

Projet numérique de Physique Moderne

Hugo Tran Phat - Sam Procoppe - Jules Pelissier
MI3





Sommaire:

- Introduction
- 1. Graphique des états stationnaires
- 2. Résolution analytique de l'équation de Schrödinger indépendante du temps
- 3. Comparaison entre l'algorithme et la résolution analytique
- 4. Visualisation de la propagation d'un paquet d'ondes
- 5. Modèle de potentiel plus réaliste (Woods-Saxon)



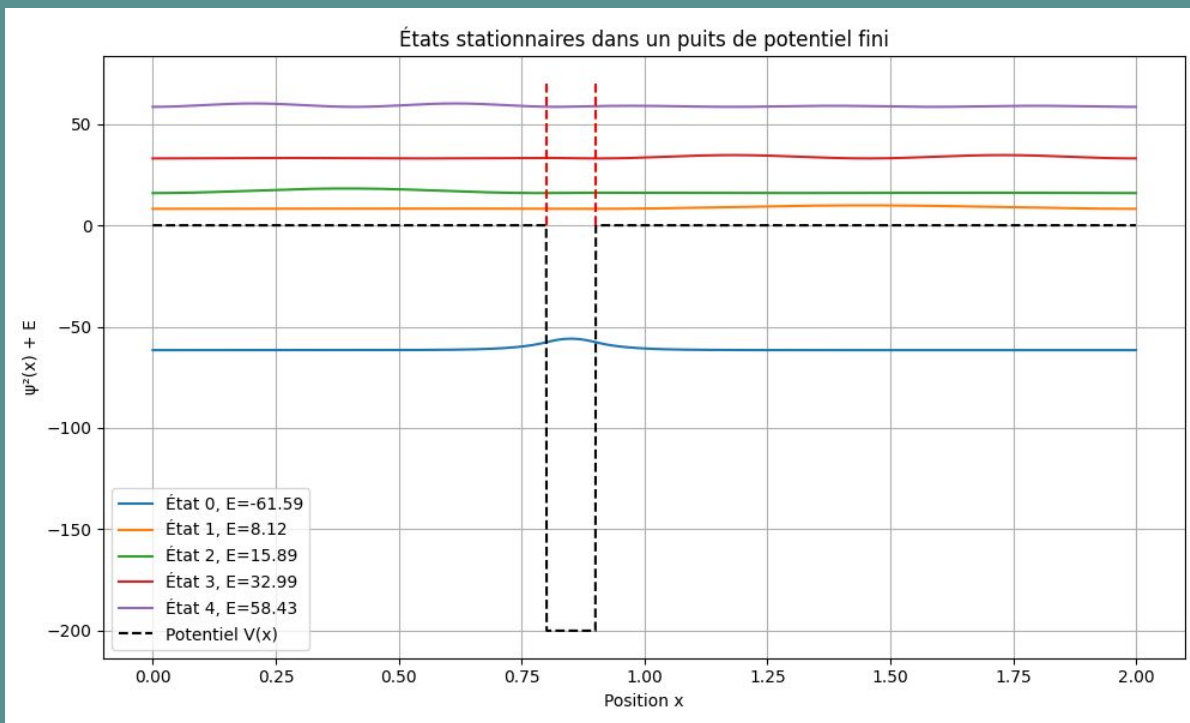
Introduction: L'effet Ramsauer-Townsend

L'effet Ramsauer-Townsend est un phénomène quantique découvert en 1921. Il montre que, pour certaines énergies bien précises, des électrons peuvent traverser des atomes de gaz nobles sans être déviés. À l'échelle microscopique, les particules n'interagissent pas par des chocs, mais par des interactions à distance, notamment électromagnétiques.

Pour décrire la probabilité qu'un électron soit dévié, on utilise une grandeur appelée section efficace de diffusion. Cette section efficace chute brutalement à certaines énergies, comme si l'atome devenait temporairement transparent pour l'électron.

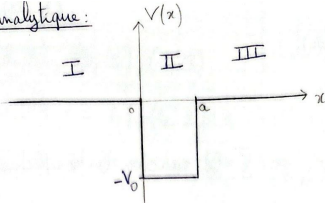
Pour comprendre cet effet, on modélise l'atome par un puits de potentiel. À l'intérieur du puits, le potentiel est plus bas (négatif), ce qui permet à l'électron d'y entrer. À l'extérieur, le potentiel est nul, et l'électron est libre. Ce modèle simplifié permet d'utiliser l'équation de Schrödinger pour décrire le comportement de l'onde associée à l'électron. On découvre alors qu'à certaines énergies bien précises, des interférences destructives se produisent : l'électron traverse l'atome sans être dévié. C'est ce qui explique l'effet Ramsauer-Townsend.

