



Introduction à la physique moderne  
M. AKRIDAS-MOREL

# **Projet numérique en physique moderne**

## **Effet Ramsauer-Townsend**

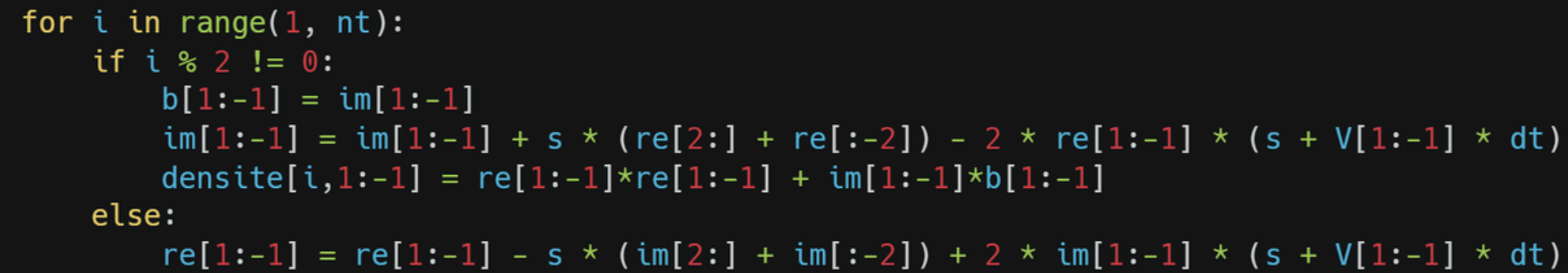
DERRIEN Enzo  
DRECOURT Raphaël  
NISAR Sofiane

Groupe 5B  
PréIng 2 MI5  
Année universitaire 2024-2025

# Sommaire

1. Observation de la propagation d'un paquet d'ondes
2. Algorithme permettant de trouver les états stationnaires
3. Résolution analytique du problème
4. Comparaison des prédictions avec les mesures experimentales

# Algorithme de résolution d'équation différentielle



```
for i in range(1, nt):  
    if i % 2 != 0:  
        b[1:-1] = im[1:-1]  
        im[1:-1] = im[1:-1] + s * (re[2:] + re[:-2]) - 2 * re[1:-1] * (s + V[1:-1] * dt)  
        densite[i,1:-1] = re[1:-1]*re[1:-1] + im[1:-1]*b[1:-1]  
    else:  
        re[1:-1] = re[1:-1] - s * (im[2:] + im[:-2]) + 2 * im[1:-1] * (s + V[1:-1] * dt)
```

Comment résoudre l'équation de Schrödinger en numérique ?

### 11.7.1. ALGORITHME DE VERLET OU DE SAUTE-MOUTON

Notons  $y(t)$  la fonction inconnue, solution de l'équation différentielle particulière :

$$y'' = f(t, y) \quad (11.27)$$

où la variable indépendante peut être le temps. La méthode résulte du remplacement de la dérivée seconde par une approximation bien connue

$$y''|_n \cong \frac{1}{h^2} [y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}],$$

où l'erreur de troncation est  $\mathcal{O}(h^2)$ . L'algorithme de Stoermer–Verlet s'écrit donc

$$y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + h^2 f(t_n, y_n). \quad (11.28)$$

Jean-Paul GRIVET. *Méthodes numériques appliquées pour les sciences et l'ingénieur*. EDP Sciences, 2013.

# Séparer la partie réelle et imaginaire de l'onde

En posant  $\psi(x, t) = \text{Re}(x, t) + i \text{Im}(x, t)$

On a 
$$i (\partial_t \text{Re} + i \partial_t \text{Im}) = -\frac{1}{2} (\partial_{xx} \text{Re} + i \partial_{xx} \text{Im}) + V(x) (\text{Re} + i \text{Im})$$

Par identification  
des parties réelles et imaginaires

$$\begin{cases} \partial_t \text{Im} = \frac{1}{2} \partial_{xx} \text{Re} - V(x) \text{Re} \\ \partial_t \text{Re} = -\frac{1}{2} \partial_{xx} \text{Im} + V(x) \text{Im} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \partial_t \text{Im} = \frac{1}{2} \partial_{xx} \text{Re} - V(x) \text{Re} \\ \partial_t \text{Re} = -\frac{1}{2} \partial_{xx} \text{Im} + V(x) \text{Im} \end{cases}$$

