

Projet Numérique de Physique Moderne

Comment expliquer l'effet Ramsauer-Townsend à l'aide d'un modèle à une dimension d'espace ?

Préing 2 – MI1-A

Mme Dupont

Nourhene Merai

Mathis Sinet

Norah Toumi



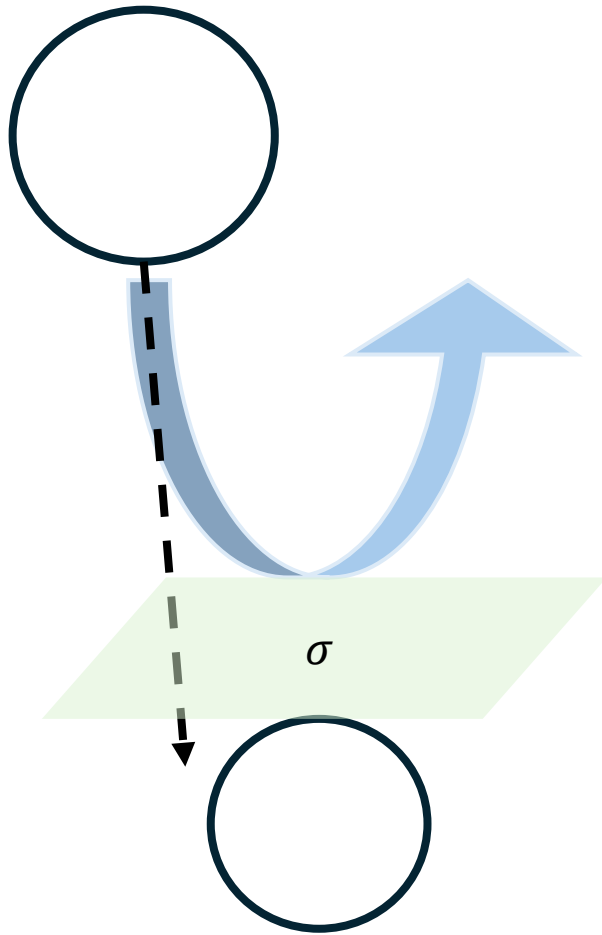
Carl Ramsauer (1879-1955)



John Townsend (1868-1957)

Introduction

Effet de diffusion quantique



À l'échelle quantique, une particule peut être déviée par une autre particule même si celle-ci ne se trouve pas directement sur sa trajectoire, du fait d'interactions électrostatiques. On parle de diffusion quantique. La grandeur caractérisant la probabilité d'interaction de deux particules est la section efficace de diffusion notée σ .

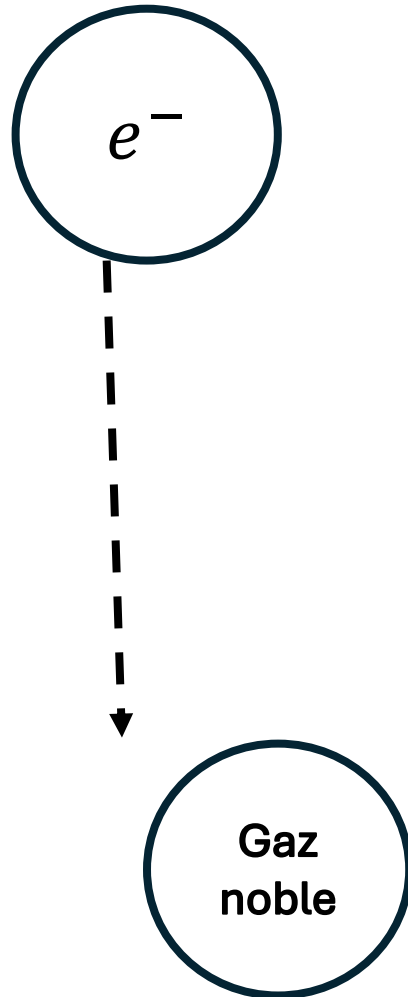
Effet Ramsauer-Townsend

Observations de Ramsauer et Townsend :

La section efficace de diffusion d'un électron par un atome d'un gaz noble ne s'annule que pour certaines valeurs de l'énergie de l'électron.

Comment expliquer ce phénomène ?