1. Graphique des états stationnaires



2. Résolution analytique de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

Résolution analytique:



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 & \text{Région I} \\ -V_0 & \text{si } x \in [0, a] & \text{Région II} \\ 0 & \text{si } x > a & \text{Région III} \end{cases}$$

Equation de Schrödinger indépendante du temps:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V(x) \phi(x) = E \phi(x) \quad (1)$$

Région I:

$$(1) \Rightarrow \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \phi(x)$$

$$\Rightarrow \phi''(x) + k^2 \phi(x) = 0 \quad \text{avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\rightarrow \boxed{\phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}}$$

Région II:

$$(1) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} - V_0 \phi(x) = E \phi(x)$$

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

$$\Rightarrow \phi''(x) + q^2 \phi(x) = 0 \quad \text{avec } q = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}}$$

$$\rightarrow \boxed{\phi(x) = C e^{iqx} + D e^{-iqx}}$$

Région III:

$$(1) \Rightarrow \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \phi(x)$$

$$\Rightarrow \phi''(x) + k^2 \phi(x) = 0$$

$$\rightarrow \phi(x) = E e^{ikx} + F e^{-ikx} \quad \text{or } F = 0 \text{ car pas d'ondes réfléchies depuis l'infini } (+\infty)$$

$$\boxed{\phi(x) = E e^{ikx}}$$

Continuité:

$$\phi_I(0) = \phi_{II}(0) \quad (1) \quad \phi_{II}(a) = \phi_{III}(a) \quad (2)$$

$$\phi'_I(0) = \phi'_{II}(0) \quad (3) \quad \phi'_{II}(a) = \phi'_{III}(a) \quad (4)$$

$$\rightarrow \begin{cases} A + B = C + D & (1) \\ Ak - Bk = Cq - Dq & (2) \\ C e^{iqa} + D e^{-iqa} = E e^{ika} & (3) \\ q C e^{iqa} - q D e^{-iqa} = k E e^{ika} & (4) \end{cases}$$

Résolution du système →

$$\rightarrow \begin{cases} A+B = C+D & (1) \\ k(A-B) = q(C-D) & (2) \\ Ce^{iqa} + De^{-iqa} = Ee^{ika} & (3) \\ q(Ce^{iqa} - De^{-iqa}) = kEe^{ika} & (4) \end{cases}$$

$$*(1) \times k \Rightarrow k(A+B) = k(C+D) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \bullet (5) + (2) &\Rightarrow 2kA = C(k+q) + D(k-q) \\ &\rightarrow A = \frac{C(k+q) + D(k-q)}{2k} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bullet (5) - (2) &\Rightarrow 2kB = C(k-q) + D(k+q) \\ &\rightarrow B = \frac{C(k-q) + D(k+q)}{2k} \end{aligned}$$

$$*(3) \times q \Rightarrow q(Ce^{iqa} + De^{-iqa}) = qEe^{ika} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \bullet (6) + (4) &\Rightarrow 2qCe^{iqa} = (q+k)Ee^{ika} \\ &\rightarrow C = \frac{(k+q)}{2q} Ee^{ia(k-q)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bullet (6) - (4) &\Rightarrow 2qDe^{-iqa} = (q-k)Ee^{ika} \\ &\rightarrow D = \frac{(q-k)}{2q} Ee^{ia(k+q)} \end{aligned}$$

On a l'onde transmise T qui s'écrit: $T = \left| \frac{E}{A} \right|^2$

$$\begin{aligned} \text{Or, } A &= E \left(\frac{(k+q)^2}{4kq} e^{ia(k-q)} - \frac{(k-q)^2}{4kq} e^{ia(k+q)} \right) \\ &= \frac{Ee^{iak}}{4kq} \left[(k+q)^2 e^{-iaq} - (k-q)^2 e^{iaq} \right] \\ &= \frac{Ee^{iak}}{4kq} \left[(k+q)^2 (\cos(aq) - i\sin(aq)) - (k-q)^2 (\cos(aq) + i\sin(aq)) \right] \\ &= \frac{Ee^{iak}}{4kq} \left[\cos(aq) ((k+q)^2 - (k-q)^2) - i\sin(aq) ((k+q)^2 + (k-q)^2) \right] \\ &= \frac{Ee^{iak}}{4kq} \left[\cos(aq) \times 4kq - i\sin(aq) (2k^2 + 2q^2) \right] \\ &= Ee^{iak} \left[\cos(aq) - i\sin(aq) \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right) \right] \end{aligned}$$

