

## *Présentation PHYSIQUE MODERNE*

Agbavor Emmanuel  
Bringuier Valérien  
Houidi Adem

PREING 2 MI-3

10/06/2025

# Sommaire

**1**

Introduction

**2**

Principes Théoriques  
& Résolution analytique

**3**

Résultats & Simulations

**4**

Aspects  
Pédagogiques

**5**

Conclusion

**6**

Bibliographie

# Introduction

La mécanique quantique révèle des phénomènes à l'échelle microscopique.

Les puits quantiques illustrent ces comportements :

- Quantification de l'énergie
- Effet tunnel contre-intuitif
- Applications concrètes (microscopes, STM, semi-conducteurs)

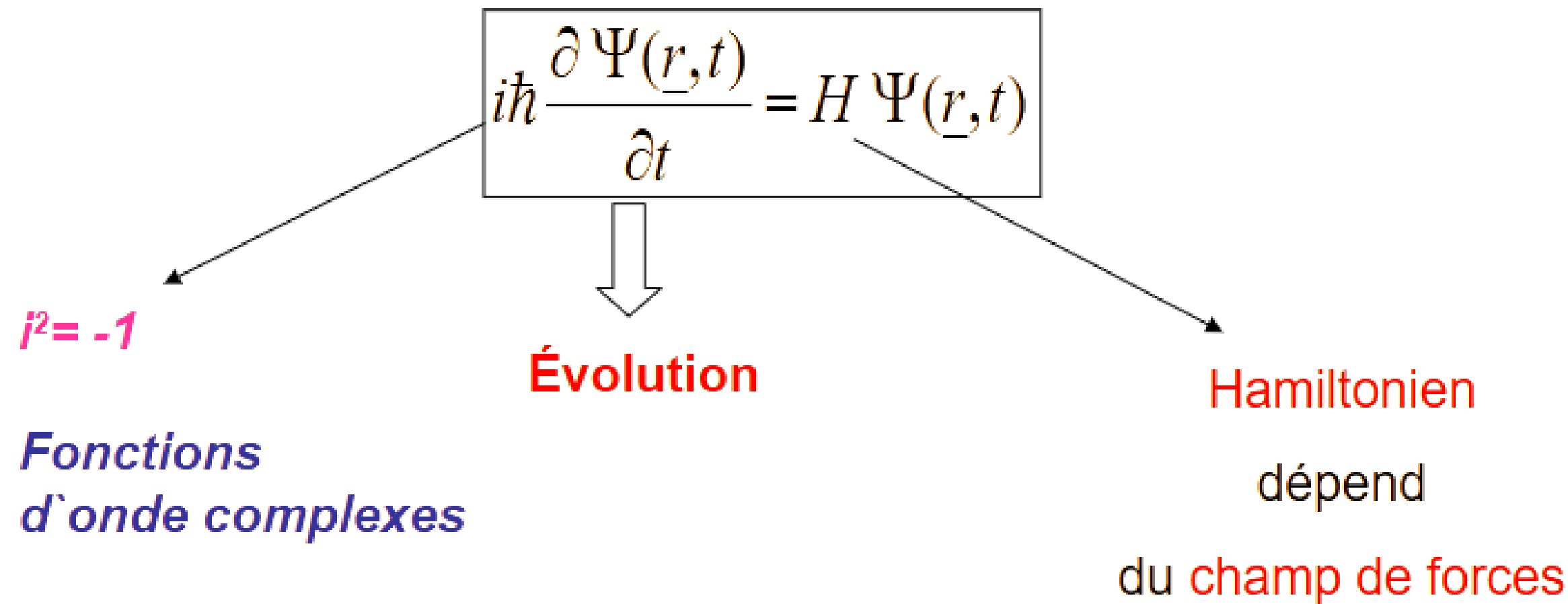
Notre étude combine simulations numériques et théorie pour explorer ces phénomènes clés.

L'effet Ramsauer-Townsend désigne la diminution surprenante de la probabilité de collision entre des électrons lents et des atomes nobles, comme le xénon, à certaines énergies, ce qui se traduit par une transparence inhabituelle du gaz à ces énergies.

# Principes Théoriques

## 2. Equation de Schrödinger

- Est une **équation de mouvement**



$$\hat{H} = \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \right) \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + \dots + V(\underline{r}, t)$$

Résolution analytique:

$$\Psi(x, t) = \phi(x) \times e^{-iEt/\hbar}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \times \frac{d^2 \phi}{dx^2} + [E - V(x)] \phi(x) = 0 \text{ avec } E: \text{énergie totale de la particule}$$

$V(x)$ : potentiel constant

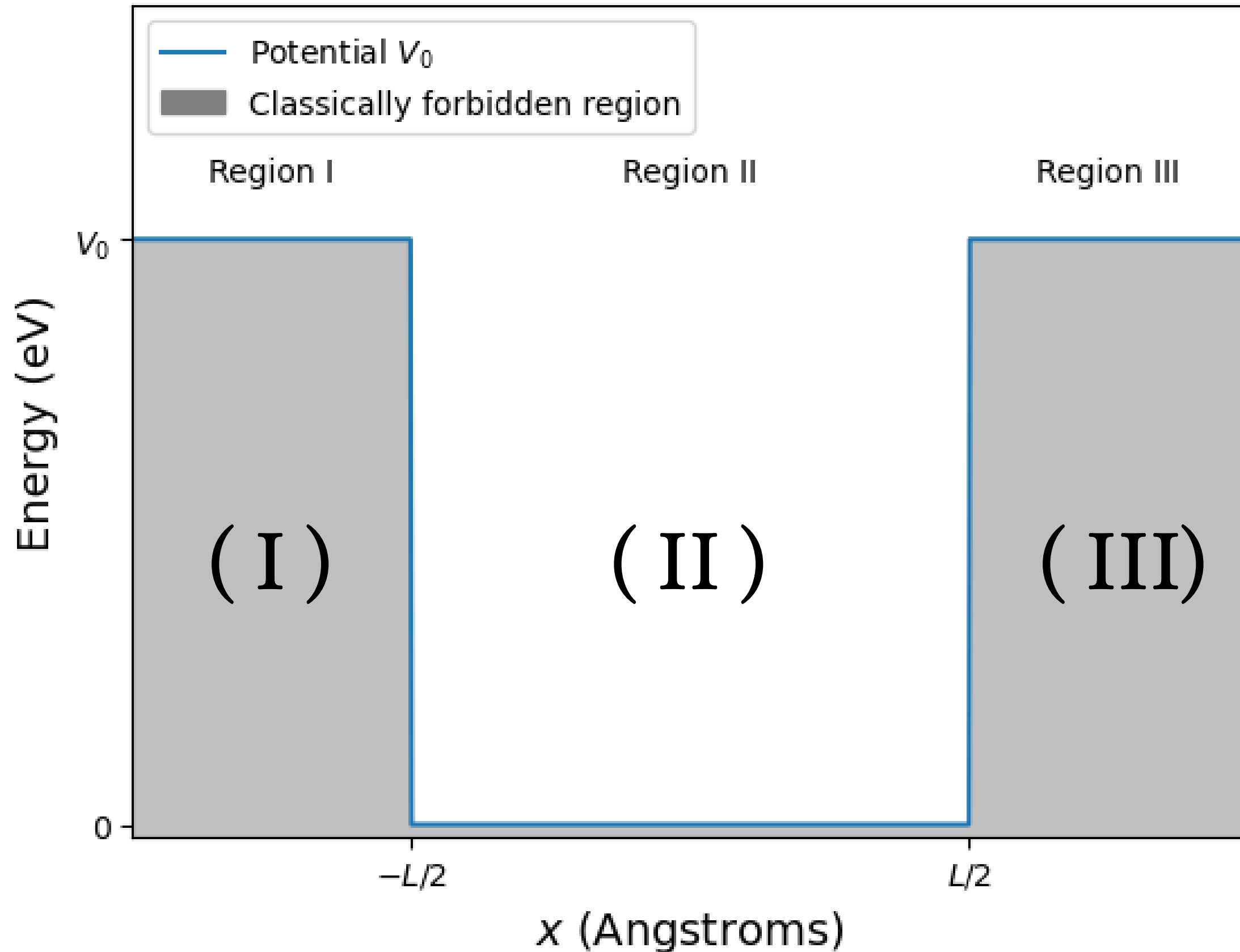
$$\text{Ici: } E > 0 > -V_0 \rightarrow E - V(x) = E - (-V_0) = E + V_0 > 0$$

On a donc un comportement sinusoïdale.

Forme de  $V(x)$ :  $E$  est la taille du puit.

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

# Principes Théoriques



Puits de  
potentiel fini

# Résolution analytique

## Etats stationnaires

Pour ( I ) et (III) :

$$\phi''(x) + (2mE/\hbar^2) \phi(x) = 0 \text{ soit } k^2 > 0$$

Pour (II) :

$$\phi''(x) + (2m(E+V_0)/\hbar^2) \phi(x) = 0 \text{ soit } q^2 > 0$$

## Polynome caractéristiques : EDO 2nd ordre

On sait que la solution est de la forme  $\phi(x) = \alpha \exp(r_1 x) + \beta \exp(r_2 x)$