On utilisera un modèle à une dimension d'espace



Sommaire

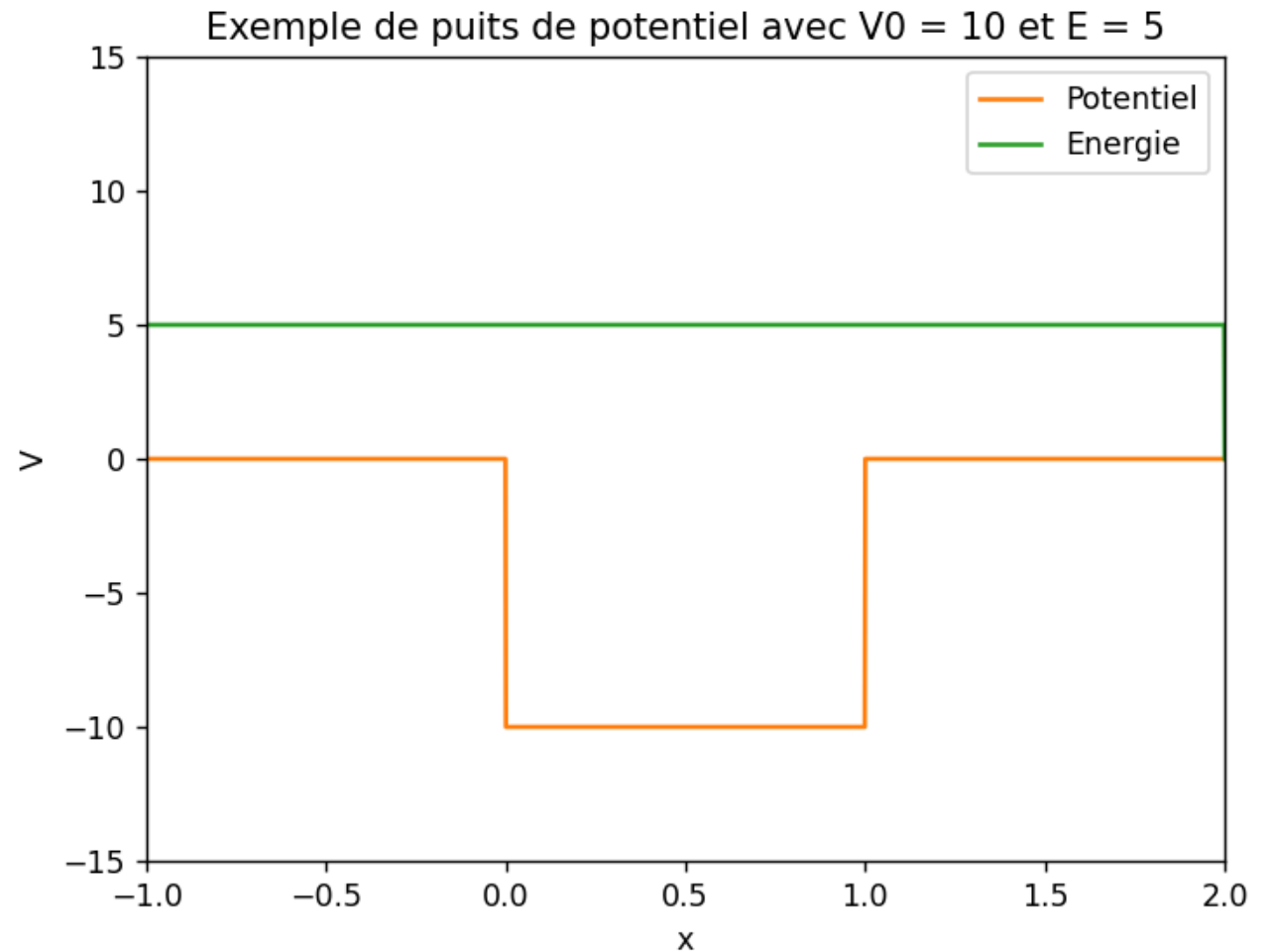
1. Choix du modèle de potentiel
2. Résolution analytique pour trouver les états stationnaires
3. Démonstration de la quantification de l'énergie
4. Comparaison avec des résultats expérimentaux

Le modèle de potentiel

On modélise le potentiel par un puits de potentiel de largeur a compris entre $x = 0$ et $x = a$.

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

avec $-V_0 < 0 < E$



Pertinence et limites du modèle du puits

La modélisation du problème par un puits fini de potentiel est pertinente.