Approximation temporelle :

$$\partial_t \text{Im} \approx \frac{\text{Im}_i^{n+1} - \text{Im}_i^n}{\Delta t}$$

Approximation du laplacien :

$$\partial_{xx} \text{Im}_i \approx \frac{\text{Im}_{i+1}^n - 2\text{Im}_i^n + \text{Im}_{i-1}^n}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\text{Im}_i^{n+1} - \text{Im}_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\text{Re}_{i+1}^n - 2\text{Re}_i^n + \text{Re}_{i-1}^n}{\Delta x^2} - V_i \text{Re}_i^n$$

$$\Rightarrow \text{Im}_i^{n+1} = \text{Im}_i^n + \frac{\Delta t}{2\Delta x^2} (\text{Re}_{i+1}^n - 2\text{Re}_i^n + \text{Re}_{i-1}^n) - \Delta t V_i \text{Re}_i^n$$

```
im[1:-1] = im[1:-1] + s * (re[2:] + re[:-2]) - 2 * re[1:-1] * (s + V[1:-1] * dt)
```

$$\begin{cases} \partial_t \text{Im} = \frac{1}{2} \partial_{xx} \text{Re} - V(x) \text{Re} \\ \partial_t \text{Re} = -\frac{1}{2} \partial_{xx} \text{Im} + V(x) \text{Im} \end{cases}$$

Même démarche pour la partie réelle


$$\partial_t \text{Re} \approx \frac{\text{Re}_i^{n+1} - \text{Re}_i^n}{\Delta t} \quad \partial_{xx} \text{Re}_i \approx \frac{\text{Re}_{i+1}^n - 2\text{Re}_i^n + \text{Re}_{i-1}^n}{\Delta x^2},$$

$$\frac{\text{Re}_i^{n+1} - \text{Re}_i^n}{\Delta t} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\text{Im}_{i+1}^{n+1} - 2\text{Im}_i^{n+1} + \text{Im}_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + V_i \text{Im}_i^{n+1}$$

$$\Rightarrow \text{Re}_i^{n+1} = \text{Re}_i^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x^2} (\text{Im}_{i+1}^{n+1} - 2\text{Im}_i^{n+1} + \text{Im}_{i-1}^{n+1}) + \Delta t V_i \text{Im}_i^{n+1}$$

# Calcul de la densité de probabilité de présence

$$\begin{aligned}\rho_i^n &= |\psi_i^n|^2 \\ &= (\text{Re}_i^n)^2 + (\text{Im}_i^n)^2\end{aligned}$$