On a 2 racines :  $r_1$  et  $r_2$  donnée par :

$$(I) \text{ et } (III) : r^2 + k^2 = 0 \Rightarrow r = \pm i k$$

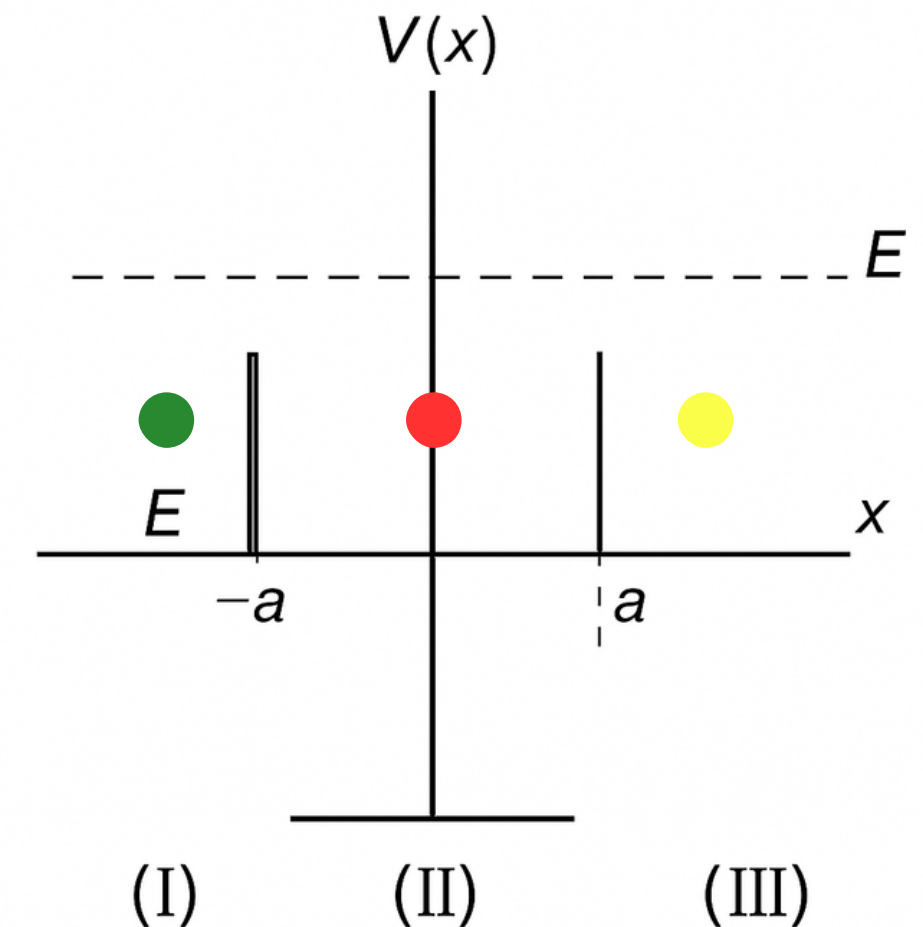
$$(II) : r^2 + q^2 = 0 \Rightarrow r = \pm i q$$

# Résolution analytique

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

et  $E > 0 > -V_0$

$$\begin{aligned} V(x) = 0 : & \text{ (I) } x < -a : \Psi(x) = A e(ikx) + B e(-ikx) \quad \bullet \\ V(x) = -V_0 : & \text{ (II) } |x| < a : \Psi(x) = A' e(iqx) + B' e(-iqx) \quad \bullet \\ V(x) = 0 : & \text{ (III) } x > a : \Psi(x) = A e(ikx) \quad \bullet \end{aligned}$$



# Résolution analytique

## Equation de Schrödinger : 1 dimension

L'équation fondamentale est :

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

où  $\hat{H}$  est le **Hamiltonien**, c'est-à-dire l'opérateur d'énergie totale.

---

♦ **Forme du Hamiltonien avec potentiel  $V(x)$**

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

- Le premier terme représente l'**énergie cinétique**,
- $V(x)$  est le **potentiel** (externe ou interne).

# Résolution analytique

Partie temporelle :

$$i\hbar \frac{d\phi}{dt} = E\phi(t) \Rightarrow \phi(t) = e^{-iEt/\hbar}.$$

Partie spatiale:

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

## Exemple : Puits infini

Le puits infini est un cas classique o`u le potentiel  $V(x) = 0$  dans une certaine région (par exemple, entre  $x = 0$  et  $x = L$ ), et  $V(x) = +\infty$  en dehors.

On résouds :  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$

$$\longleftrightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \quad \text{où } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

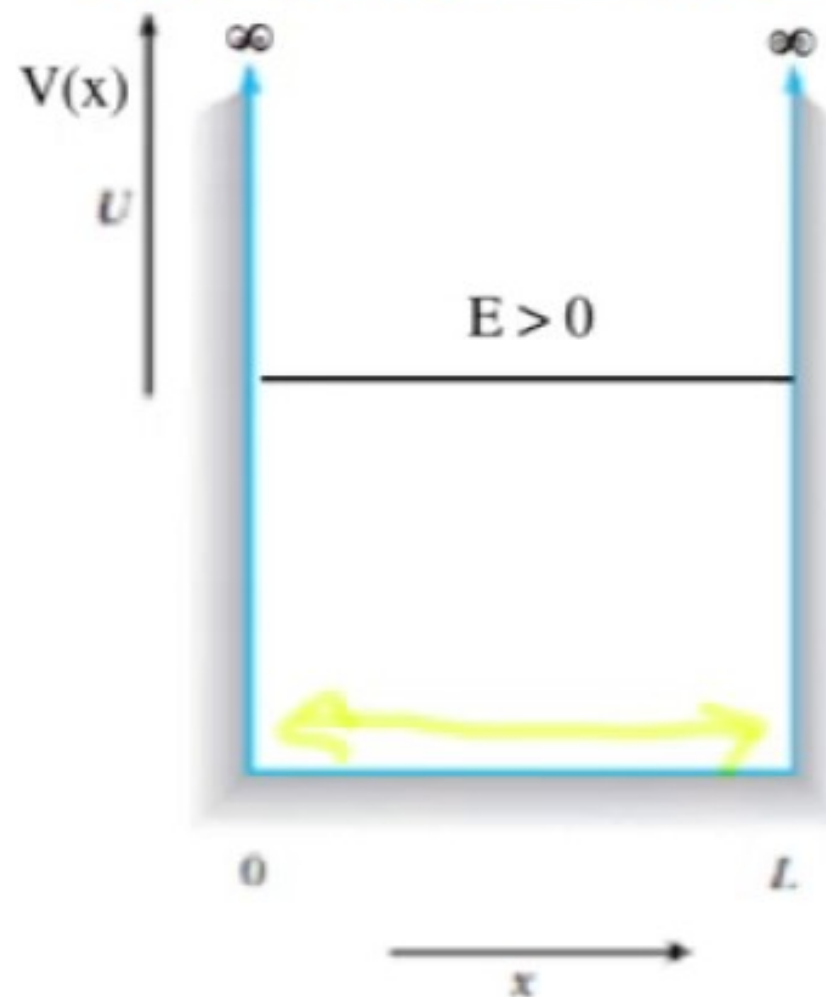
La solution générale de cette équation différentielle est :  
 $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$  où A et B sont des constantes.

# Principes Théoriques

## Puits de potentiel infini



### 2. Puits de potentiel : Puits de potentiel rectangulaire infini



L'équation de Schrödinger pour  $0 < x < L$  est :

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

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$$

L'énergie  $E = p^2 / 2m > 0$  :

$$\varphi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

$$\text{avec : } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Les conditions aux limites donnent :

$$\varphi(0) = 0 = A$$

$$\text{donc } A = 0$$

$$\varphi(L) = 0 = B \sin(kL)$$

$$\text{donc } \sin(kL) = 0$$

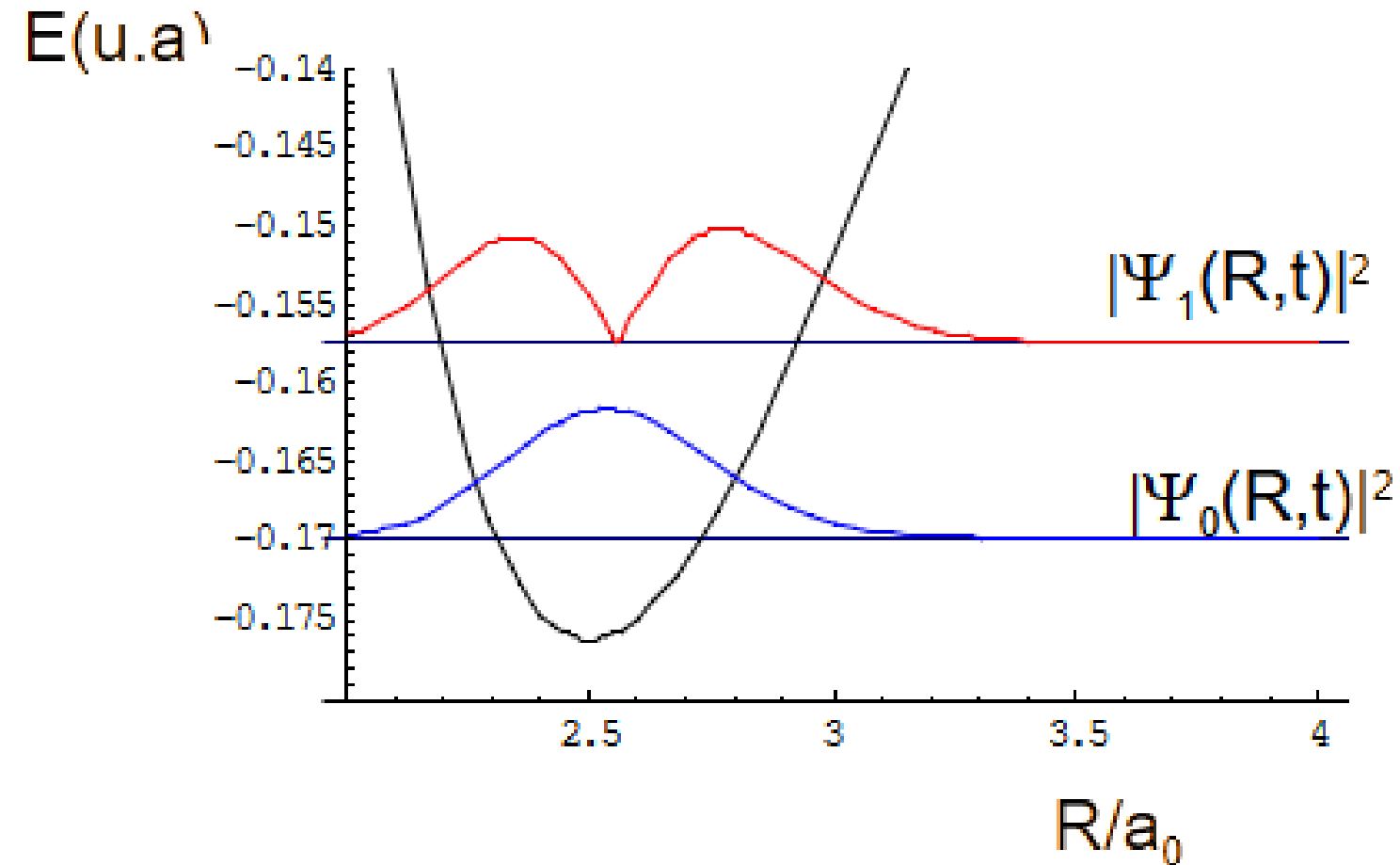
Ne pas appliquer  $\frac{d\varphi}{dx} = 0$  en  $x = 0$   
ou  $L$  car  $\varphi$  n'est pas bornée!