$$\text{Or, } T = \left| \frac{E}{A} \right|^2 = \frac{|E|^2}{|A|^2}$$

$$\begin{aligned} \text{Donc, } T &= \frac{1}{\left| e^{iak} \left[\cos(aq) - i\sin(aq) \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right) \right] \right|^2} \\ &= \frac{1}{\cos^2(aq) + \sin^2(aq) \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right)^2} \end{aligned}$$



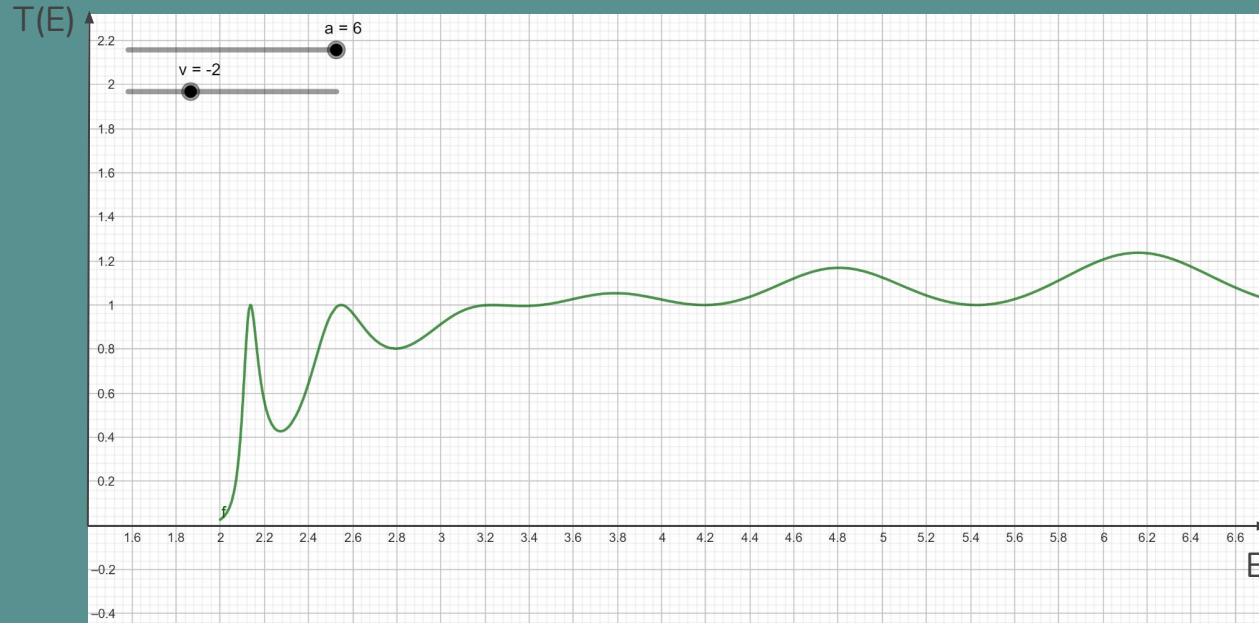
3. Comparaison algorithme et résolution analytique

Lorsqu'une particule est envoyée sur un puits de potentiel, il y a 2 possibilités: soit elle est transmise (traverse), soit elle est réfléchi (rebondit). Et $T(E)$ permet de donner la probabilité qu'elle traverse le puits en fonction de son énergie.

On a observé qu'à certaines énergies bien précises, la fonction de transmission $T(E)$ atteint une valeur proche de 1. Cela signifie que la transmission est quasiment parfaite : les ondes semblent alors en résonance avec la largeur du puits, comme si celui-ci devenait transparent, ne provoquant aucune déviation.

- Si $T(E)$ est élevé : la particule traverse facilement le puits
- Si $T(E)$ est faible : la particule est bloquée ou réfléchi par le puits

Graphique de la Transmission en fonction de l'Énergie



Approximation
de m et \hbar à 1

Courbe de la transmission en fonction de l'énergie

4. Visualisation de la propagation d'un paquet d'ondes

1) Paquet d'ondes

Paquet d'ondes:

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad \text{avec } A(k) \text{ l'amplitude}$$
$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \text{relation de dispersion}$$

Un paquet d'ondes est une somme d'états stationnaires ayant des énergies proches.
Chaque composante $e^{i(kx - \omega t)}$ est une onde stationnaire.