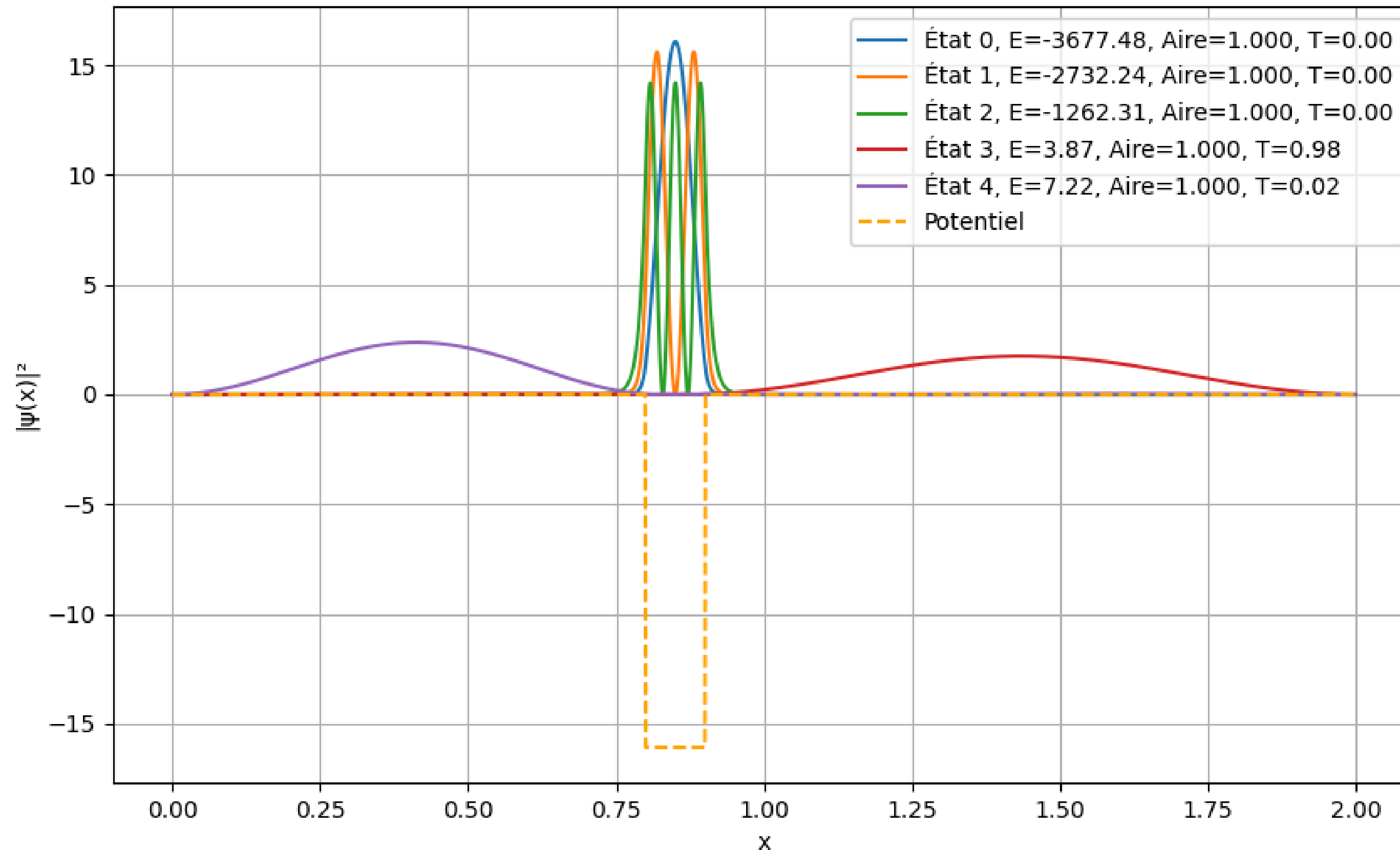


```
for i in range(1, nt):  
    if i % 2 != 0:  
        b[1:-1]=im[1:-1]  
        im[1:-1] = im[1:-1] + s * (re[2:] + re[:-2]) - 2 * re[1:-1] * (s + V[1:-1] * dt)  
        densite[i,1:-1] = re[1:-1]*re[1:-1] + im[1:-1]*b[1:-1]  
    else:  
        re[1:-1] = re[1:-1] - s * (im[2:] + im[:-2]) + 2 * im[1:-1] * (s + V[1:-1] * dt)
```