# Principes Théoriques

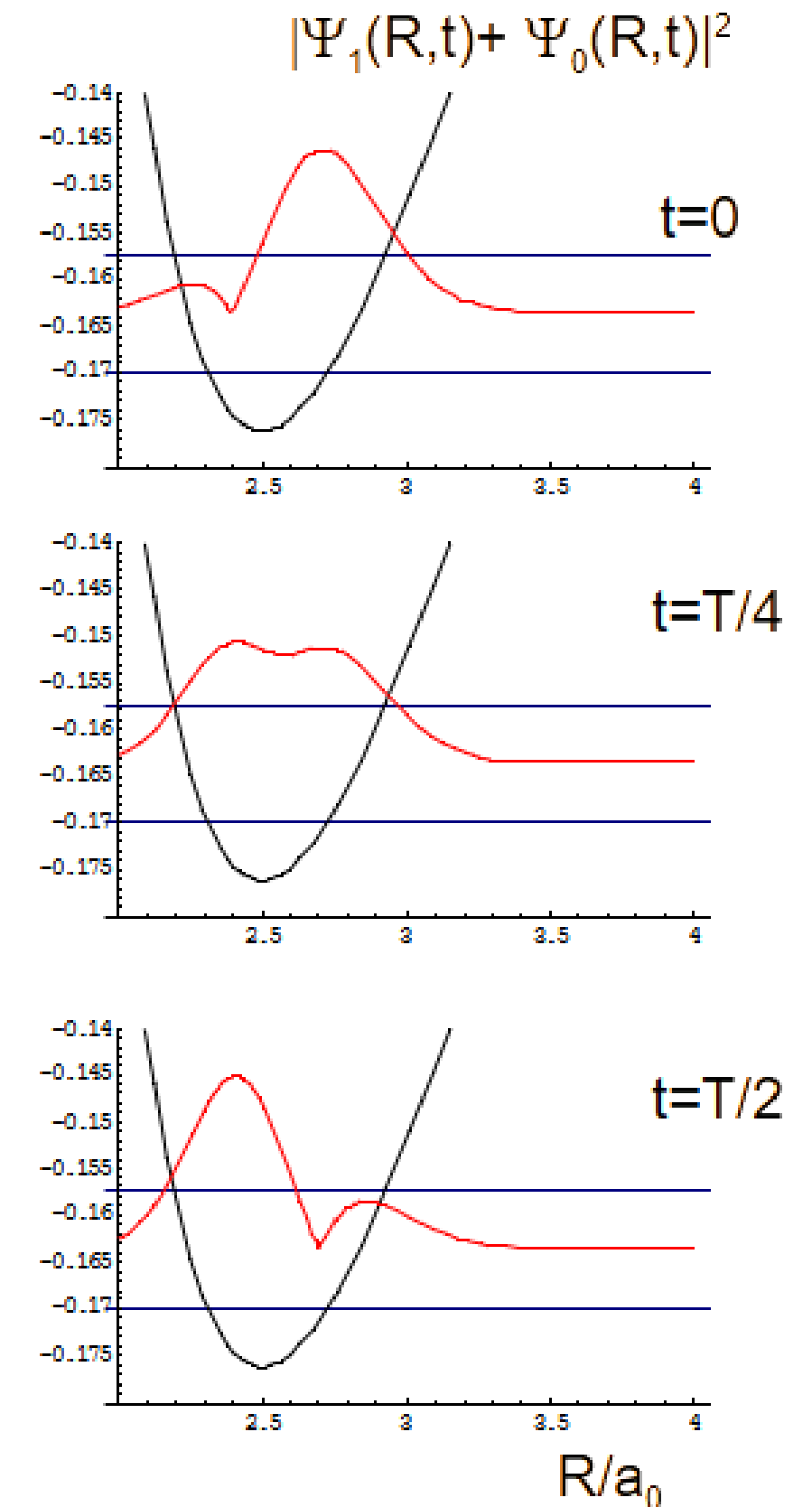
## 2. Différents états

### État stationnaire

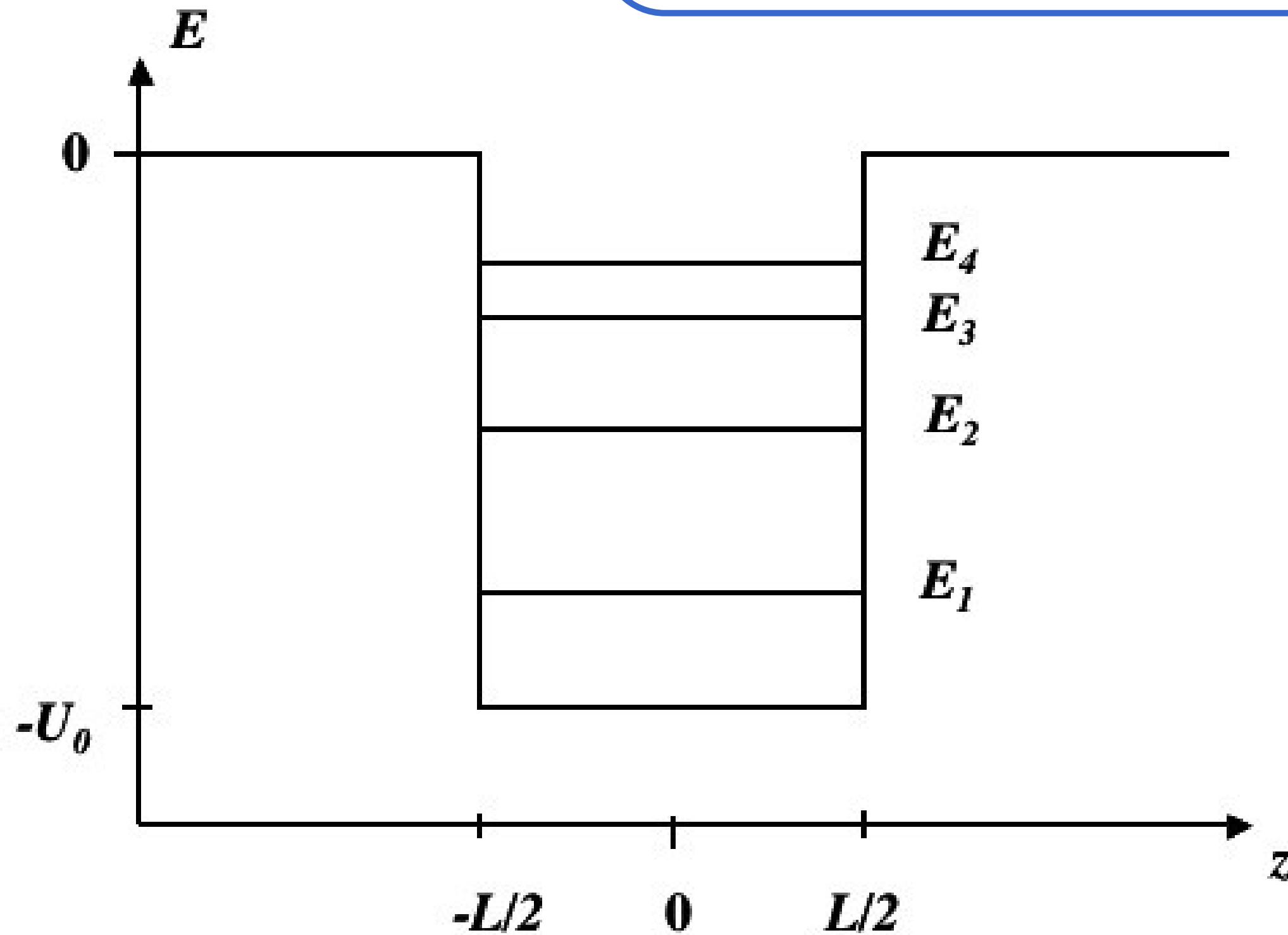


à tout temps  $t$

### État non stationnaire



# Principes Théoriques



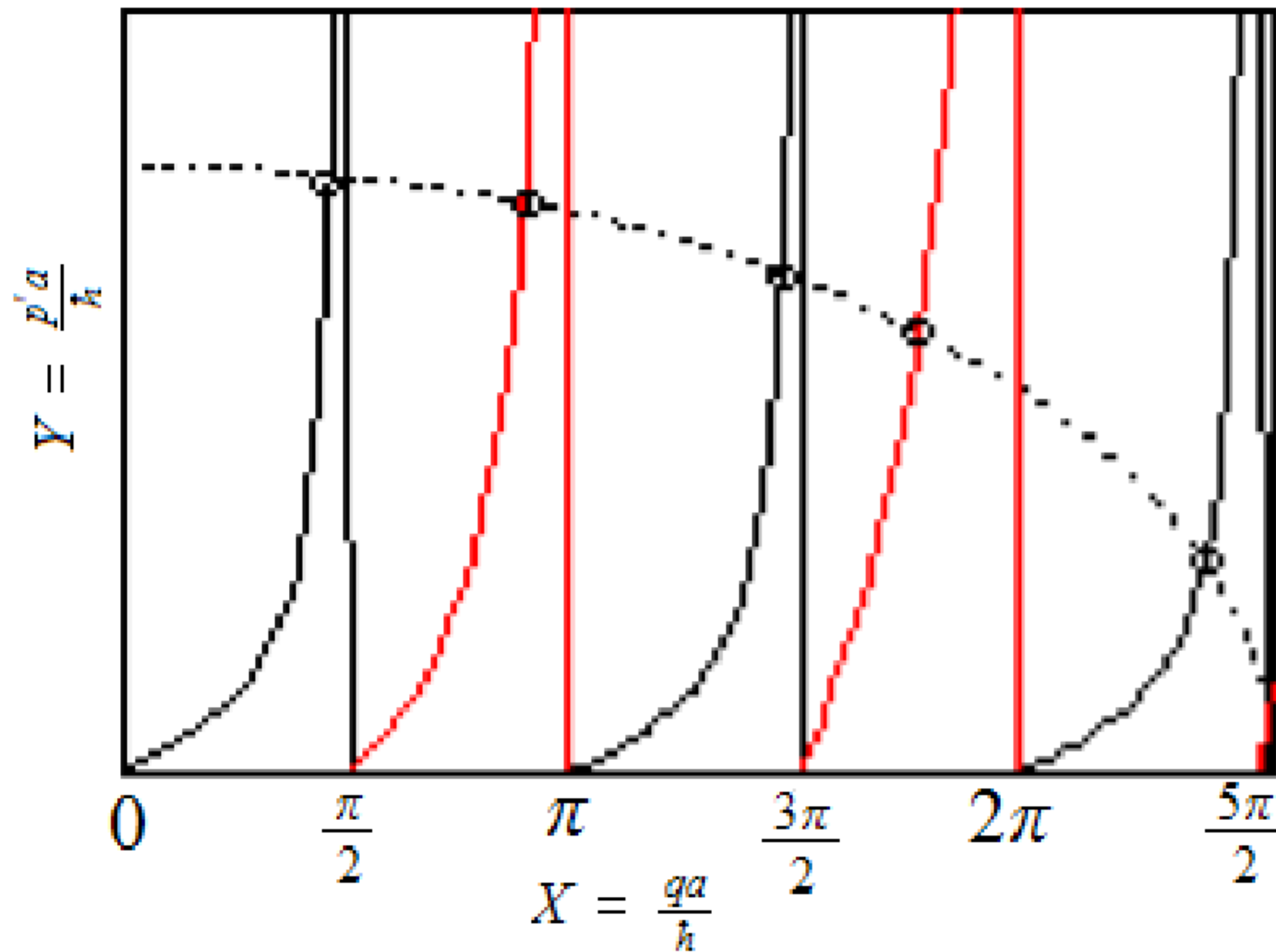
## 2. Conditions aux limites et quantification de l'énergie

Pour que la solution soit physique, la fonction d'onde et sa dérivée doivent être continues aux bords du puits.

