

PHYSIQUE MODERNE

Archi Adame

Colmont Arthur

Errabih Amine

MI2 – 2E

INTRODUCTION



Carl Ramsauer (1879-
1955)



John Townsend (1868-
1957)

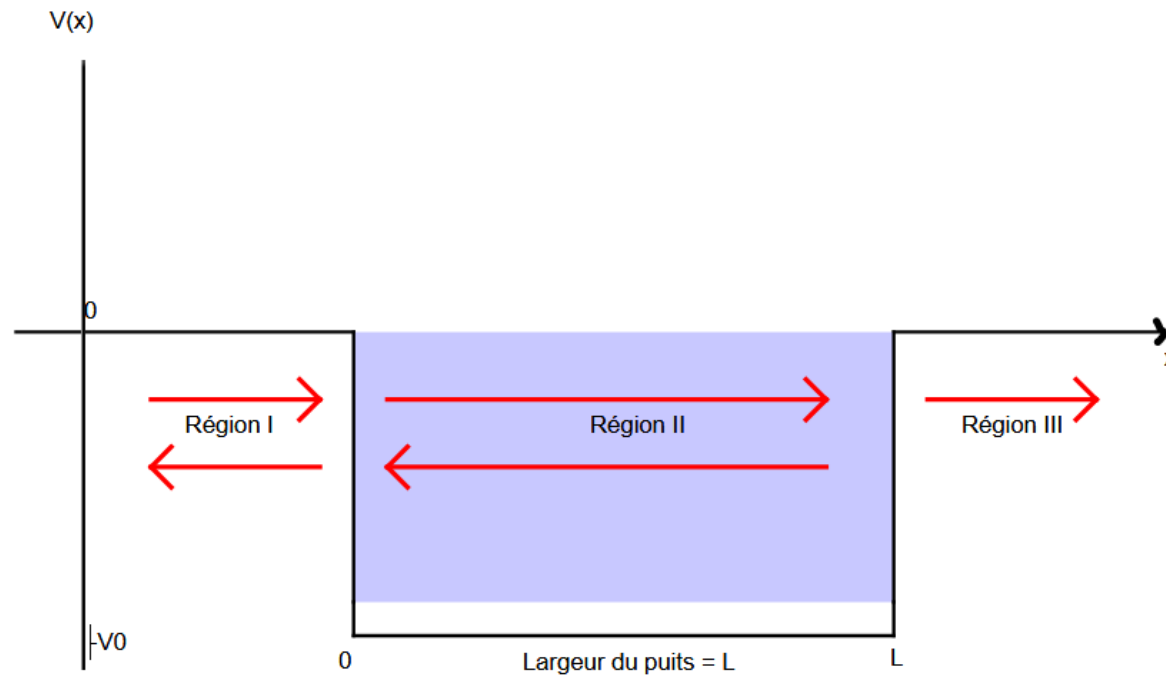
EFFET RAMSAUER–TOWNSEND

- L'**effet Ramsauer-Townsend**, mis en évidence en 1921, correspond à la traversée quasi sans diffusion d'atomes de gaz nobles par des électrons à faible énergie. La section efficace chute brutalement, ce qui est contre-intuitif selon la physique classique. L'effet s'explique uniquement parce que, selon la mécanique quantique, les électrons se comportent comme des ondes.

Le projet consiste à :

- Implémenter en Python un algorithme de résolution d'équations différentielles pour simuler la propagation d'un paquet d'ondes ;
- Développer un algorithme de recherche des états stationnaires
- Résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger indépendante du temps
- Comparer les résultats théoriques aux données expérimentales
- Étudier le cas analytique d'une particule décrite par un paquet d'ondes (non stationnaire)
- Reprendre l'analyse avec un modèle de potentiel plus réaliste.

ANALOGIE PAR UN Puits DE PROFONDEUR FINI



RÉOLUTION ANALYTIQUE

Calcul analytique de l'effet Ramsauer-Townsend avec l'analogie d'un puit de potentiel

June 2025

1 Préambule

On cherche ici à étudier l'effet Ramsauer-Townsend. On modélise la section efficace de l'atome dans ce problème par un puits de potentiel de profondeur $-V_0$ avec $V_0 > 0$. On cherche ainsi à résoudre l'équation de Schrödinger de ce puits en trouvant les états stationnaires et les niveaux d'énergie E_n pour lesquels la transmission est sûre donc les niveaux pour lesquels l'atome passe la section efficace de l'atome.

On a la fonction de potentiel tel que :

$$\begin{aligned} V(x) &= -V_0 \text{ si } x \in [0; L] \text{ avec } V_0 > 0 \\ V(x) &= 0 \text{ sinon} \end{aligned}$$

2 Equation de Schrödinger

Cas général

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

En une dimension sur l'axe x :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t) \quad (2)$$

