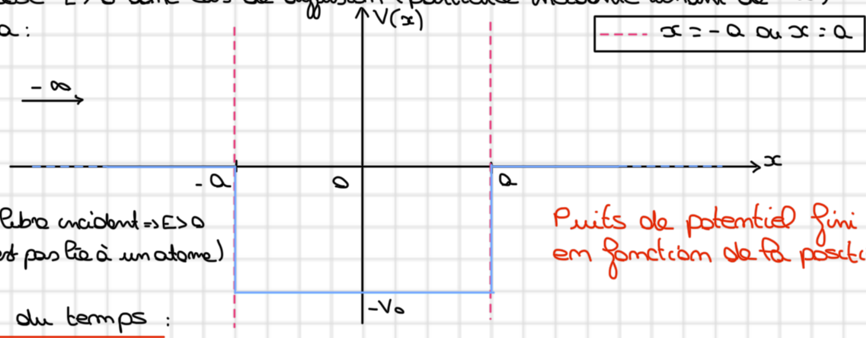
$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } |x| < a \ \ (-a \leq x \leq a) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$

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

Schema :



(electron 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

Cela donne 3 zones

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

Equation de Schrodinger indépendante du temps :

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

Solutions dans les 3 régions :

Region 1 : $x < -a$
$\Rightarrow V(x) = 0$
Donc l'equation donne :

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

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

C'est une EDO2 à coeff csts homogene (pas de 2^{nd} membre) lineaire :

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

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

ED d'un "oscillateur harmonique (OH)"

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

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

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

La solution de cette ED est : $\phi_1(x) = \underbrace{A_1 e^{ikx}}_{\text{onde incidente venant de la gauche}} + \underbrace{B_1 e^{-ikx}}_{\text{onde réfléchie allant vers la gauche}}$, $x < -a$

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

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

Region 2 : $-a \leq x \leq a$
$\Rightarrow V(x) = -V_0$

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

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

Or 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^{eme} cas :
$E > -V_0$:

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

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

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

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

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

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

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

ED : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi}{dx^2} = E\phi(x) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi}{dx^2} - E\phi(x) = 0$

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

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

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

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

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

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

Condition 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 $\phi_2'(a) = \phi_3'(a)$

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

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

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

On a R qui : proba que la particule soit réfléchie par la marche

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

Et $R + T = 1$

Donc $R = 1 - T$

On a $A_3 e^{ika} = A_2 e^{iqa} + B_2 e^{-iqa}$: (3)
$\Leftrightarrow B_2 e^{-iqa} = A_3 e^{ika} - A_2 e^{iqa}$
$\Leftrightarrow B_2 = e^{iqa}(A_3 e^{ika} - A_2 e^{iqa})$

On remplace dans (4):
$\Rightarrow ikA_3 e^{ika} = iq(A_2 e^{iqa} - e^{iqa}(A_3 e^{ika} - A_2 e^{iqa})e^{-iqa})$
$= iq(A_2 e^{iqa} - A_3 e^{ika} + A_2 e^{iqa})$
$= iq(2A_2 e^{iqa} - A_3 e^{ika})$
$\Leftrightarrow ikA_3 e^{ika} = 2iqA_2 e^{iqa} - A_3 iq e^{ika}$
$\Leftrightarrow 2iqA_2 e^{iqa} = A_3 e^{ika}(ik + iq)$

$\Rightarrow A_3 = \frac{2iq}{ik+iq} A_2 e^{iqa - ika}$

$B_2 = e^{iqa}\left(\left(\frac{2iq}{ik+iq} A_2 e^{iqa - ika}\right)e^{ika} - A_2 e^{iqa}\right)$

$= \frac{2iq}{ik+iq} A_2 e^{2iqa} - A_2 e^{2iqa}$

$= A_2 e^{2iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)$

Pour B_1 : On a :

$$\begin{cases} A_1 e^{-ika} + B_1 e^{ika} = A_2 e^{-iqa} + B_2 e^{iqa} \quad (1) \\ ik\left(e^{-ika} - B_1 e^{ika}\right) = iq\left(A_2 e^{-iqa} - B_2 e^{iqa}\right) \quad (2) \end{cases} \quad \text{avec} \quad B_2 = A_2 e^{2iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A_1 e^{-ika} + B_1 e^{ika} = A_2 e^{-iqa} + A_2 e^{2iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)e^{iqa} \quad (1) \\ ik\left(A_1 e^{-ika} - B_1 e^{ika}\right) = iq\left(A_2 e^{-iqa} - A_2 e^{2iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)e^{iqa}\right) \quad (2) \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} A_1 e^{-ika} + B_1 e^{ika} = A_2 e^{-iqa} + A_2\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)e^{3iqa} \quad (1) \\ ik\left(A_1 e^{-ika} - B_1 e^{ika}\right) = iq\left(A_2 e^{-iqa} - A_2\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)e^{3iqa}\right) \quad (2) \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} A_1 e^{-ika} + B_1 e^{ika} = A_2\left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) \\ ik\left(A_1 e^{-ika} - B_1 e^{ika}\right) = A_2\, iq\left(e^{-iqa} - e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} B_1 e^{ika} = A_2\left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) - A_1 e^{-ika} \\ ik\left(A_1 e^{-ika} - B_1 e^{ika}\right) = A_2\, iq\left(e^{-iqa} - e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} B_1 = e^{-ika}\left(A_2\left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) - A_1 e^{-ika}\right) \\ ik\left(A_1 e^{-ika} - \left(A_2\left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) - A_1 e^{-ika}\right)\right) = A_2\, iq\left(e^{-iqa} - e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} B_1 = e^{-ika}\left(A_2\left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) - A_1 e^{-ika}\right) \\ ik\left(2 A_1 e^{-ika} - A_2 e^{-iqa} - A_2 e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) = A_2\, iq\left(e^{-iqa} - e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) \end{cases}$$

$$\Rightarrow A_2\, iq\left(e^{-iqa} - e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) + A_2\, ik\left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) = 2ik e^{-ika} A_1$$

$$\Rightarrow A_2\left(iq\left(e^{-iqa} - e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) + ik\left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right)\right) = 2ik e^{-ika} A_1$$