Ce sont ces conditions qui imposent des restrictions sur les énergies possibles, appelées la quantification de l'énergie.

Dans ce schéma, les notations  $n=0$  et  $n=1$  représentent les niveaux d'énergie quantifiés (états liés) d'une particule dans un puits de potentiel fini.

# Principes Théoriques



## 3. Nombre d'états liés

Dépend du paramètre  $\eta = (a/\hbar) * \sqrt{(m^*V_0)}$  :

Nombre d'états  $N \approx \text{partie entière}(2\eta/\pi + 1/2)$

$\eta < \pi/2$  : 1 état (fondamental)

$\pi/2 < \eta < \pi$  : 2 états, etc.

Chaque point d'intersection entre l'une des courbes rouges/noires et la courbe en pointillés correspond à un état lié permis.

Une énergie propre pour lequel la fonction d'onde est continue et normalisable

# Principes Théoriques

## Partie I : Puits de Potentiel Infini

### Principes fondamentaux

Le puits de potentiel infini représente le cas idéal où une particule est parfaitement confinée entre deux barrières de potentiel infinies. Mathématiquement, cela se traduit par :

$$V(x) = 0 \text{ pour } a \leq x \leq b \text{ (intérieur du puits)}$$

$$V(x) = \infty \text{ pour } x < a \text{ ou } x > b \text{ (extérieur du puits)}$$

L'équation de Schrödinger indépendante du temps à l'intérieur du puits s'écrit :

$$-\hbar^2/(2m) \times d^2\psi/dx^2 = E \times \psi$$

Sa résolution conduit à des fonctions d'onde de la forme :

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \times \sin(n\pi(x-a)/L) \text{ où } L = b-a$$

Les énergies correspondantes sont quantifiées selon :  $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/(2mL^2)$

# Résolution analytique

## Solution pour le Puits Infini

1. Condition aux Limites en  $x = 0$  :

$$\psi(0) = A \sin(0) + B \cos(0) = 0 \text{ soit } B = 0$$

2. Condition aux Limites en  $x = L$  :

$$\psi(L) = A \sin(kL) + B \cos(kL) = 0 \text{ soit } A \sin(kL) = 0$$

3. Energie et Fonction d'onde : Pour que la fonction soit non triviale ( $A \neq 0$ ), il faut que  $\sin(kL) = 0$ . Cela impose que :

$$kL = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Où  $n$  est un entier non-nul.

4. Valeurs Propres d'Énergie : En résolvant pour  $E$ , nous obtenons :  $k = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar}} = \frac{n\pi}{L}$

Au carré et en simplifiant, l'énergie devient :  $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$

# Résolution analytique

5. Fonction d'onde : La fonction d'onde correspondante est :  $\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$

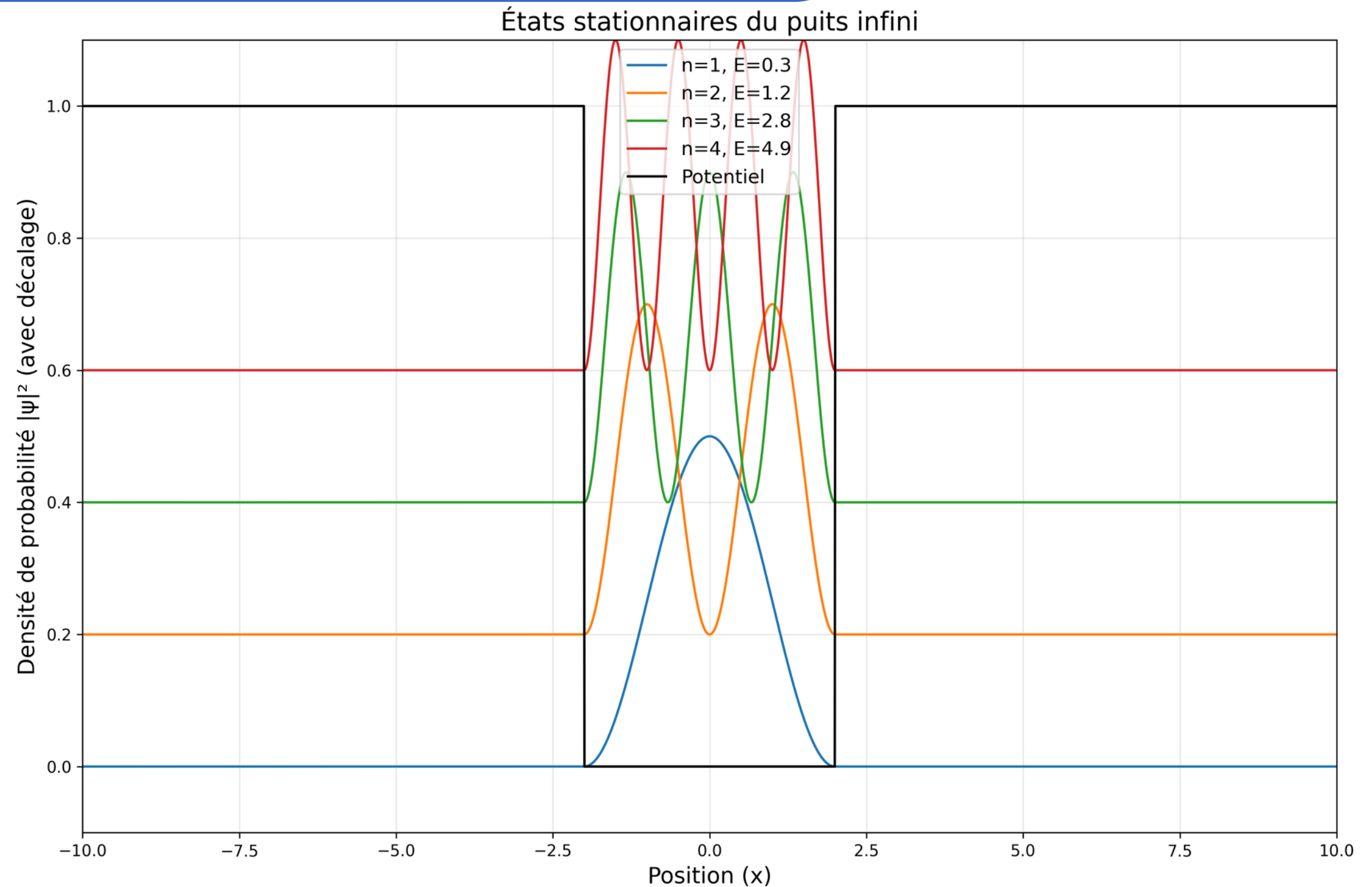
En normalisant ( $\int_0^L |\psi_n|^2 dx = 1$ ), nous trouvons :  $\int_0^L \left| \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right|^2 dx = A^2 L$

En résolvant,  $A^2 = 2/L$ , donc la fonction d'onde normalisée est :  $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$