Pour chercher les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, on cherche les états stationnaires soit les solutions telles que :

$$\psi(x, t) = f(t) \phi(x)$$

D'où :

$$E \phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V(x) \phi(x) \quad (3)$$

$$f(t) = f(t_0) e^{-i\omega(t-t_0)} \quad (4)$$

3 Région I et III (extérieur du puit de potentiel)

$$V(x) = 0$$

$$\text{Ansatz : } \phi(x) = e^{ikx}$$

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

$$\Rightarrow (-k^2 + \frac{2mE}{\hbar^2})e^{-ikx} = 0 \text{ Avec } e^{ikx} \neq 0$$

$$\Rightarrow (k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2})$$

$$\Rightarrow (k = \pm \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \pm k_{1/3})$$

$$\phi_{1/3}(x) = A_{1/3}e^{ik_{1/3}x} + B_{1/3}e^{-ik_{1/3}x}$$

$$\psi_{1/3}(x, t) = f(t)\phi_{1/3}(x) = f(t_0)e^{-i\omega(t-t_0)}(A_{1/3}e^{ik_{1/3}x} + B_{1/3}e^{-ik_{1/3}x}) \quad (5)$$

$$\text{Région I : } \phi_1(x) = A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x}$$

$$\text{Région III : } \phi_3(x) = A_3e^{ik_3x} + B_3e^{-ik_3x}$$

Or $B_3 = 0$ car pas de particules venant de $+\infty$ donc :

$$\phi_3(x) = A_3e^{ik_3x}$$

$$\text{Avec } k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

4 Région II (intérieur du puit de potentiel)

$$V(x) = -V_0$$

$$\text{Ansatz : } \phi_2(x) = e^{ikx}$$

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

$$\Rightarrow (-k^2 + \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2})e^{-ik_2x} = 0 \text{ Avec } e^{ik_2x} \neq 0$$

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

$$\Rightarrow (k = \pm \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} = \pm k_2)$$

$$\phi_2(x) = A_2e^{ik_2x} + B_2e^{-ik_2x}$$

$$\psi_2(x, t) = f(t)\phi_2(x) = f(t_0)e^{-i\omega(t-t_0)}(A_2e^{ik_2x} + B_2e^{-ik_2x}) \quad (6)$$

5 Relation à l'interface entre les régions I-II (x=0) et II-III (x=L)

Entre les régions I-II (à x=0)

$$\phi_1(x \rightarrow 0) = \phi_2(x \rightarrow 0) \Rightarrow A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

La variation de $V(x)$ est finie ($= -V_0$) donc on a :

$$\frac{\partial\phi_1}{\partial x}|_{x=0} = \frac{\partial\phi_2}{\partial x}|_{x=0} \Rightarrow ik_1A_1 - ik_1B_1 = ik_2A_2 - ik_2B_2$$

$$\text{Donc } k_1A_1 - k_1B_1 = k_2A_2 - k_2B_2$$

Entre les régions II-III (à $x=L$)

$$\phi_2(x \rightarrow L) = \phi_3(x \rightarrow L) \Rightarrow A_2 e^{ik_2 L} + B_2 e^{-ik_2 L} = A_3 e^{ik_3 L}$$

$$\frac{\partial \phi_2}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial \phi_3}{\partial x} \Big|_{x=0} \Rightarrow ik_2 A_2 e^{ik_2 L} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 L} = ik_3 A_3 e^{ik_3 L}$$

Donc : $k_2 A_2 e^{ik_2 L} - k_2 B_2 e^{-ik_2 L} = k_3 A_3 e^{ik_3 L}$

Conclusion

On obtient ainsi le système :

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2 \\ A_2 e^{ik_2 L} + B_2 e^{-ik_2 L} = A_3 e^{ik_3 L} \\ k_2 A_2 e^{ik_2 L} - k_2 B_2 e^{-ik_2 L} = k_3 A_3 e^{ik_3 L} \end{cases}$$

6 Expressions de A_2 , B_2 et A_3

Dans le contexte de l'étude du phénomène Ramsauer-Townsend, la transmission est égale à 1 car l'électron passe à travers la section efficace de l'atome (l'onde passe à travers le puit de potentiel) donc la réflexion est nulle : $\frac{B_1}{A_1} = 0 \Rightarrow B_1 = 0$

Le système devient :

$$A_1 = A_2 + B_2 \quad (7a)$$

$$k_1 A_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2 \quad (7b)$$

$$A_2 e^{ik_2 L} + B_2 e^{-ik_2 L} = A_3 e^{ik_3 L} \quad (7c)$$

$$k_2 A_2 e^{ik_2 L} - k_2 B_2 e^{-ik_2 L} = k_3 A_3 e^{ik_3 L} \quad (7d)$$

$$k_1 A_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2 \Rightarrow \frac{k_1}{k_2} A_1 = A_2 - B_2 \quad (7b.2)$$

$$(7a) + (7b.2) \Rightarrow 2A_2 = (1 + \frac{k_1}{k_2}) A_1 \Rightarrow A_2 = \frac{1}{2} A_1 (1 + \frac{k_1}{k_2})$$

$$\text{Dans (7a)} \Rightarrow B_2 = A_1 - A_2 = A_1 - \frac{1}{2} A_1 (1 + \frac{k_1}{k_2})$$

$$B_2 = \frac{1}{2} A_1 (2 - 1 - \frac{k_1}{k_2}) = \frac{1}{2} A_1 (1 - \frac{k_1}{k_2})$$

On remplace dans (7c) :

$$A_3 e^{ik_3 L} = \frac{1}{2} A_1 (1 + \frac{k_1}{k_2}) e^{ik_2 L} + \frac{1}{2} A_1 (1 - \frac{k_1}{k_2}) e^{-ik_2 L}$$

$$A_3 = A_1 * \frac{(1 + \frac{k_1}{k_2}) e^{ik_2 L} + \frac{1}{2} (1 - \frac{k_1}{k_2}) e^{-ik_2 L}}{2 e^{ik_3 L}}$$

7 Calcul du coefficient de transmission

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{(1 + \frac{k_1}{k_2})e^{ik_2L} + \frac{1}{2}(1 - \frac{k_1}{k_2})e^{-ik_2L}}{2e^{ik_3L}}$$

