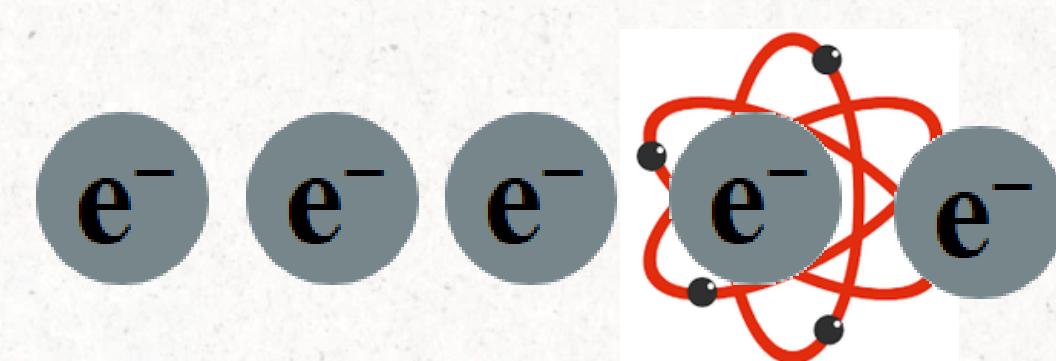
PHÉNOMÈNE QUANTIQUE : L'ÉLECTRON SE COMPORE COMME UNE ONDE QUI INTERFÈRE AVEC ELLE-MÊME EN TRAVERSANT L'ATOME

L'ÉLECTRON PASSE "COMME S'IL N'Y AVAIT RIEN", ALORS QU'IL Y A UN ATOME SUR SON CHEMIN.

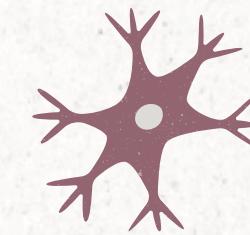
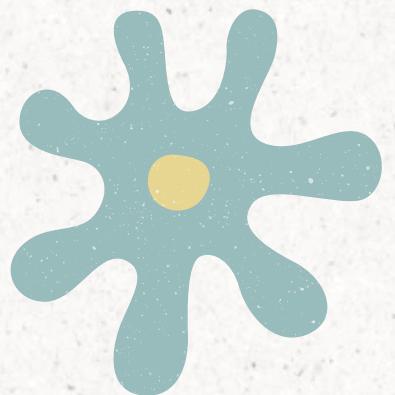
CE PHÉNOMÈNE NE PEUT PAS ÊTRE EXPLIQUÉ PAR LA PHYSIQUE CLASSIQUE



ÉNERGIE FAIBLE DEVIÉE:
DIFFUSION



ÉNERGIE PARTICULIÈRE :
PAS DE DÉVIATION



ÉTUDE ANALYTIQUE : PAQUET D'ONDES VS ONDE STATIONNAIRE

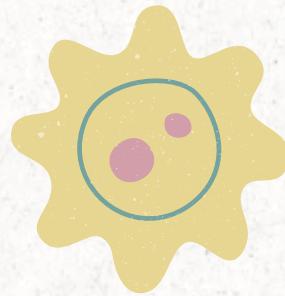
Paquet d'ondes :

- Superposition d'ondes stationnaires → $\Psi(x,t)$, dépend du temps.
- Energie non fixe : suit une distribution autour d'une valeur moyenne E^- .
- La particule est localisée dans l'espace → on peut suivre son mouvement.

Onde stationnaire :

- Énergie fixe → fonction d'onde : $\psi(x)$, indépendante du temps.
- Probabilité répartie partout : particule pas localisée.
- Utilisée pour calculer $T(E)$ et $R(E)$ analytiquement.

LIMITES DU PUIT CARRÉ FINI ET TRANSITION VERS UN MODÈLE PLUS RÉALISTE



LIMITE DU MODÈLE

- Bords trop abrupts → interaction non physique
- Pas de décroissance progressive du potentiel (contrairement au potentiel atomique réel)
- Surestime la réflexion aux interfaces → artefacts non physiques
- Ne modélise pas correctement la forme réelle du potentiel entre un électron et un atome de gaz noble

MODÈLE PLUS RÉALISTE

- Caractéristiques :
- Potentiel à fond arrondi et symétrique.
- Aucun saut ou rupture dans la valeur du potentiel.
- Conséquence sur la simulation :
- Etat stationnaire et paquets d'ondes se propagent de manière plus réaliste.
- Effet Ramsauer-Townsend mieux modélisé grâce à la forme plus naturelle du potentiel.

THANK YOU!