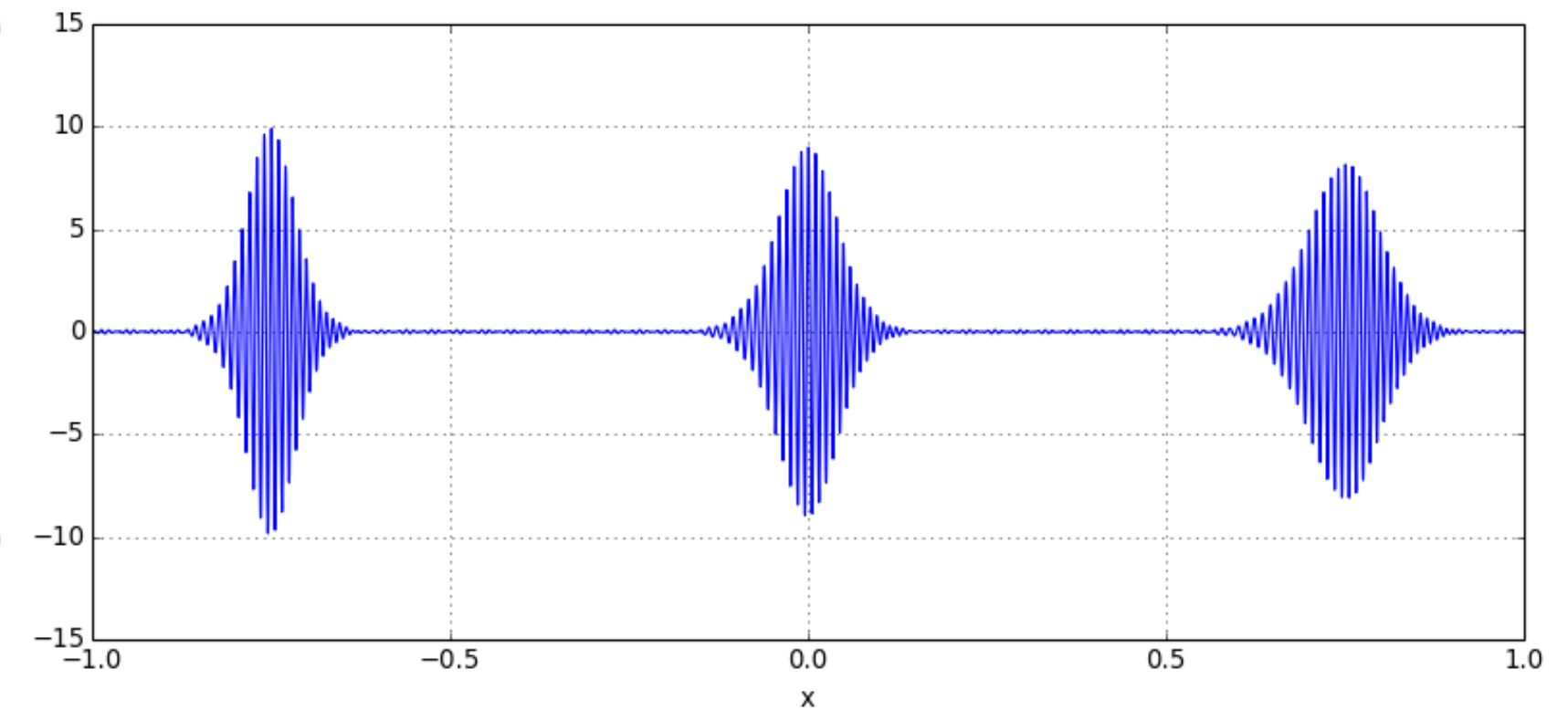
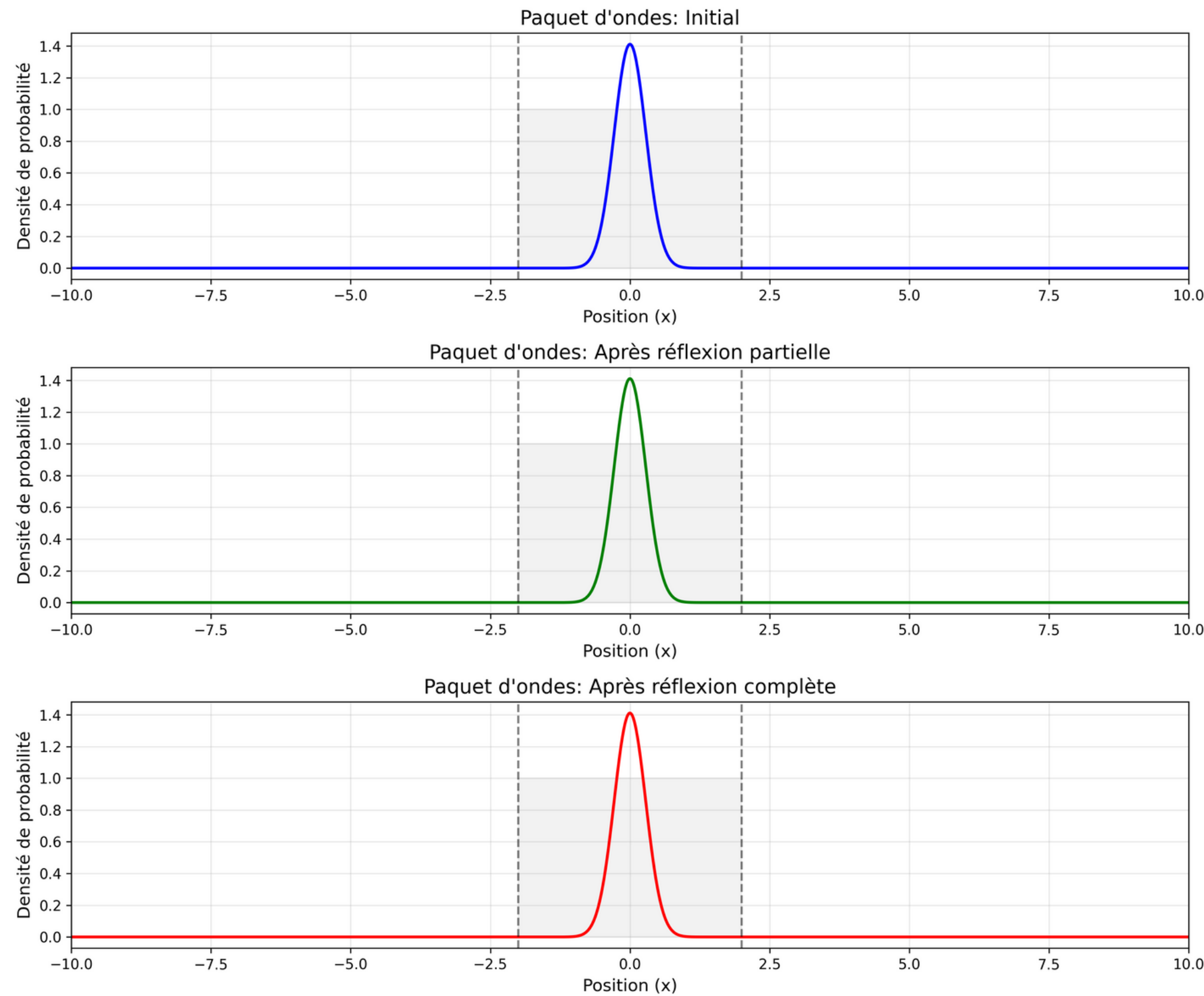
# Résultats & Simulations

Cette figure montre les quatre premiers états stationnaires du puits infini. On observe que l'état fondamental ( $n=1$ ) ne possède aucun nœud, et que chaque état  $n$  possède  $(n-1)$  nœuds.

Plus l'énergie augmente, plus les oscillations sont rapides.



Cette visualisation des fonctions d'onde met en évidence leur forme caractéristique. La fonction d'onde est strictement nulle à l'extérieur du puits et s'annule aux bords, avec l'état fondamental présentant une forme en demi-sinus.

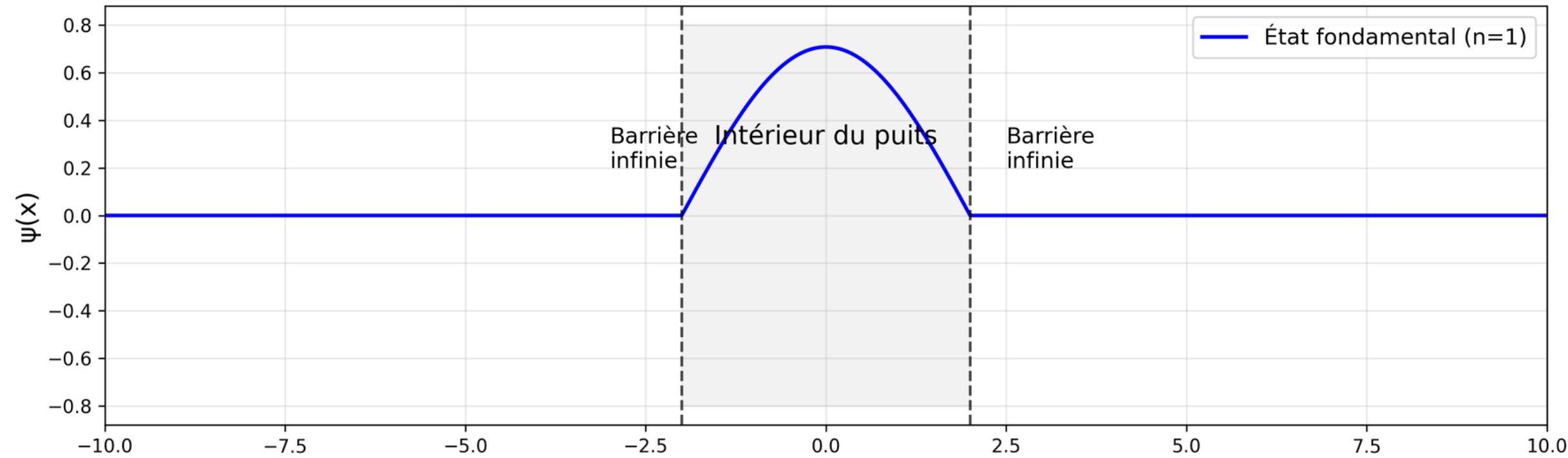


Axe y : amplitude de la fonction d'onde  $\Psi(x, t)$   
Axe x : position dans l'espace,

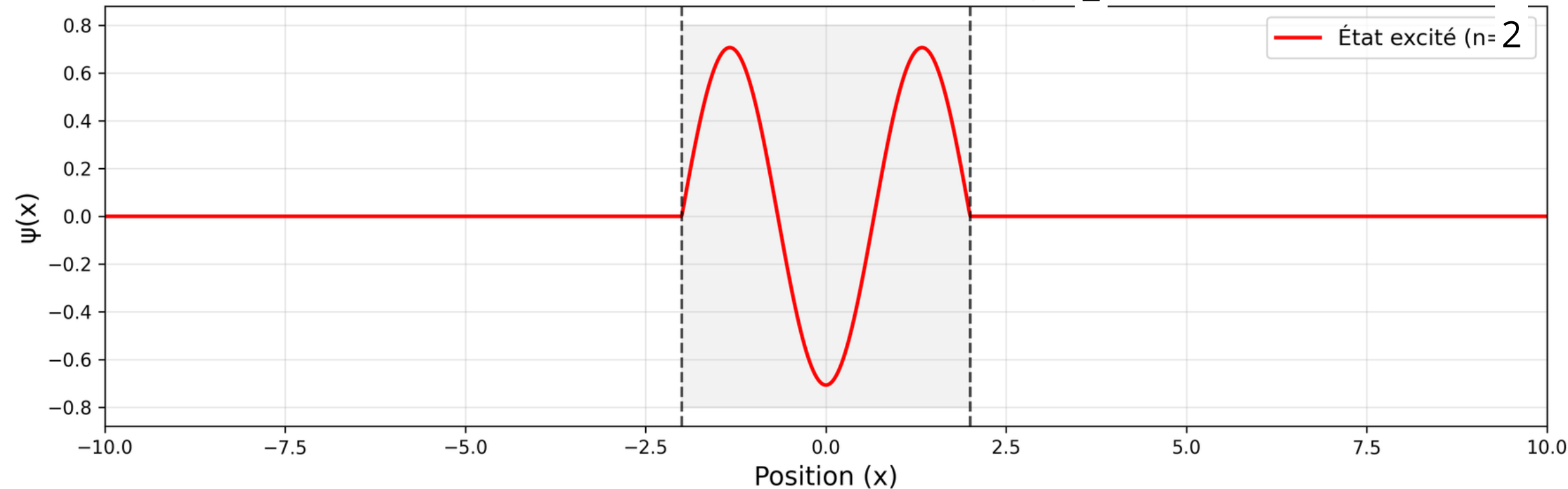
Cette séquence montre l'évolution temporelle d'un paquet d'ondes gaussien dans le puits.  
On observe la propagation initiale, la réflexion totale aux bords, et les interférences qui apparaissent après réflexion.