En effet :

⇒ La largeur du puits représente la zone d'influence du potentiel de l'atome de gaz noble.

Hors de cette zone, on considère que la particule n'est soumise à aucun potentiel : $V = 0$.

⇒ La profondeur du puits représente l'intensité de l'interaction électrostatique entre les atomes.

Ce modèle a l'avantage d'être simple, néanmoins il possède une limite.

En pratique, le potentiel varie de façon continue autour de l'atome, il n'y a pas de discontinuité comme dans le modèle.

Résolution analytique

Point de départ

On se place dans le cadre de la mécanique quantique. En effet, on étudie des particules quantiques : ici, un électron et un atome de gaz noble.

On s'intéresse à un électron d'énergie cinétique E en mouvement dans un espace à une dimension (Ox) provenant de $-\infty$ et soumis à un puits de potentiel tel que :

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } x \in [0, a] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad \text{avec } -V_0 < 0 < E$$

La fonction d'onde $\psi(x, t)$ de l'électron satisfait l'équation de Schrödinger dans un régime

indépendant du temps : $\psi(x, t) = \varphi(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + [E - V(x)]\varphi(x) = 0$$

Objectif

On cherche à montrer que si la transmission de l'onde est totale ($T = 1$), alors l'énergie doit être quantifiée.

Résolution analytique : Trois régions de l'espace

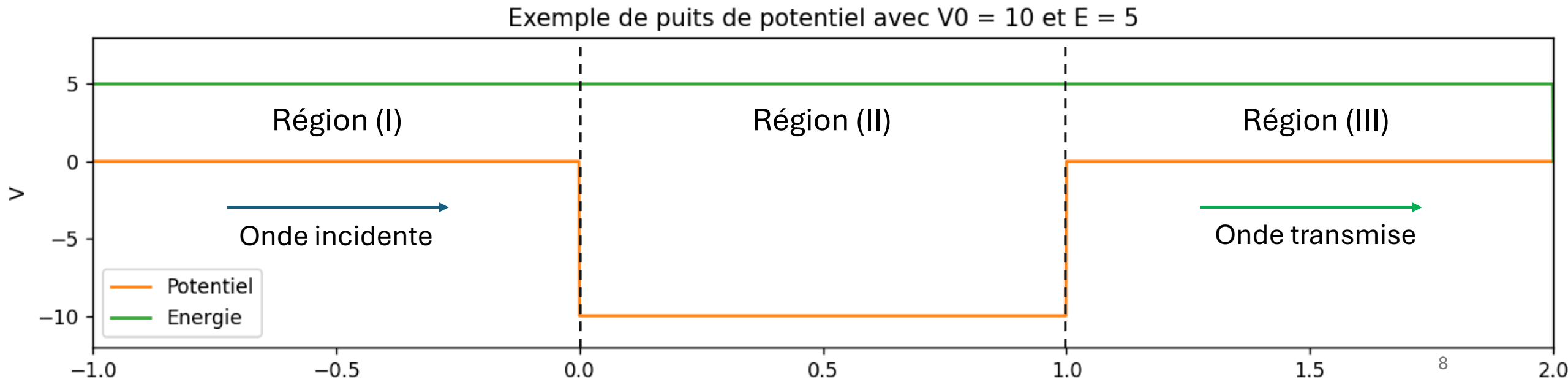
On distingue trois régions de l'espace (Ox) :

(I) $x < 0 : V(x) = 0, \varphi(x) = \varphi_1(x)$

(II) $0 < x < a : V(x) = -V_0, \varphi(x) = \varphi_2(x)$

(III) $x > a : V(x) = 0, \varphi(x) = \varphi_3(x)$

On distingue les régions (I) et (III) situées à l'intérieur du puits de potentiel et la région (II) située à l'intérieur du puits de potentiel.



Résolution analytique : Extérieur du puits

On se place dans la région (I) ou (III)

$$\text{Ansatz : } \varphi_1(x) = A_1^{\pm} e^{\pm ikx}$$

En injectant dans l'équation de Schrödinger :

$$\Leftrightarrow \left(-k^2 + \frac{2m}{\hbar^2} E \right) e^{\pm ikx} = 0 \text{ or } e^{\pm ikx} \neq 0$$

$$\Leftrightarrow k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

$$\Leftrightarrow k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$$

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

Or il n'y a pas d'onde venant de $+\infty$, donc $B_3 = 0$.