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{1}{e^{ik_3L}} * \left(\frac{e^{ik_2L} + e^{-ik_2L}}{2} + \frac{k_1}{k_2} \frac{e^{ik_2L} - e^{-ik_2L}}{2} \right)$$

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{1}{e^{ik_3L}} * (\cos(k_2L) + \frac{k_1}{k_2} i \sin(k_2L))$$

$$\left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{\left| \cos(k_2L) + \frac{k_1}{k_2} i \sin(k_2L) \right|^2}{\left| e^{ik_3L} \right|^2}$$

$$\text{Or } \left| e^{ik_3L} \right|^2 = \left| \cos(k_3L) + i \sin(k_3L) \right|^2 = \sqrt{\cos^2(k_3L) + \sin^2(k_3L)}^2 = \cos^2(k_3L) + \sin^2(k_3L)$$

$$\left| e^{ik_3L} \right|^2 = 1$$

$$\left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \left| \cos(k_2L) + \frac{k_1}{k_2} i \sin(k_2L) \right|^2 = \cos^2(k_2L) + \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sin^2(k_2L)$$

8 Quantification de l'énergie E

$$\text{On cherche quand } T = 1 \Rightarrow \frac{k_3}{k_1} \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = 1$$

$$\left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = 1 \text{ car } k_1 = k_3$$

$$\text{Donc } \cos^2(k_2L) + \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sin^2(k_2L) = 1$$

$$\cos^2(k_2L) = 1 - \sin^2(k_2L) \Rightarrow \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = 1 - \sin^2(k_2L) + \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sin^2(k_2L) = 1$$

$$\left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = ((\frac{k_1}{k_2})^2 - 1) \sin^2(k_2L) = 0$$

On a alors deux cas :

1er cas :

$$((\frac{k_1}{k_2})^2 - 1) = 0 \Rightarrow (\frac{k_1}{k_2})^2 = 1 \Rightarrow k_1 = k_2$$

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \Rightarrow V_0 = 0$$

On est dans le cas où l'atome n'a pas de section efficace de diffusion et où la solution est une onde plane progressive car $A_1 = A_2 = A_3$ d'après le système. Cela ne nous intéresse pas ici car il n'y a pas l'effet Ramsauer-Townsend comme il n'y a pas de puits de potentiel ($V_0 = 0$) et de section efficace de diffusion.

2ème cas :

$$\sin^2(k_2L) = 0 \Rightarrow \sin(k_2L) = 0 \Rightarrow k_2L = n\pi$$

$$k_2 = \frac{n\pi}{L} \text{ avec } n \in \mathbb{N}$$

$$\begin{aligned}
k_2 &= \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \\
\Rightarrow 2m(E+V_0) &= \left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2 \Rightarrow E+V_0 = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \\
\Rightarrow E_n &= n^2 * \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} - V_0 \\
\text{Ainsi } k_1 &= \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \Rightarrow k_{1,n} = \sqrt{\frac{2m\left|(n^2 * \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} - V_0)\right|}{\hbar^2}} \\
\text{Avec la normalisation de } A_1 &= 1 \\
\phi_n(x) &= e^{ik_{1,n}x}
\end{aligned}$$

Les fonctions d'onde telles qu'on a une transmission égale à 1 sont :

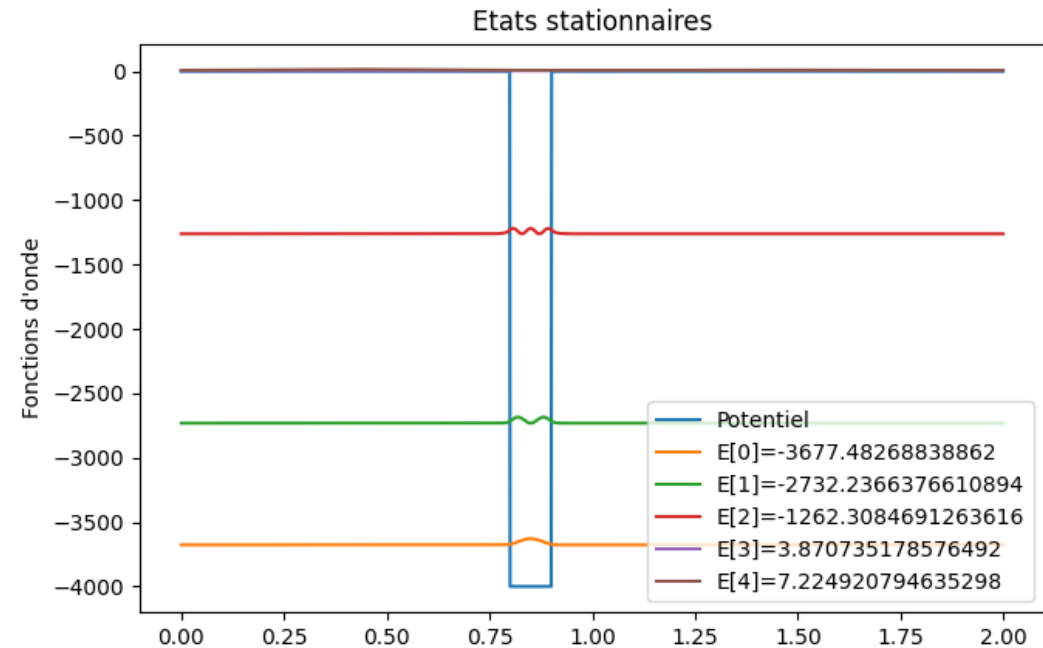
$$\psi_n(x, t) = f(t_0)e^{-i\omega(t-t_0)}e^{ik_{1,n}x} = f(t_0)e^{-i(\omega(t-t_0)) - k_{1,n}x}$$

ETATS STATIONNAIRES

Nous avons codé un algorithme python (*Etats_Stationnaires_puits.py*) qui permet de retrouver les niveaux d'énergies des différents états stationnaires pour un puits de potentiel $v0$ et de les afficher

Ce code permet de trouver les états stationnaires en diagonalisant l'hamiltonien, trouvé à partir de l'équation de Schrödinger en 1D indépendant du temps:

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



COMPARAISON DES PRÉDICTIONS AVEC LES MESURES EXPÉRIMENTALES

On voit qu'il existe bien des niveaux d'énergie tels que la transmission est totale pour une onde stationnaire.