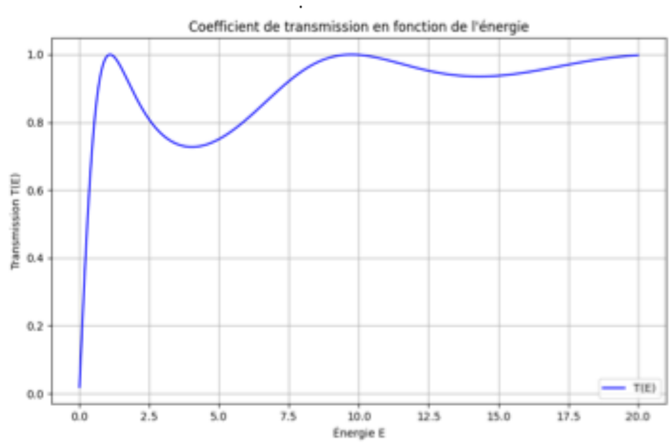
$$\Rightarrow A_2 = A_1 \frac{2ik e^{-ika}}{iq\left(e^{-iqa} - e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) + ik\left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right)}$$

donc $$B_2 = A_1 \frac{2ik e^{-ika}}{iq\left(e^{-iqa} - e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) + ik\left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right)}\, e^{2iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)$$

$$A_3 = \frac{2iq}{ik+iq} A_2 e^{iqa - ika} = \frac{2iq}{ik+iq}\left(\frac{A_1 2ik e^{-ika}}{iq\left(e^{-iqa} - e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) + ik\left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right)}\right) e^{iqa - ika}$$

Et $B_1 = e^{-ika}\left(\dfrac{A_1\, 2ik\, e^{-ika}}{iq\left(e^{-iqa} - e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq}-1\right)\right) + ik\left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq}-1\right)\right)} \left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq} - 1\right)\right) - A_1 e^{-ika} \right)$

On doit maintenant tracer $T(E)$
avec $R(E) + T(E) = 1$
Pour pouvoir ensuite étudier la section efficace de diffusion (diffusion = transmission + réflexion)



$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 \text{ avec } A_3 = \frac{2iq}{ik+iq} A_2 e^{iqa - ika}$$

$$A_2 = A_1 \frac{2ik e^{-ika}}{iq\left(e^{-iqa} - e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq}-1\right)\right) + ik\left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq}-1\right)\right)}$$

donc :
$$T = \left|\frac{A_2}{A_1} \frac{2iq}{ik+iq} e^{i(q-k)a}\right|^2$$

Ainsi :
$$T = \left| \frac{2ik e^{-ika}}{iq\left(e^{-iqa} - e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq}-1\right)\right) + ik\left(e^{-iqa} + e^{3iqa}\left(\frac{2iq}{ik+iq}-1\right)\right)} \times \frac{2iq}{ik+iq} e^{i(q-k)a} \right|^2$$

Lecture graphique de $T(E)$:
* A basse énergie ($E \to 0$) : $T(E) \to 0$
  → l'électron ne passe presque pas à travers le puit (effet tunnel presque nul)
* Autour de $E \simeq 2$: $T(E) \simeq 1$ (= max de transmission)
  ↳ c'est exactement l'effet Ramsauer-Townsend : l'électron traverse l'atome sans être diffusé
* Oscillations avec E : transmissions varie en fonction de l'énergie, avec des minima et maxima dus à des interférences quantiques.
* Pour $E \gg V_0$: $T(E) \to 1$
  ↳ la particule voit de moins en moins de puits.

D'après l'énoncé du projet on a σ qui est la section efficace de diffusion
Donc on s'intéresse à la probabilité qu'un électron soit diffusé par un atome (donc non transmis)
Cette probabilité de diffusion est : $\sigma(E) \propto 1 - T(E)$
Donc :
* Si $T(E) = 1 \Rightarrow \sigma(E) = 0$ → pas de diffusion → l'électron traverse l'atome sans être dévié
* Si $T(E) = 0 \Rightarrow \sigma(E) = 1$ → diffusion totale

Ainsi :
* Sur la courbe les pics à $T(E) \simeq 1$ correspondent aux valeurs de l'énergie pour lesquelles la section efficace devient nulle, comme observé expérimentalement par R. Townsend
→ à certaines énergie, l'électron traverse l'atome sans interaction, ce qui donne un minimum de la section efficace de diffusion

q2. Etats stationnaire :
Pour pouvoir les dessiner il faut prendre la partie réel de nos fonctions $\phi_{1/2/3}$ et posé $A_1 = 1$ par exemple et remplacer les constantes par ce qu'on trouvé précédemment
Si sur la courbe on observe un "saut" c'est car on a pris la partie réelle de $\phi(x)$
Si on veut la densité de probabilité on dessine $|\phi(x)|^2$
Si on veut juste la fonction d'onde c'est $\phi(x)$