Résolution analytique : Intérieur du puits

On se place dans la région (II)

Ansatz : $\varphi_2(x) = A_2^\pm e^{\pm iqx}$

En injectant dans l'équation de Schrödinger :

$$\Leftrightarrow \left(-q^2 + \frac{2m}{\hbar^2} [E + V_0] \right) e^{\pm iqx} = 0 \text{ or } e^{\pm iqx} \neq 0$$

$$\Leftrightarrow q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)$$

$$\Leftrightarrow q = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} > 0$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}$$

Résolution analytique : Interface en $x = 0$

À l'interface des régions (I) et (II), en $x = 0$, le potentiel présente une discontinuité finie $\Rightarrow \varphi$ et $\frac{d\varphi}{dx}$ sont continues en $x = 0$.

Continuité de φ :

$$\begin{aligned}\varphi_1(0) &= \varphi_2(0) \\ \Leftrightarrow A_1 + B_1 &= A_2 + B_2\end{aligned}$$

Continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$:

$$\begin{aligned}\left. \frac{d\varphi_1}{dx} \right|_{x=0} &= \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=0} \\ \Leftrightarrow k(A_1 - B_1) &= q(A_2 - B_2)\end{aligned}$$

Résolution analytique : Interface en $x = a$

À l'interface des régions (II) et (III), en $x = a$, le potentiel présente une discontinuité finie $\Rightarrow \varphi$ et $\frac{d\varphi}{dx}$ sont continues en $x = a$.

Continuité de φ :

$$\begin{aligned}\varphi_2(a) &= \varphi_3(a) \\ \Leftrightarrow A_2 e^{iqa} + B_2 e^{-iqa} &= A_3 e^{ika}\end{aligned}$$

Continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$:

$$\begin{aligned}\left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=a} &= \left. \frac{d\varphi_3}{dx} \right|_{x=a} \\ \Leftrightarrow q(A_2 e^{iqa} - B_2 e^{-iqa}) &= k A_3 e^{ika}\end{aligned}$$

Résolution analytique : Système de coefficients

On obtient le système de coefficients suivant :

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ k(A_1 - B_1) = q(A_2 - B_2) \\ A_2 e^{iqa} + B_2 e^{-iqa} = A_3 e^{ika} \\ q(A_2 e^{iqa} - B_2 e^{-iqa}) = kA_3 e^{ika} \end{cases}$$

On cherche à exprimer le coefficient de transmission en énergie $T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$.

Résolution analytique : Résolution du système

$$\begin{aligned}
 & \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ k(A_1 - B_1) = q(A_2 - B_2) \\ A_2 e^{iqa} + B_2 e^{-iqa} = A_3 e^{ika} \\ q(A_2 e^{iqa} - B_2 e^{-iqa}) = kA_3 e^{ika} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ k(A_1 - B_1) = q(A_2 - B_2) \\ A_2 e^{iqa} + B_2 e^{-iqa} = A_3 e^{ika} \\ -2qB_2 e^{-iqa} = (k - q)A_3 e^{ika} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ k(A_1 - B_1) = q(A_2 - B_2) \\ A_2 e^{iqa} + B_2 e^{-iqa} = A_3 e^{ika} \\ B_2 = \frac{q - k}{2q} A_3 e^{i(k+q)a} \end{cases} \\
 & \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ k(A_1 - B_1) = q(A_2 - B_2) \\ A_2 e^{iqa} + B_2 e^{-iqa} = A_3 e^{ika} \\ B_2 = \frac{q - k}{2q} A_3 e^{i(k+q)a} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ k(A_1 - B_1) = q(A_2 - B_2) \\ A_2 e^{iqa} + \frac{q - k}{2q} A_3 e^{ika} = A_3 e^{ika} \\ B_2 = \frac{q - k}{2q} A_3 e^{i(k+q)a} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ k(A_1 - B_1) = q(A_2 - B_2) \\ A_2 = \frac{q + k}{2q} A_3 e^{i(k-q)a} \\ B_2 = \frac{q - k}{2q} A_3 e^{i(k+q)a} \end{cases} \\
 & \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ A_1 - B_1 = \frac{q}{k} (A_2 - B_2) \\ A_2 = \frac{q + k}{2q} A_3 e^{i(k-q)a} \\ B_2 = \frac{q - k}{2q} A_3 e^{i(k+q)a} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ 2A_1 = A_2 + B_2 + \frac{q}{k} (A_2 - B_2) \\ A_2 = \frac{q + k}{2q} A_3 e^{i(k-q)a} \\ B_2 = \frac{q - k}{2q} A_3 e^{i(k+q)a} \end{cases}
 \end{aligned}$$