Ceci est en accord avec les mesures expérimentales observées par Ramsauer et Townsend si on fait l'analogie que le puits de potentiel est la section efficace de diffusion de l'atome et que l'onde stationnaire est un électron.

Il y a donc des niveaux d'énergie de l'électron tels que celui-ci est "transmis" entièrement, c'est à dire qu'il passe à travers la section efficace de l'atome. Les observations de Ramsauer et Townsend se tiennent.

NOUVELLES EXPÉRIENCES DE 1970

Lors de nouvelles expériences dans les années 1970, on observe que la section efficace de l'atome passe bien par un minimum, preuve de l'effet Ramsauer-Townsend.

Cependant, ce minimum n'est jamais de 0, ce qui veut dire que la transmission n'est jamais à 1 exactement ce qui est en contradiction avec nos résultats obtenus précédemment.

Prenons donc un modèle plus réaliste avec le paquet d'ondes pour expliquer ceci.

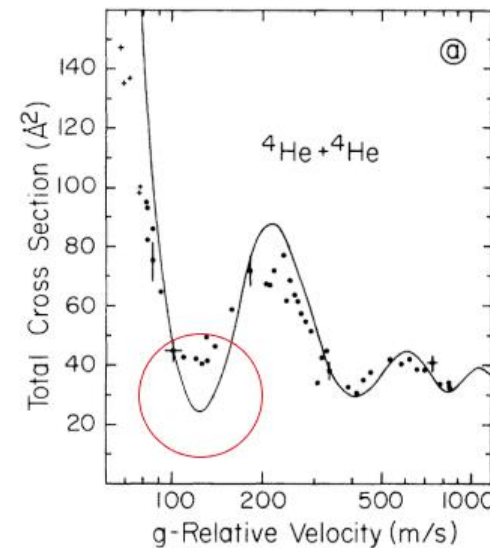


FIGURE 1 – Observation de l'effet Ramsauer-Townsend lors de la collision d'atomes d'hélium 4. Figure issue de [G76].

SIMULATION D'UN PAQUET D'ONDES

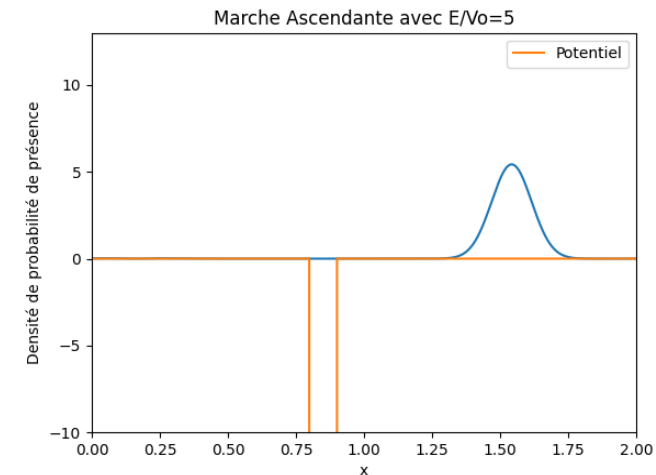
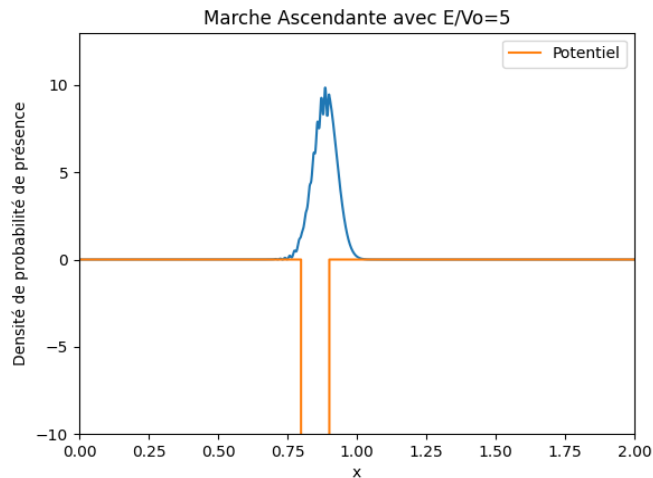
Le programme Sch1d_solution_1.py va nous permettre de simuler la propagation du paquet d'ondes

Le paquet d'ondes va être une gaussienne représentée dans le code par la ligne 61 :

```
cpt = A * np.exp(1j * k * o - ((o - xc) ** 2) / (2 * (sigma ** 2)))
```

Et sa densité de probabilités par :

```
densite=np.zeros((nt,nx))  
densite[0,:] = np.absolute(cpt[:]) ** 2
```