# Résultats & Simulations

Fonction d'onde de l'état fondamental (n=1)



Fonction d'onde d'un état excité (n=2)



Cette visualisation détaille la forme de la fonction d'onde dans les trois régions : avant le puits (superposition d'onde incidente et réfléchie), dans le puits (oscillations modifiées), et après le puits (onde transmise).

## Partie II : Puits de Potentiel Fini

### Principes fondamentaux

Contrairement au puits infini, le puits de potentiel fini présente des barrières de hauteur finie. Son potentiel s'écrit :

$$V(x) = V_0 \text{ pour } a \leq x \leq b \text{ (} V_0 < 0, \text{ à l'intérieur du puits)}$$

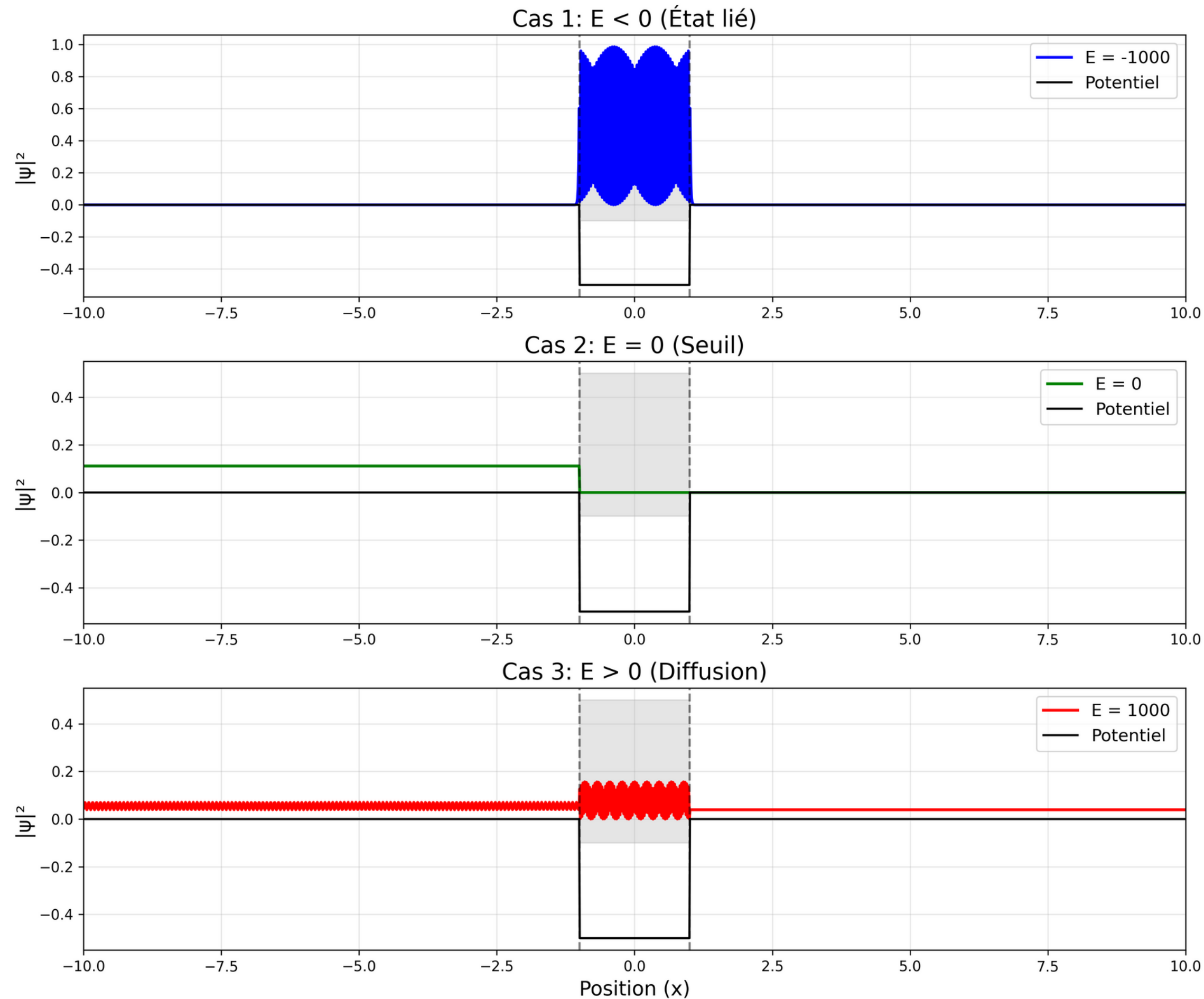
$$V(x) = 0 \text{ pour } x < a \text{ ou } x > b \text{ (à l'extérieur du puits)}$$

La résolution de l'équation de Schrödinger conduit à distinguer plusieurs cas selon l'énergie de la particule :

États liés ( $E < 0$ ) : La particule est majoritairement confinée dans le puits, mais avec une probabilité non nulle de présence à l'extérieur (effet tunnel).

États de diffusion ( $E > 0$ ) : La particule peut se propager librement, mais subit partiellement réflexion et transmission au niveau du puits.

Le cas limite au seuil ( $E = 0$ ) : C'est un cas limite entre les états liés et les états de diffusion, la particule est à la frontière entre être piégée et être libre

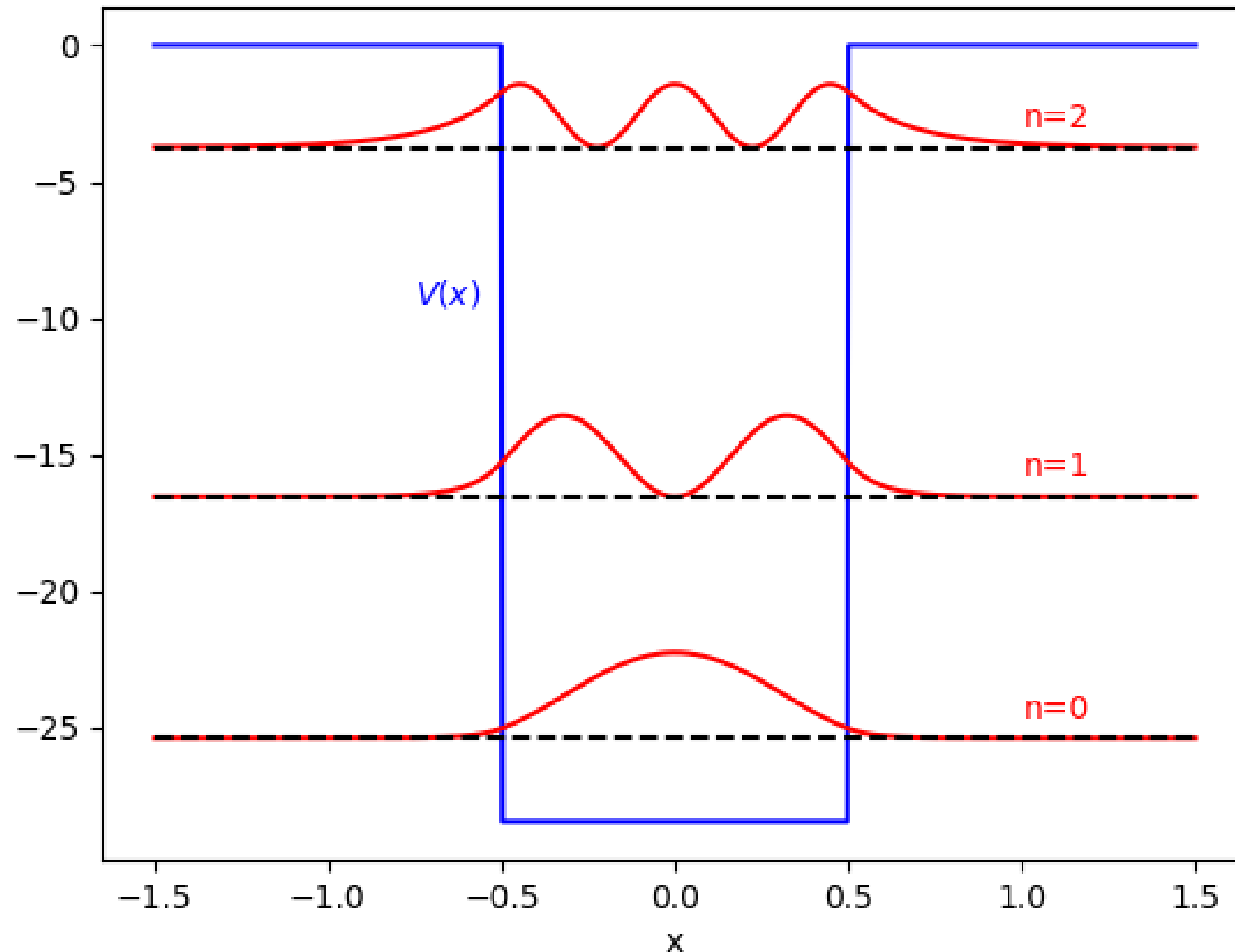


Cette figure compare trois situations énergétiques différentes dans le puits fini :

- un état lié ( $E < 0$ ),
- le cas limite au seuil ( $E = 0$ ),
- un état de diffusion ( $E > 0$ ).