Résolution analytique : Résolution du système

$$2A_1 = \frac{q+k}{2q} A_3 e^{i(k-q)a} + \frac{q-k}{2q} A_3 e^{i(k+q)a} + \frac{q}{k} \left(\frac{q+k}{2q} A_3 e^{i(k-q)a} - \frac{q-k}{2q} A_3 e^{i(k+q)a} \right)$$

$$2kA_1 = \frac{A_3}{2q} e^{ika} \{ [k(q-k) - q(q-k)] e^{iqa} + [k(q+k) + q(q+k)] e^{-iqa} \}$$

$$2kA_1 = \frac{A_3}{2q} e^{ika} \{ [-k^2 - q^2 + 2kq] e^{iqa} + [k^2 + q^2 + 2kq] e^{-iqa} \}$$

$$2kA_1 = \frac{A_3}{2q} e^{ika} \{ 2kq(e^{iqa} + e^{-iqa}) - (k^2 + q^2)(e^{iqa} - e^{-iqa}) \}$$

$$2kA_1 = \frac{A_3}{2q} e^{ika} \{ 4kq \cos(qa) - 2i(k^2 + q^2) \sin(qa) \}$$

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{2kq}{2kq \cos(qa) - i(k^2 + q^2) \sin(qa)} \right|^2 = \left| \frac{1}{\cos(qa) - i \frac{(k^2 + q^2)}{2kq} \sin(qa)} \right|^2$$

$$T = \frac{1}{\cos^2(qa) + \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right)^2 \sin^2(qa)}$$

Résolution analytique : Simplification de T

$$T = \frac{1}{\cos^2(qa) + \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq}\right)^2 \sin^2(qa)}$$

$$T = \frac{1}{1 + \left[\left(\frac{k^2 + q^2}{2kq}\right)^2 - 1\right] \sin^2(qa)}$$

$$T = \frac{1}{1 + \left[\left(\frac{\frac{2m}{\hbar^2}(2E + V_0)}{2\frac{2m}{\hbar^2}\sqrt{E(E + V_0)}}\right)^2 - 1\right] \sin^2(qa)}$$

$$T = \frac{1}{1 + \left[\frac{4E^2 + 4EV_0 + V_0^2}{4E(E + V_0)} - 1\right] \sin^2(qa)}$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(E + V_0)} \sin^2(qa)}$$

Résolution analytique : Effet Ramsauer-Townsend

Dans le cadre de l'effet Ramsauer-Townsend, la transmission est totale, donc $T = 1$.

$$T = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + (k^2 - q^2)^2 \sin^2(qa)} = 1 \Rightarrow (k^2 - q^2) \sin(qa) = 0$$

Or si $k = q$ alors on a $V_0 = 0$ donc pas de puits de potentiel.

$\Rightarrow qa = n\pi$ (avec $n \in \mathbb{N}^*$ car si $n = 0$ il n'y a pas d'onde)

$$\Rightarrow q^2 = \frac{n^2\pi^2}{a^2}$$

$$\Rightarrow \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) = \frac{n^2\pi^2}{a^2}$$