ETUDE ANALYTIQUE DU PAQUET D'ONDES – PARTIE ANALOGIQUE

1 Modélisation mathématique du paquet d'ondes

On cherche à modéliser un paquet d'ondes de la manière la plus simple possible pour étudier l'effet Ramsauer-Townsend. Le paquet d'ondes est en effet une approche plus réaliste que l'onde stationnaire que nous avons étudié précédemment. Ici, nous allons modéliser mathématiquement par une gaussienne de centre x_0 et de largeur σ , l'amplitude de probabilités au carré de la fonction d'onde à l'instant $t = 0$ (pour simplifier). Le paquet d'ondes est ainsi représenté par l'amplitude de probabilité suivante :

$$|\psi(x, 0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\sigma^2)}} * e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

Cela marche avec la fonction d'onde $\psi(x, 0)$ tel que :

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{(2\pi\sigma^2)}}} * e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} * e^{ikx} \text{ car } |e^{ikx}|^2 = 1$$

e^{ikx} est nécessaire ici car il représente l'ondulation du paquet d'ondes dans sa représentation par une gaussienne

On va maintenant chercher, grâce à l'écart type de x (Δx), à voir si le paquet d'ondes doit respecter certaines propriétés en utilisant la relation d'indétermination ($\Delta x \Delta k \geq 2\pi$) et la relation position-impulsion des inégalités d'Heisenberg ($\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$).

2 Calcul de l'écart type de x

Le paquet d'ondes est représenté par une gaussienne donc on peut représenter la variable x du paquet d'ondes par une loi normale de paramètre x_0 et σ .

L'écart type de x est alors : $\Delta x = \sqrt{\text{Var}(X)} = \sqrt{\sigma^2}$ d'après les propriétés de la loi normale que suit x donc on a :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{x_0^2 + \sigma^2 - x_0^2} = \sigma$$

3 Détermination des propriétés

$$\Delta x \Delta k \geq 2\pi \Rightarrow \Delta k \geq \frac{2\pi}{\sigma}$$

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta p \geq \frac{\hbar}{2\sigma}$$

$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \langle E \rangle = \frac{(\Delta p)^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{8\sigma m} > 0$ car la largeur du paquet d'ondes σ est nécessairement strictement positive pour que le paquet d'ondes existe.

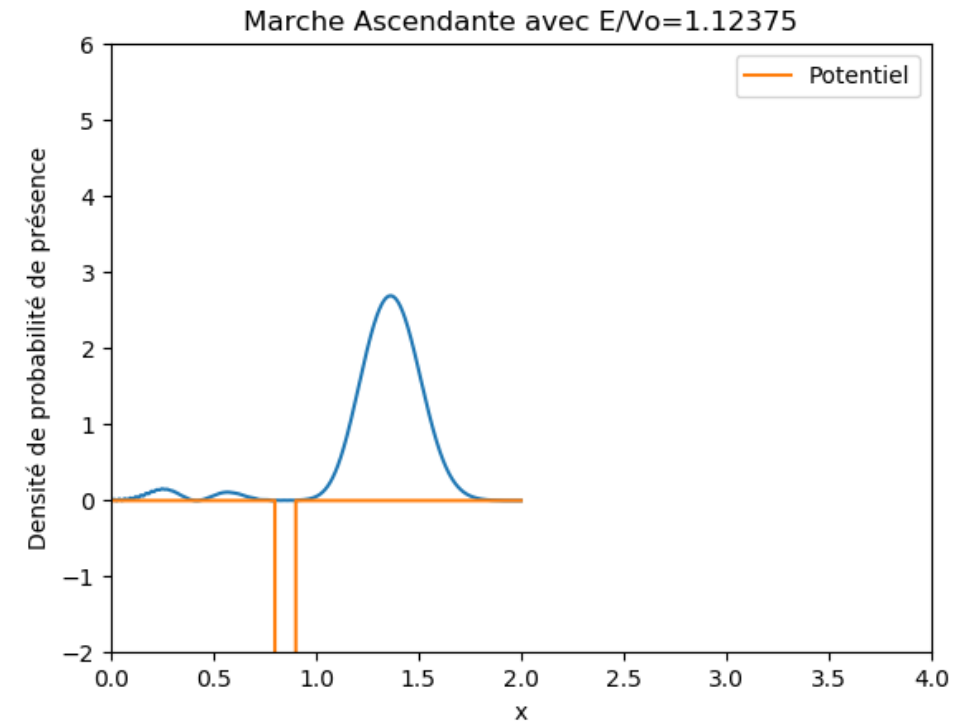
4 Conclusion

Ainsi on peut conclure que :

- Le paquet d'ondes est une approche plus réaliste que les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps
- Le paquet d'ondes a une énergie strictement positive qui dépend de sa largeur, plus elle est grande, moins il a d'énergie et moins celui-ci se déplace vite.
- Sa densité se doit également d'être positive pour qu'il existe, elle dépend également de sa largeur.

ETUDE ANALYTIQUE DU PAQUET D'ONDES – PARTIE NUMÉRIQUE

- L'énergie n'est pas complètement transmise comme avec une onde stationnaire, une partie du paquet d'ondes est réfléchi quand on regarde la propagation de celui-ci avec l'algorithme python.
- On peut cependant noter qu'une grande partie de l'onde est tout de même transmise comme le montre les expérimentations de 1970.



MODÈLE DE POTENTIEL PLUS RÉALISTE

On remarque que dans la réalité, l'effet Ramsauer-Townsend est un puits non pas avec une forme carrée mais une forme gaussienne.

Ne pouvant résoudre ceci de manière analogique (le potentiel variant constamment dans le puits) nous l'avons résolu numériquement.