# Principes Théoriques

Densité de probabilité de présence



## 4. Densité de probabilité

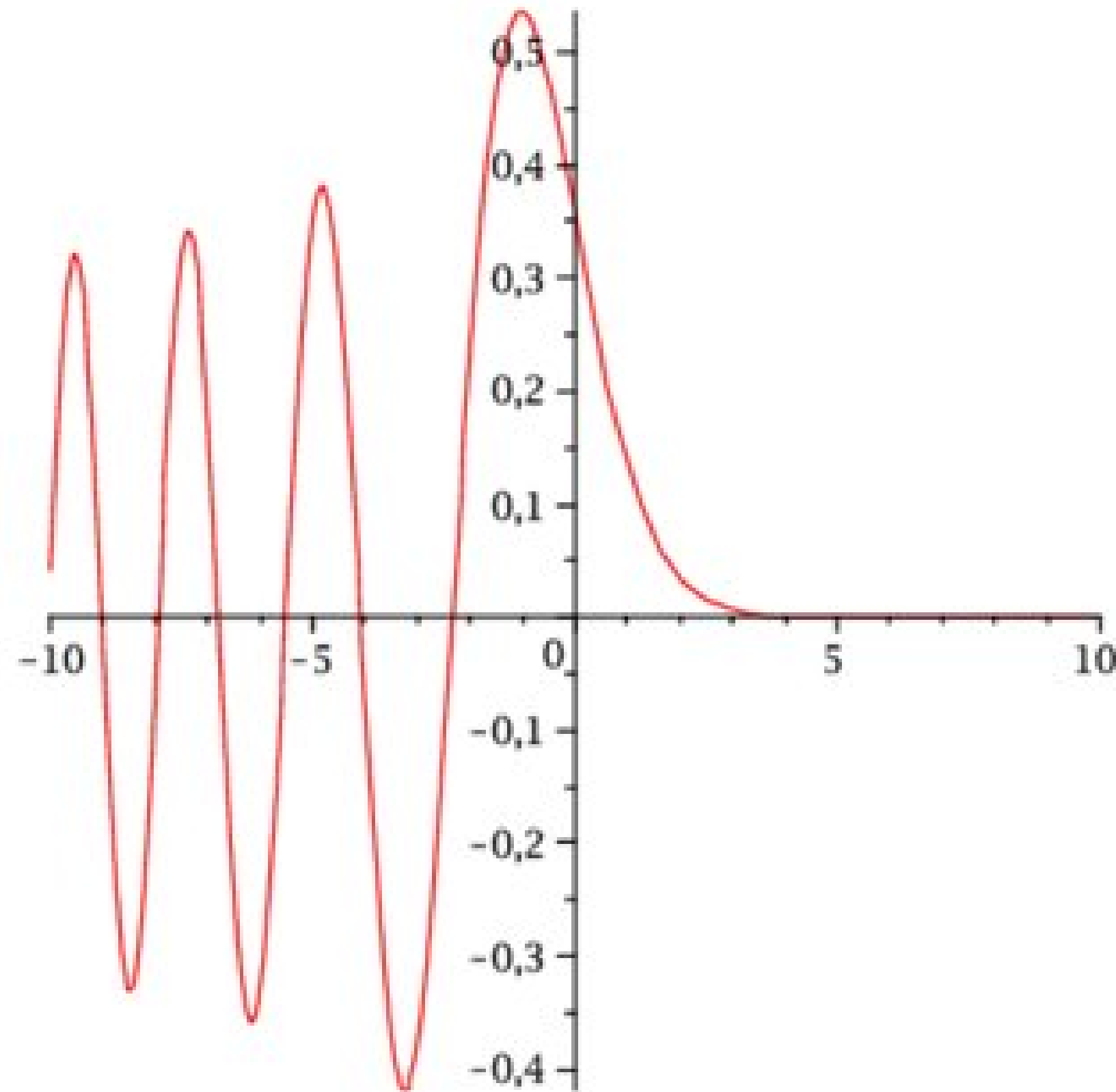
Intérieur du puits :

$|\psi_{\text{int}}|^2$  oscille avec des maxima/minima

Extérieur du puits (effet tunnel) :

$$|\psi_{\text{ext}}|^2 \propto \exp(-2\kappa |x|)$$

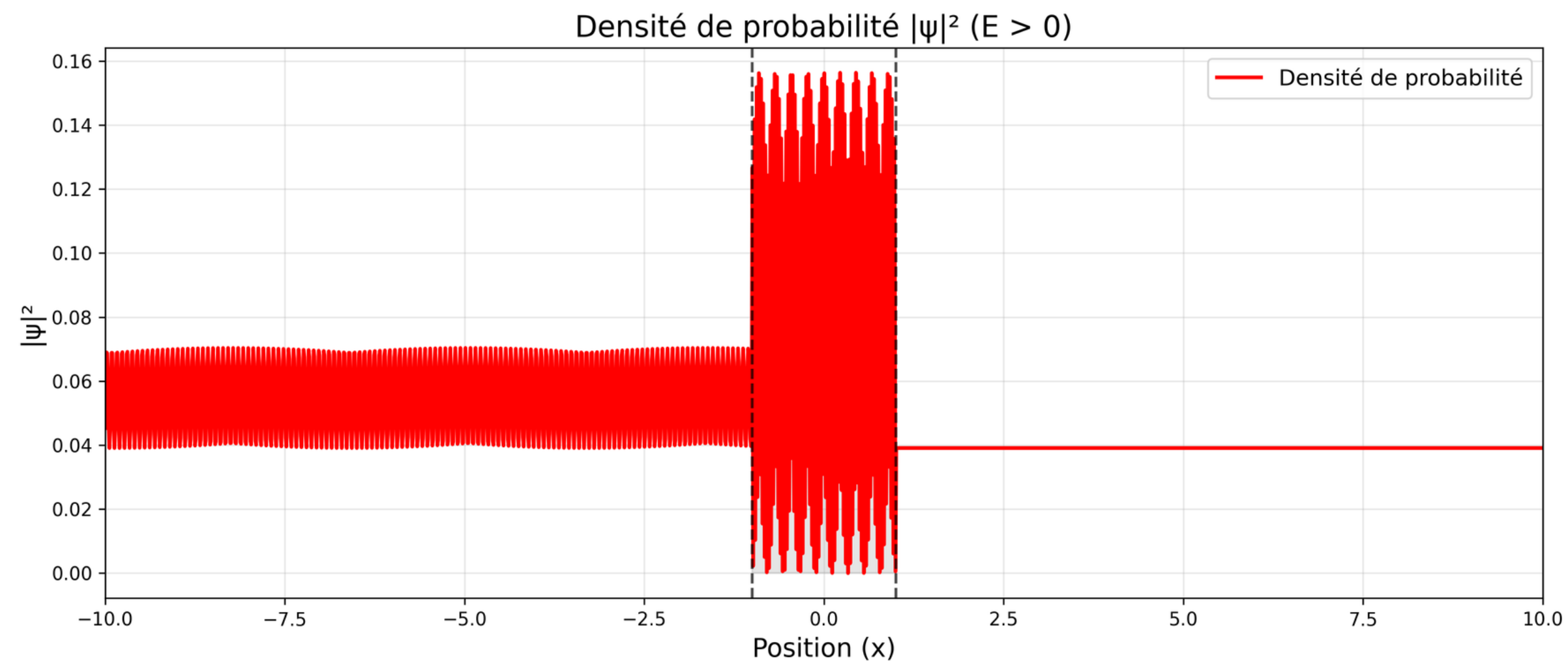
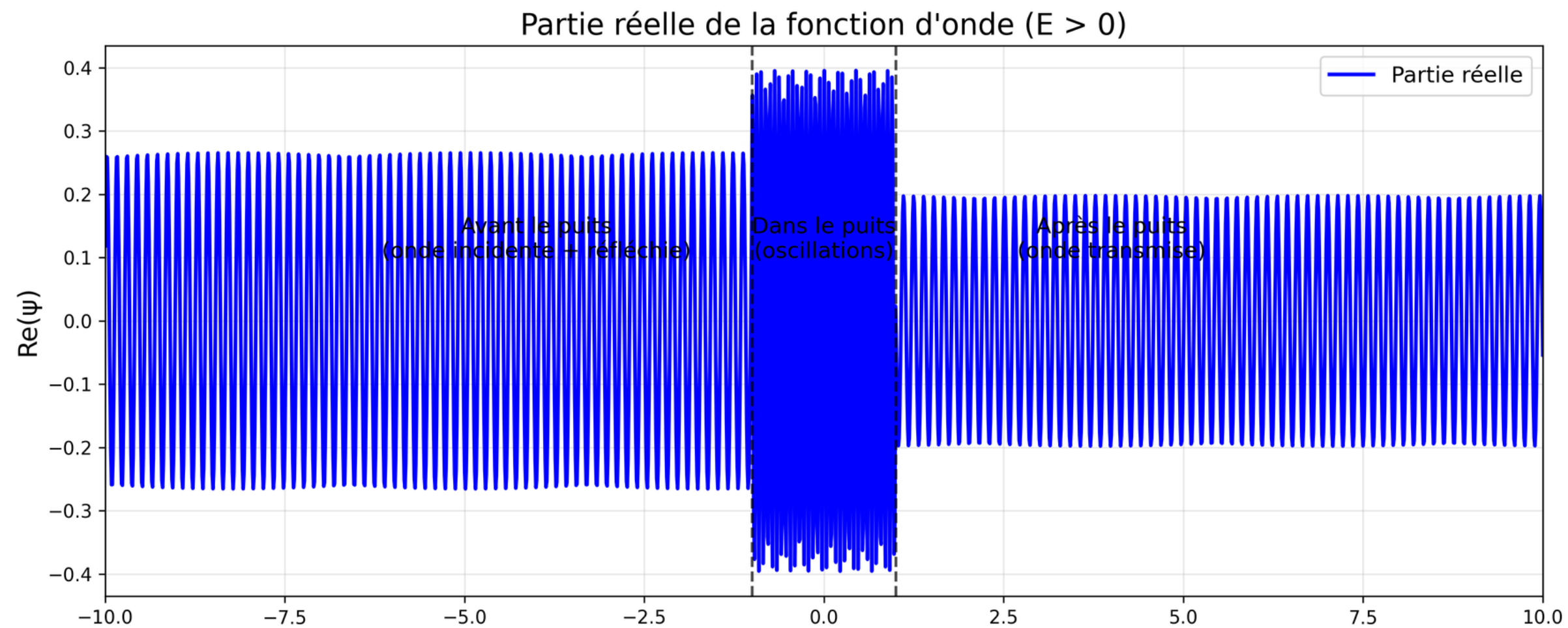
Longueur de pénétration :  $\delta = 1/\kappa$



## 5. Implications physiques

Effet tunnel : La décroissance exponentielle hors du puits montre la probabilité non-nulle dans les régions classiquement interdites