# Algorithme permettant de trouver les états stationnaires

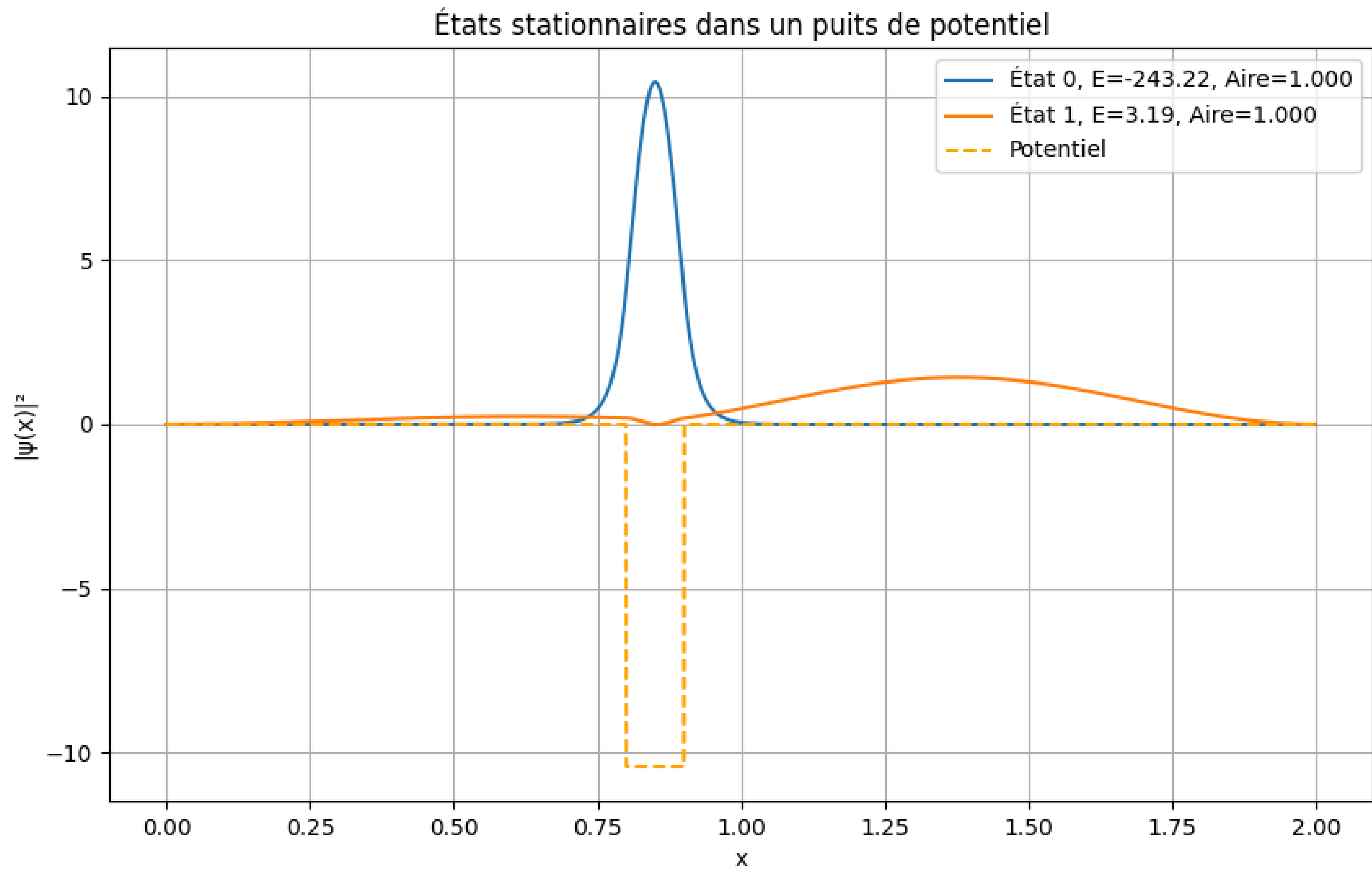
États stationnaires dans un puits de potentiel



$E < 0$  : états liés dans le puits

$E > 0$  : non lié, état de diffusion

Etat 3 : résonance quantique : **effet Ramsauer-Townsend**



# Résolution analytique du problème

Equation de Schrodinger indépendante du temps :

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

$\psi(x)$  fonction d'onde

$V(x)$  potentiel

Modèle du potentiel

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

Les solution s'écrivent sous différentes formes

$$Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{si } x < 0$$

$$Ce^{ik_1x} + De^{-ik_1x} \quad \text{si } 0 \leq x \leq a$$

$$Fe^{ikx} \quad \text{si } x > a$$

Il n'y a pas de barrière après le puits, donc rien à réfléchir

Physiquement, seule une onde vers la droite existe ici

La solution en zone II peut s'écrire :  $C\cos(k_1x) + D\sin(k_1x)$

En interprétant physiquement le problème,

On peut dire que,

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx} \quad R \text{ coeff de réflexion}$$

$$\psi_{II}(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$\psi_{III}(x) = Te^{ikx} \quad T \text{ coeff de transmission}$$