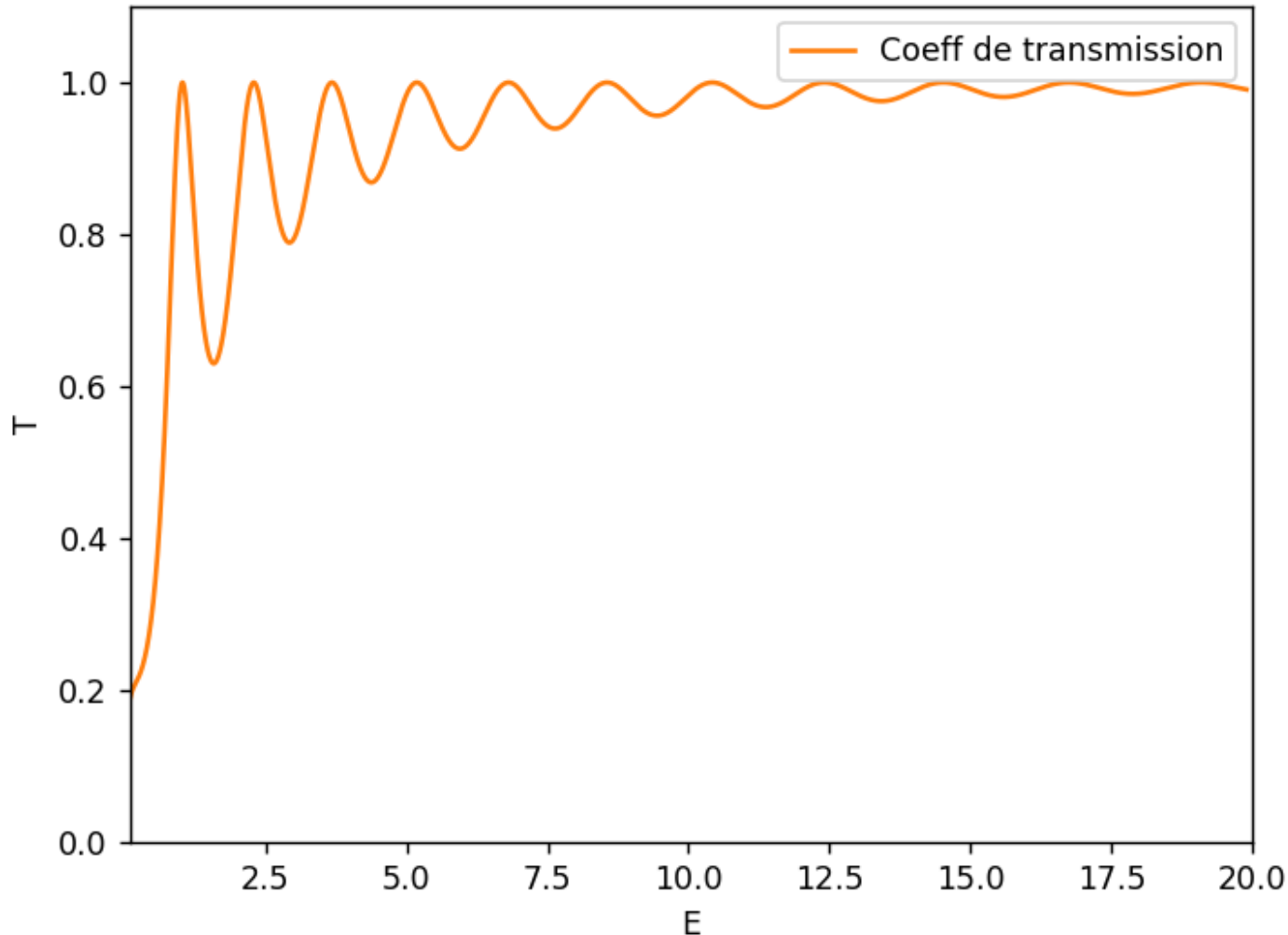
$$\Rightarrow E + V_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} n^2$$

$$\Rightarrow E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} n^2 - V_0$$

Ainsi, pour observer une transmission totale de l'onde, donc l'annulation de la section efficace de diffusion de l'électron par l'atome de gaz noble, l'énergie doit être quantifiée.