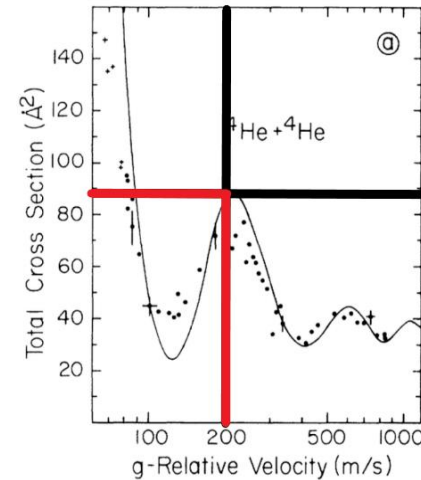


FIGURE 1 – Observation de l'effet Ramsauer-Townsend lors de la collision d'atomes d'hélium 4. Figure issue de [G76].

CHANGEMENTS DANS LE CODE

Nous avons créé deux nouveaux fichiers :

- Etats_stationnaires_nouveau_modele.py
- Sch1d_nouveau_modele.py

Ceux-ci sont presque identiques aux codes précédents , seul le potentiel du puits a été changé :

```
V[(o >= 0.8) & (o<=0.9)] = v0 # Potentiel
```

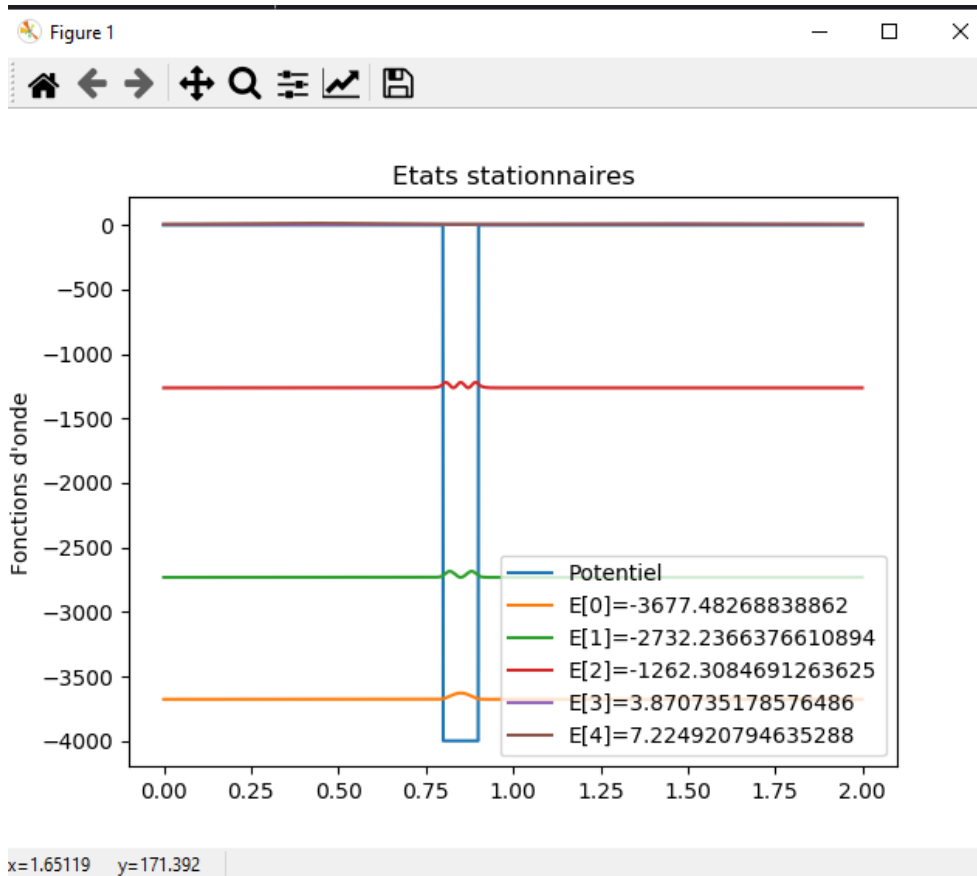
Devient :

```
debut_puits = 0.8
fin_puits = 0.9
centre = (debut_puits+fin_puits)/2
largeur = 0.1
V[(o >= debut_puits) & (o<=fin_puits)] = v0 * np.exp(-((o[(o >= debut_puits) & (o <=fin_puits)]-centre)**2)/(2*largeur**2)) # Potentiel (puits gaussien)
```