Grâce à la continuité du potentiel et de sa dérivée,

On obtient aux conditions limites,

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow 1 + R = A + B$$

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \Rightarrow ik(1 - R) = ik_1(A - B)$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Rightarrow Ae^{ik_1a} + Be^{-ik_1a} = Te^{ika}$$

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \Rightarrow ik_1(Ae^{ik_1a} - Be^{-ik_1a}) = ikTe^{ika}$$

Ces calculs vont nous permettre d'obtenir le coefficient  $T$ , tel que le module de  $T$  au carré est la probabilité de transmission

## **Lien avec l'effet Ramsauer**

L'effet se manifeste quand  $|R|^2 \approx 0$   
pour certaines valeurs de l'énergie  $E$ ,  
donc  $|T|^2 \approx 1$

```

def calcul_transmission(E):
    k = math.sqrt(2 * E)
    cpt = A * np.exp(1j * k * o - ((o - xc) ** 2) / (2 * (sigma ** 2)))
    re = np.real(cpt) # partie réelle
    im = np.imag(cpt) # partie imaginaire
    dens = np.sum(np.abs(cpt)**2) * dx

    for i in range(1, nt):
        if i % 2 != 0:
            im[1:-1] = im[1:-1] + s * (re[2:] + re[:-2] - 2 * re[1:-1]) - 2 * re[1:-1] * V[1:-1] * dt
        else:
            re[1:-1] = re[1:-1] - s * (im[2:] + im[:-2] - 2 * im[1:-1]) + 2 * im[1:-1] * V[1:-1] * dt

    densite_finale = re**2 + im**2
    borne_transmission = int((fin_puits + 0.1) / dx)
    transmission = np.sum(densite_finale[borne_transmission:]) * dx / dens
    return transmission

```

## Transmission par simulation

```

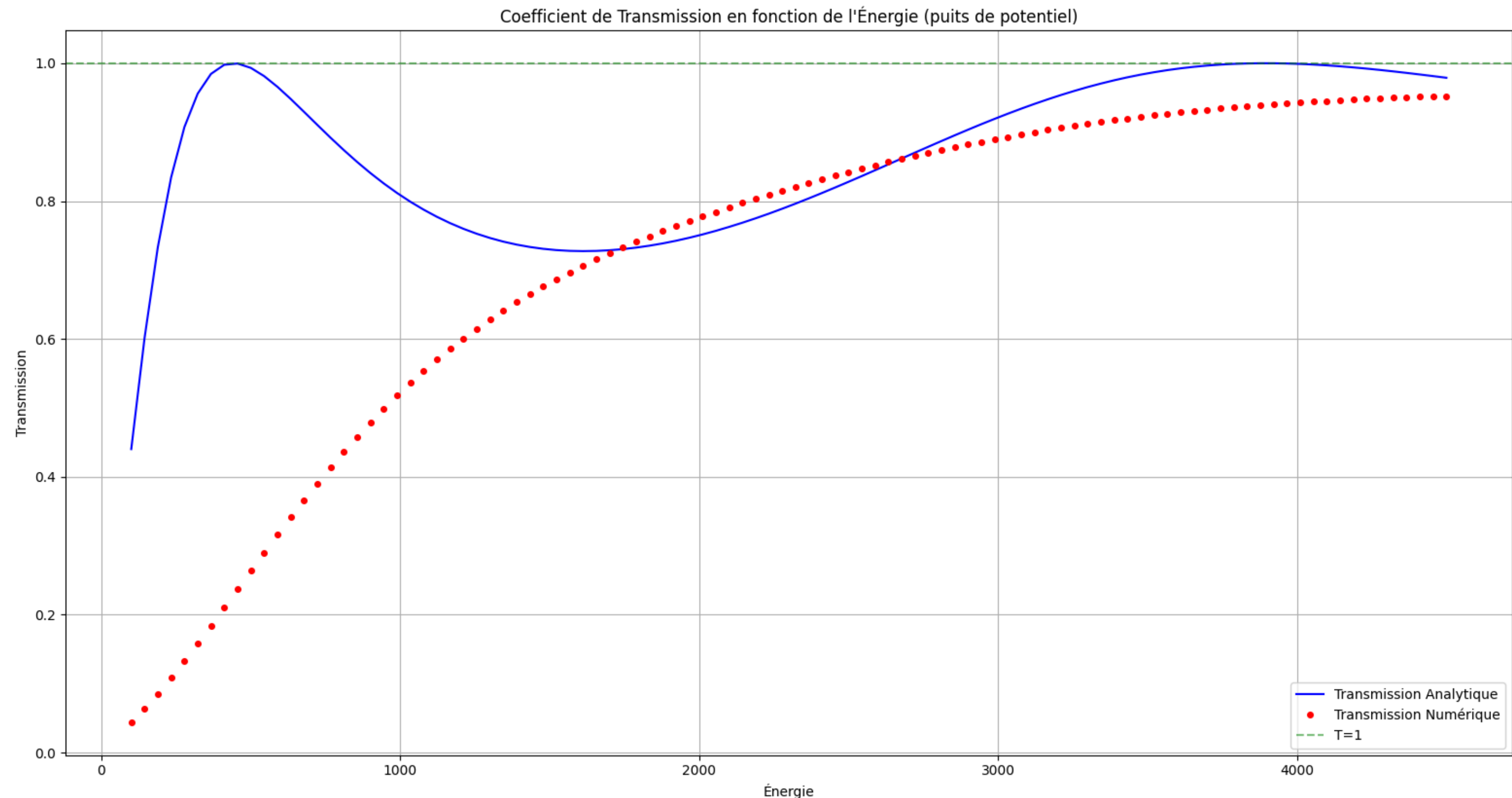
def transmission_analytique(E_vecteur, v0, a):
    T = [] # tab des transmissions
    V0 = abs(v0)
    for E in E_vecteur:
        if E <= 0: # état lié
            T.append(0)
            continue
        q = np.sqrt(2 * (E + V0))
        denom = 4 * E * (E + V0)
        if denom == 0:
            T.append(0)
        else:
            T.append(1 / (1 + ((V0**2) * (np.sin(q * a))**2) / denom))
    return np.array(T)