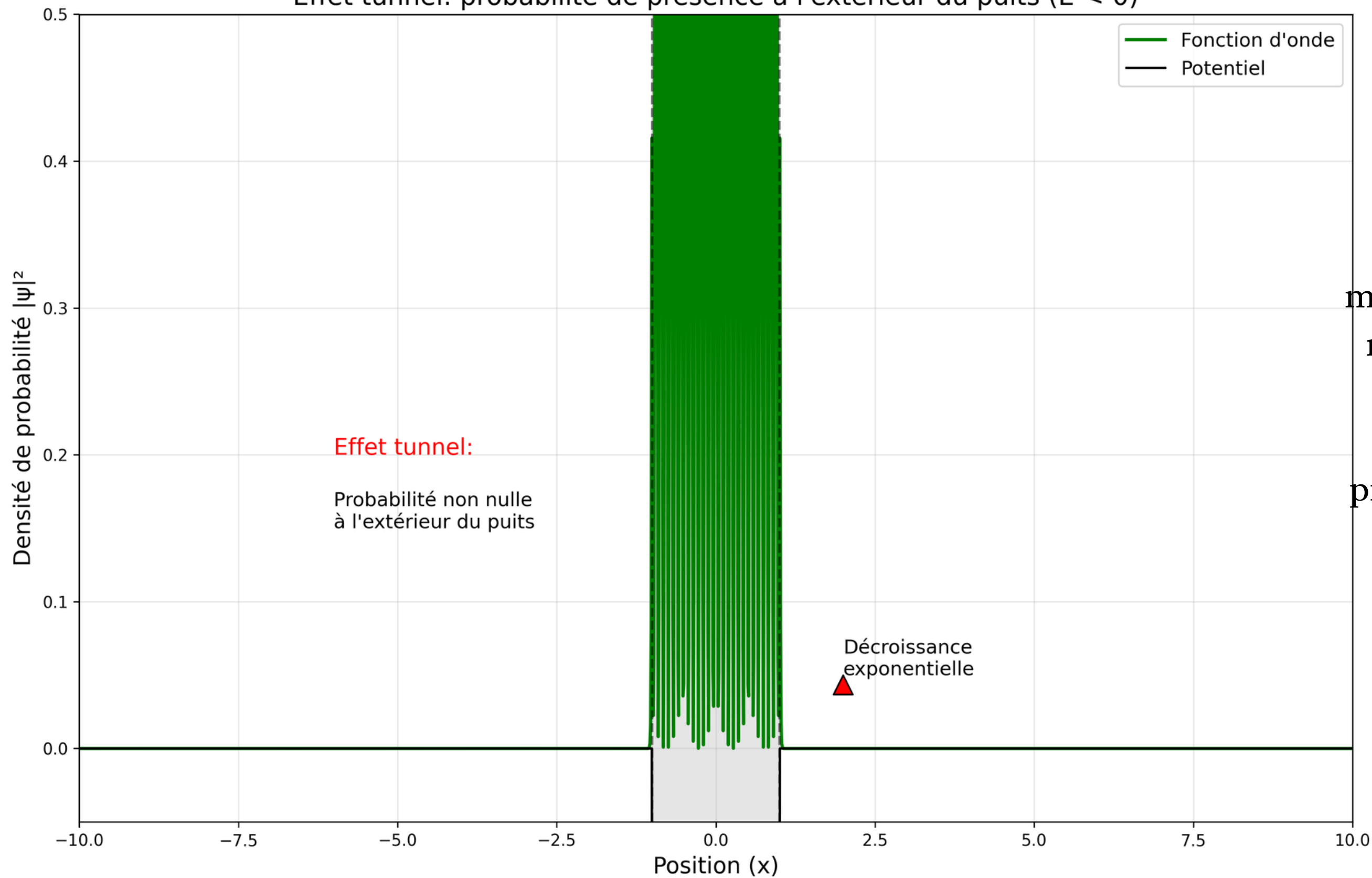
Seuil critique : Pour  $V_0$  ou  $a$  est trop petit, seul l'état fondamental existe



Le graphique bleu représente la partie réelle de la fonction d'onde avec un état de diffusion on peut voir une forme de cosinusoidal.

La probabilité dans I

Effet tunnel: probabilité de présence à l'extérieur du puits ( $E < 0$ )



Cette figure illustre l'effet tunnel, montrant comment la fonction d'onde ne s'annule pas aux bords, présente une décroissance exponentielle à l'extérieur, et maintient une probabilité non nulle dans les régions classiquement interdites.

# Aspects Pédagogiques

## Partie III : Aspects Pédagogiques

Pertinence de la modélisation

Simplicité conceptuelle : Le puits de potentiel offre un modèle mathématiquement accessible tout en capturant les phénomènes quantiques essentiels.

Visualisation intuitive : Les graphiques permettent de visualiser concrètement des phénomènes abstraits comme la pénétration de la fonction d'onde dans les régions classiquement interdites.

Applications réelles : Le modèle trouve des applications directes dans :

- Les dispositifs à semi-conducteurs
- Les microscopes à effet tunnel
- La désintégration alpha des noyaux

# Limites de l'approche

## Simplifications excessives :

- Le modèle considère un potentiel unidimensionnel
- Les systèmes réels sont tridimensionnels (ici que 1 dimension)
- Potentiels idéalisés

## Limitations techniques :

- Le code utilise des approximations numériques
- Possibles erreurs de calcul
- Effets de bord : Les limites du domaine peuvent réfléchir artificiellement le paquet d'ondes.

## Aspects non modélisés :

- Effets relativistes
- Champs magnétiques et électriques externes
- Effets de décohérence : Ignore l'interaction avec l'environnement (durée de vie surestimée des états quantiques)

# Modèle plus réaliste

Potentiel de Woods-Saxon (modèle réaliste)

C'est un potentiel lisse utilisé en physique nucléaire et atomique pour mieux représenter l'interaction entre une particule (comme un électron lent) et un atome.

Il évite les bords brusques dans le potentiel, ce qui aide à mieux représenter les propriétés physiques des systèmes

Forme du potentiel :

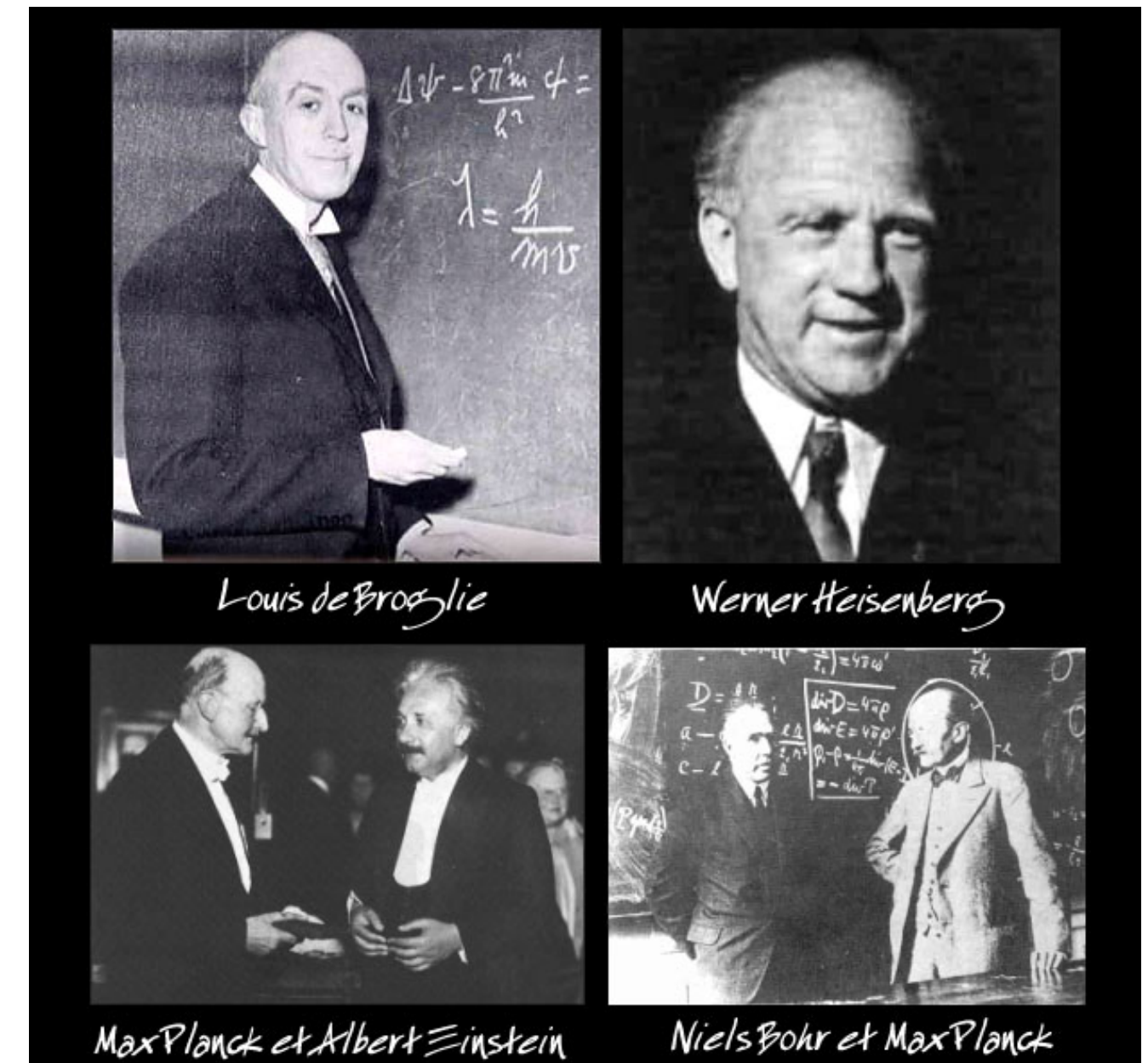
$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)}$$

- $V_0$  : profondeur,
- $R$  : taille de l'atome,
- $a$  : lissage des bords.

# Conclusion

Cette étude des puits quantiques a permis de mettre en évidence les comportements fondamentalement quantiques des particules :

- Quantification de l'énergie
- Effet tunnel
- Interférences quantiques
- Réflexion quantique
- Importance de la modélisation :



# Bibliographie

- **1. Ouvrages Fondamentaux**
  - Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., & Laloë, F. (2020). Mécanique quantique (Tome 1). Hermann.
- **2. Méthodes Numériques**
  - Dr Nozman : "L'effet tunnel quantique en 5 minutes" : Explication visuelle et simple 2.
  - La Physique Autrement (Julien Bobroff)
  - "Résolution de l'équation de Schrödinger" : Approche pédagogique avec animations
  - "Chaîne YouTube E-Learning Physique - Puits quantiques et mécanique quantique expliqués"
- **4. Articles Scientifiques**
  - "La Lumière Révélée" (Serge Haroche)
  - Wikipedia : Article "Puits quantique" : Bases théoriques
- **5. Ressources Numériques**
  - Python Software Foundation (2023). Documentation des librairies :
  - NumPy
  - Matplotlib (visualisations)
  - SciPy (résolution d'équations différentielles)
  - <https://loicseguin.com/nyc/ondes.html#superposition-dondes>