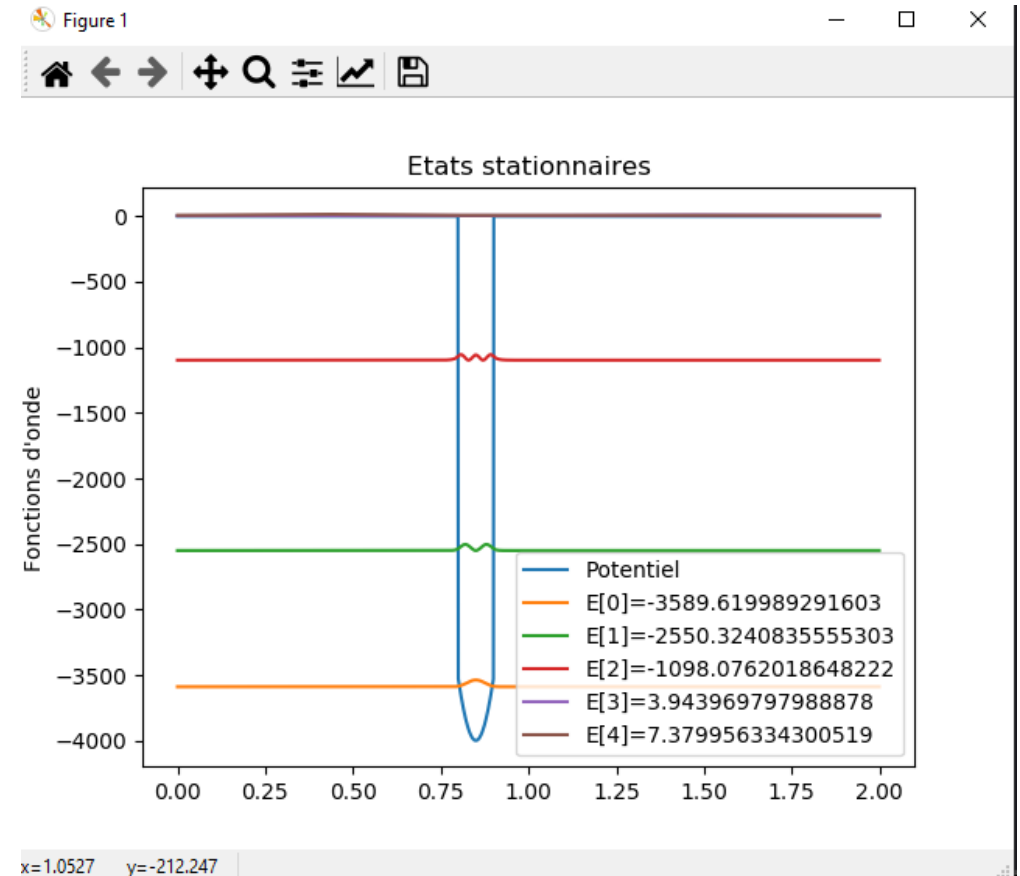
En résumé on ajoute un terme formant une gaussienne au potentiel pour lui donner une forme arrondie