```

## Transmission par méthode analytique (conditions aux bornes du puit)



# Comparaison des prédictions (simulation) avec les mesures experimentales



code: calcul\_transmission.py

# Etude analytique d'une particule diffusée comme un paquet d'ondes

Equation de Schrodinger dépendante du temps :

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

Paquet d'onde  $\neq$  onde plane

Onde plane

$$\psi(x, t) = \varphi_k(x) \exp(-iE(k)t/\hbar)$$

Paquet d'onde

$$\Psi(x, t) = \int_0^{+\infty} A(k) \phi_k(x) e^{-iE(k)t/\hbar} dk$$

Un paquet d'onde est construit comme une superposition d'ondes planes stationnaires de différentes énergies.

$$\Psi(x, t) = \int_0^{+\infty} A(k) \phi_k(x) e^{-iE(k)t/\hbar} dk$$

- $A(k)$  est une fonction de poids (par exemple, une gaussienne centrée en  $k_0$ )
- $\phi_k(x)$  est la solution stationnaire (onde plane généralisée) associée à un vecteur d'onde  $k$
- $E(k)$  est l'énergie associée à chaque composante  $k$

Il faut donc étudier chaque région car l'onde stationnaire est différente d'une zone à l'autre

Zone I

$$\Phi(x, t) = \int_0^{+\infty} A(k) (e^{ikx} + R e^{-ikx}) e^{-iE(k)t/\hbar} dk$$

Zone II

$$\Phi(x, t) = \int_0^{+\infty} A(k) (A(k)e^{ik_1x} + B(k)e^{-ik_1x}) e^{-iE(k)t/\hbar} dk$$

Zone III

$$\Phi(x, t) = \int_0^{+\infty} A(k) (T(k)e^{ikx}) e^{-iE(k)t/\hbar} dk$$

# Interprétation physique globale

Le paquet d'onde arrive de la gauche (zone I), rencontre le puits

Une partie est réfléchie (retourne vers  $-\infty$ )

Une partie traverse (zone III)

Une partie reste temporairement piégée dans le puits (zone II)

Les coefficients  $R(k)$  et  $T(k)$  dépendent de l'énergie  $\rightarrow$  la forme du paquet évolue avec le temps (dispersion)

**Merci de votre écoute**