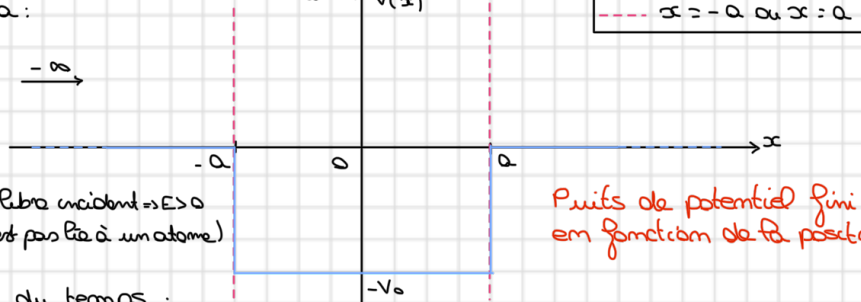


$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On suppose $E > 0$ donc cas de diffusion (particule incidente venant de $-\infty$)
 Schema :



Cela donne 3 zones

- I) $x < -a$
- II) $-a < x < a$
- III) $x > a$

(électron libre incident $\Rightarrow E > 0$
 car il n'est pas lié à un atome)

Puits de potentiel fini avec $V(x)$
 en fonction de la position x

Equation de Schrödinger indépendante du temps :

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

Solutions dans les 3 régions :

Région 1 : $x < -a$

$$\Rightarrow V(x) = 0$$

Donc l'équation donne :

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

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

C'est une EDO à coeff const homogène (pas de 2nd membre) linéaire :

$$\text{donc } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi}{dx^2} - E \phi(x) = 0$$

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

ED d'un "oscillateur harmonique (OH)"

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

$$\text{On pose } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\text{D'où : } \frac{d^2 \phi}{dx^2} + k^2 \phi(x) = 0$$

onde incidente

venant de la gauche

onde réfléchie allant vers la gauche

La solution de cette ED est : $\phi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$, $x < -a$

(= somme d'1 onde incidente + 1 onde réfléchie)

En prenant la partie réelle : $\phi_1(x) = A_1 \cos(kx) + B_1 \sin(kx)$

Région 2 : $-a \leq x \leq a$

$$\Rightarrow V(x) = -V_0$$

$$\text{Equation différentielle : } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi}{dx^2} - V_0 \phi(x) = E \phi(x)$$

$$\text{2 cas : } \begin{cases} E < -V_0 \\ E > -V_0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} E + V_0 < 0 \\ E + V_0 > 0 \end{cases}$$

On sait que $E > 0$

Et $V_0 > 0$ par convention

Donc on doit avoir $E + V_0 > 0$

Ainsi on garde uniquement le 2^{ème} cas :

$E > -V_0$:

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

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

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

$$\text{On pose } q = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 \phi}{dx^2} + q^2 \phi(x) = 0$$

Solution du type : $\phi_2(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}$
 $= A_2 \cos(qx) + B_2 \sin(qx)$

Région 3: $x > a$
 $\Rightarrow V(x) = 0$

$$\begin{aligned} \text{ED: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} &= E\phi(x) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} - E\phi(x) = 0 \\ &\Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + E\phi(x) = 0 \\ &\Leftrightarrow \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x) = 0 \\ &\Leftrightarrow \frac{d^2\phi}{dx^2} + k^2 \phi(x) = 0 \text{ avec } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \end{aligned}$$

Solution générale: $\phi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}$

On n'a pas d'onde incidente venant de $+\infty$ donc $B_3 e^{-ikx} = 0$
 $\Rightarrow \phi_3(x) = A_3 e^{ikx}$

$$\text{d'où } \phi(x) = \begin{cases} \phi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & x < -a \\ \phi_2(x) = A_2 \cos(qx) + B_2 \sin(qx) & |x| < a \\ \phi_3(x) = A_3 e^{ikx} & x > a \end{cases}$$

Conditions de continuité:

En $x = -a$, on doit avoir $\phi_1(-a) = \phi_2(-a)$
 et $\phi_1'(-a) = \phi_2'(-a)$

En $x = a$, on doit avoir: $\phi_2(a) = \phi_3(a)$
 et $\phi_2'(a) = \phi_3'(a)$

$$\begin{aligned} \phi_1(-a) = \phi_2(-a) &\Leftrightarrow A_1 e^{-ika} + B_1 e^{ika} = A_2 e^{-iqa} + B_2 e^{iqa} \\ \phi_1'(-a) = \phi_2'(-a) &\Leftrightarrow ikA_1 e^{-ika} - ikB_1 e^{ika} = iqA_2 e^{-iqa} - iqB_2 e^{iqa} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \phi_2(a) = \phi_3(a) &\Leftrightarrow A_2 e^{iqa} + B_2 e^{-iqa} = A_3 e^{ika} \\ \phi_2'(a) = \phi_3'(a) &\Leftrightarrow iqA_2 e^{iqa} - iqB_2 e^{-iqa} = ikA_3 e^{ika} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A_1 e^{-ika} + B_1 e^{ika} = A_2 e^{-iqa} + B_2 e^{iqa} & (1) \\ ikA_1 e^{-ika} - ikB_1 e^{ika} = iqA_2 e^{-iqa} - iqB_2 e^{iqa} & (2) \\ A_2 e^{iqa} + B_2 e^{-iqa} = A_3 e^{ika} & (3) \\ iqA_2 e^{iqa} - iqB_2 e^{-iqa} = ikA_3 e^{ika} & (4) \end{cases}$$

On a $R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2$: proba que la particule soit réfléchi par la barrière

Et $T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2$: proba que la particule soit transmise

$$\text{Et } R + T = 1$$

Il reste à coder un algorithme pour trouver les états stationnaires
 = * calcul des rapports $\frac{B_1}{A_1}$ et $\frac{A_3}{A_1}$

* déduire R et T

* tracer $T(E)$ pour visualiser l'effet Ramsauer-Townsend

$$\text{On pose } \vec{X} = \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \\ A_2 \\ B_2 \\ A_3 \end{pmatrix}$$

$$\text{Notre système devient: } \Rightarrow \begin{cases} A_1 e^{-ika} + B_1 e^{ika} - A_2 \cos(qa) + B_2 \sin(qa) = 0 \\ -ikA_1 e^{-ika} + ikB_1 e^{ika} + qA_2 \sin(qa) + qB_2 \cos(qa) = 0 \\ -A_2 \cos(qa) - B_2 \sin(qa) + A_3 e^{ika} = 0 \\ qA_2 \sin(qa) - qB_2 \cos(qa) - ikA_3 e^{ika} = 0 \end{cases}$$

$$\text{On pose } M(E) = \begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} & -\cos(qa) & \sin(qa) & 0 \\ -ike^{-ika} & ike^{ika} & q\sin(qa) & q\cos(qa) & 0 \\ 0 & 0 & -\cos(qa) & -\sin(qa) & e^{ika} \\ 0 & 0 & q\sin(qa) & -q\cos(qa) & -ike^{ika} \end{pmatrix}$$

$$\text{tel que } M(E) \cdot \vec{X} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow M(E) \cdot \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \\ A_2 \\ B_2 \\ A_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$