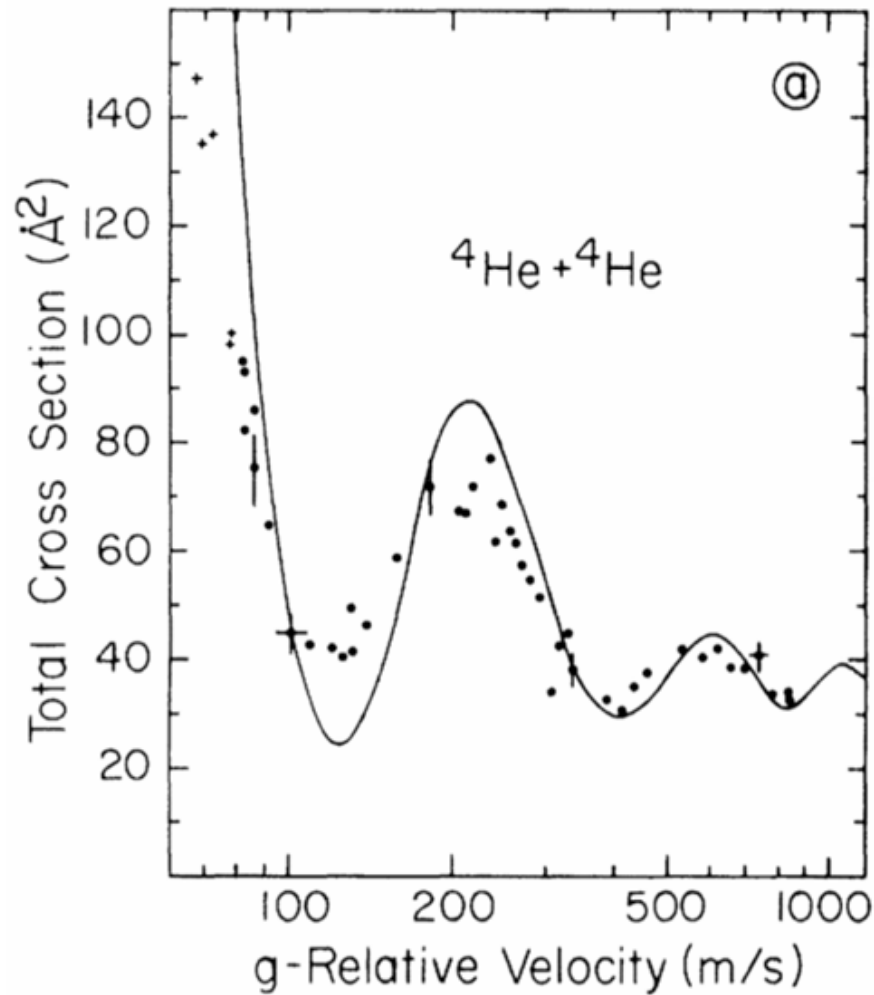
Résolution analytique : Graphe de T

Coefficient de transmission en fonction de l'énergie



On remarque que T atteint plusieurs fois un maximum local $T = 1$, cela correspond aux énergies quantifiées trouvées précédemment, pour lesquelles la section efficace s'annule.

Résultats expérimentaux



On peut comparer le résultat analytique avec les mesures expérimentales présentées dans le document support du projet.

Il s'agit des expériences de Robert S. Grace sur la mesure de la section efficace de diffusion d'un atome d'hélium 4 avec un autre. On s'intéresse aux mesures pour une vitesse relative inférieure à 200 m.s^{-1} .

On remarque un minimum de la section efficace autour de 130 m.s^{-1} , ce qui correspond à un pic de transmission. Cependant, la section efficace ne s'annule pas, donc le coefficient de transmission n'atteint pas 1. Comment expliquer cette différence ?

Modélisation par un paquet d'ondes

Dans la pratique, dans le cadre de l'observation d'une particule quantique, on préfère la décrire par un paquet d'onde. Ce modèle permet de localiser la particule et de se conformer au principe d'indétermination de Heisenberg : on ne peut pas déterminer avec précision la quantité de mouvement d'une particule quantique, donc on ne peut pas déterminer avec précision son énergie.

Dans ce cas, la partie spatiale de l'onde est sous la forme :

$$\varphi(x) = \int_{k_{min}}^{k_{max}} A(k) e^{ikx} dk$$

Avec chaque k correspondant à une énergie.

Pour avoir une transmission parfaite ($T = 1$), il faudrait que tous les k correspondent à une énergie de résonance (énergie pour laquelle la transmission est parfaite), ce qui ne peut pas être le cas pour un paquet d'onde.

Ainsi, on peut observer des pics de transmission quand l'énergie « moyenne » du paquet d'onde est proche d'une énergie de résonance, ce qui correspond à des minimums de section efficace, mais la transmission n'atteint pas 1, et la section efficace de s'annule pas.

Ce résultat est conforme aux résultats expérimentaux.

Bibliographie

Graphique en diapositive 19 :

Robert S. Grace et al. “Ramsauer-Townsend effect in the total cross section of $4\text{He} + 4\text{He}$ and $3\text{He} + 3\text{He}$ ”. In : Phys. Rev. A 14 (3 sept. 1976), p. 1006-1008.

doi : 10.1103/PhysRevA.14.1006.

url : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.14.1006>.