COMPARAISONS DES ÉTATS STATIONNAIRES

Ancien modèle

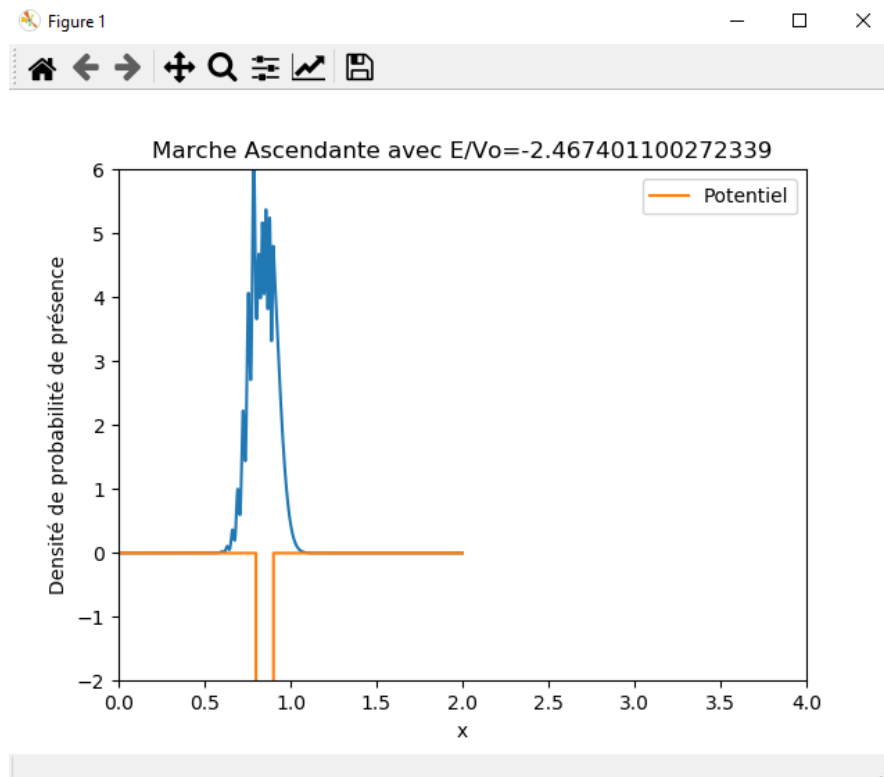


Nouveau modèle

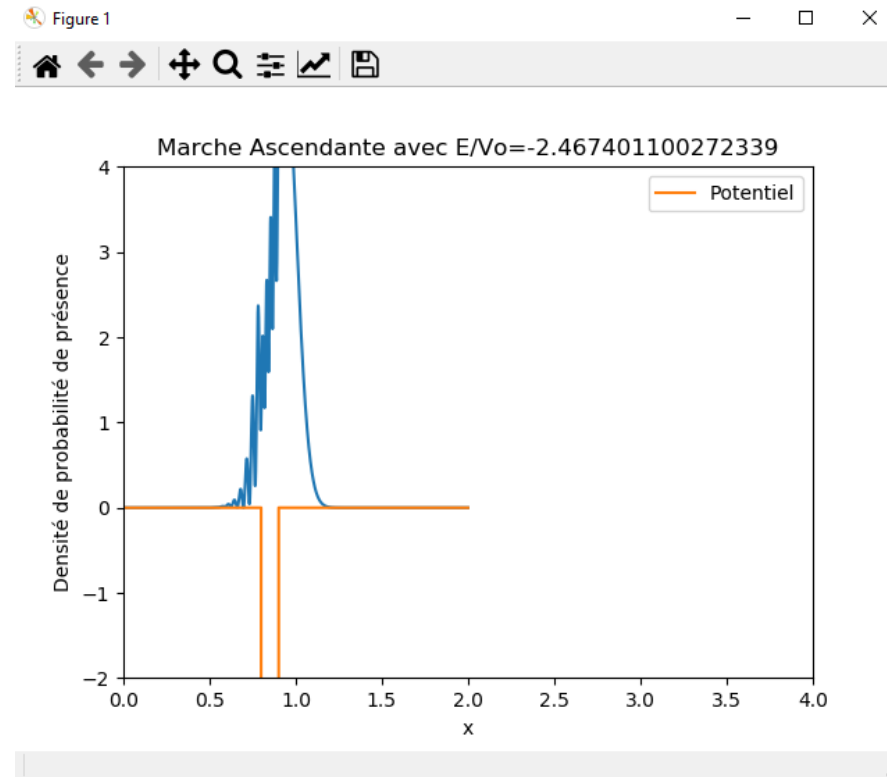


COMPARAISONS PROPAGATION DU PAQUET D'ONDES

Ancien modèle

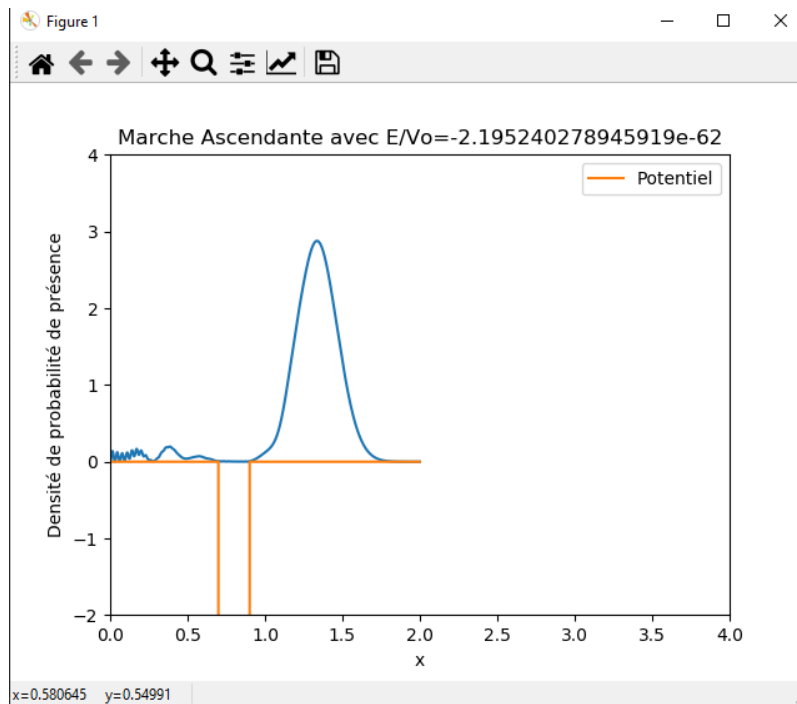


Nouveau modèle

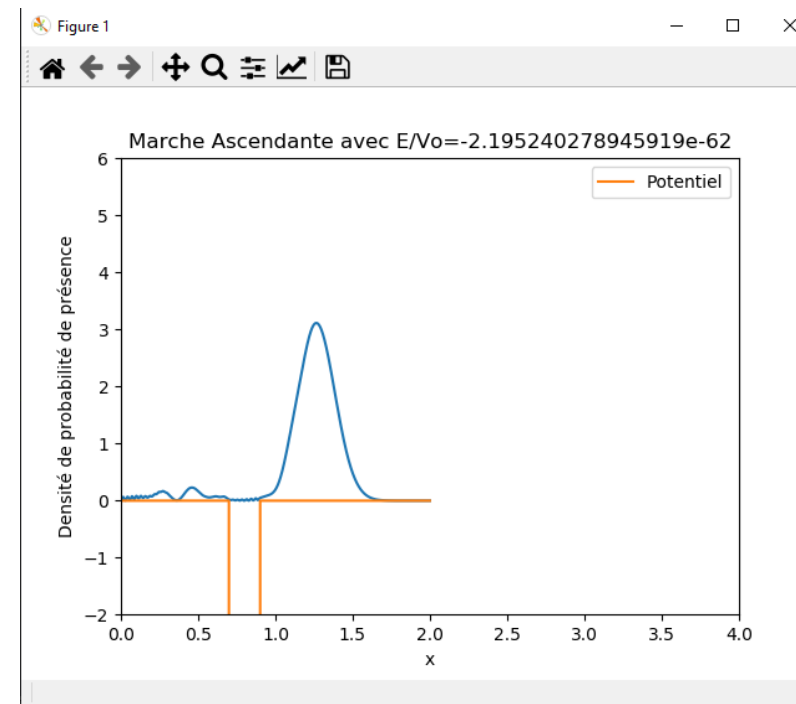


COMPARAISONS PROPAGATION DU PAQUET D'ONDES

Ancien modèle



Nouveau modèle



BIBLIOGRAPHIE

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>

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

mholtrop, "Finite Square Well Bound State",

<https://github.com/mholtrop/QMPython/blob/master/Finite%20Well%20Bound%20States.ipynb> (8 juin 2025)

Wikipédia, "John Townsend", https://fr.wikipedia.org/wiki/John_Townsend (8 juin 2025)

Wikipédia, "Carl Ramsauer", https://fr.wikipedia.org/wiki/Carl_Ramsauer (8 juin 2025)

Merci à vous de nous
avoir écoutés