4. Visualisation de la propagation d'un paquet d'ondes

2) Quelle est l'importance du paquet d'ondes dans l'effet Ramsauer-Townsend ?

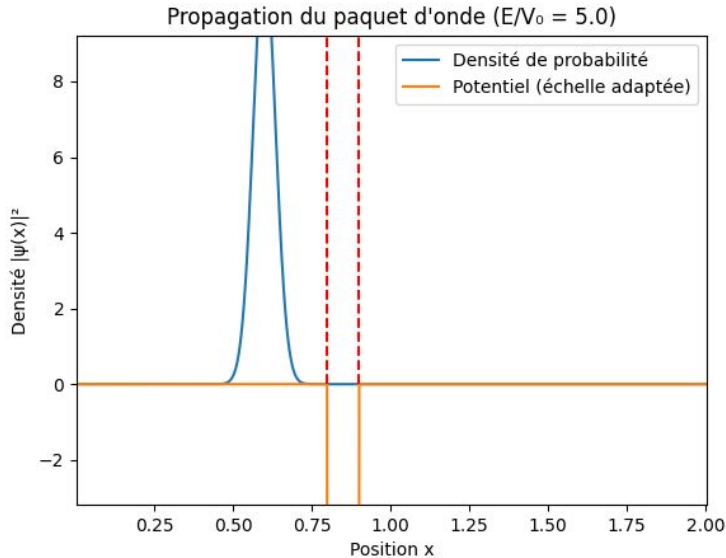
A savoir : le phénomène de transmission totale ($T=1$) arrive seulement que pour des valeurs précises de l'énergie.

Un paquet d'ondes contient un spectre d'énergie.

- Si le pic du paquet est au bon endroit, le paquet d'ondes traverse sans être réfléchi (ou presque)
- Sinon il est partiellement réfléchi

Nous remarquons alors une atténuation de la réflexion, différent du cas où $T=1$ pour une seule énergie.

4. Visualisation de la propagation d'un paquet d'ondes



Ce graphique représente la probabilité qu'un paquet d'onde soit présent.

La probabilité de présence du paquet d'ondes est constante avant l'arrivée au puits de potentiel.

Puis, au contact du puits de potentiel, une partie de la probabilité de présence du paquet d'ondes est réfléchi du côté gauche du puits de potentiel (onde réfléchi) tandis que l'autre partie est diffusé dans le puits avant de sortir de ce dernier (onde transmise). A la sortie du puits, la probabilité de présence du paquet d'ondes est diminuée car l'onde a été transmise.

On a ainsi modéliser l'effet de Ramsauer-Townsend → Une partie de la fonction d'onde est réfléchi et l'autre transmise.

4. Visualisation de la propagation d'un paquet d'ondes

3) Démonstration qualitative : transmission d'un paquet d'ondes

Soit un paquet d'ondes initial gaussien :

$$\psi(x,0) = \int A(k) e^{ikx} dk = e^{ik_0 x} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

avec k_0 le centre de la largeur du paquet d'ondes
et σ^2 la variance spatiale du paquet d'ondes

Dans le domaine de Fourier :

$$A(k) = e^{-\frac{(k-k_0)^2 \sigma^2}{2}}$$

Chaque composante k a une transmission $T(k)$. Alors l'amplitude est :

$$\psi_T(x,t) = \int A(k) \sqrt{T(k)} e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$$

→ La transmission du paquet dépend du profil de $T(k)$ autour de k_0 .



4. Visualisation de la propagation d'un paquet d'ondes

4) Conclusion de l'étude analytique

- Le paquet d'ondes ne peut être totalement transmis sauf si toute sa largeur en k soit dans une zone $T(k)=1$ ou environ égale à 1.
- La transmission globale du paquet dépend de la forme de $T(k)$, la largeur du paquet d'ondes $[k]$ et la position au centre du paquet d'ondes par rapport à la zone où $T(k)$ est maximale.
- Si le paquet est trop large ou le centre du paquet d'ondes est mal positionné alors une partie sera réfléchie, donc le paquet d'ondes sera partiellement transmis.



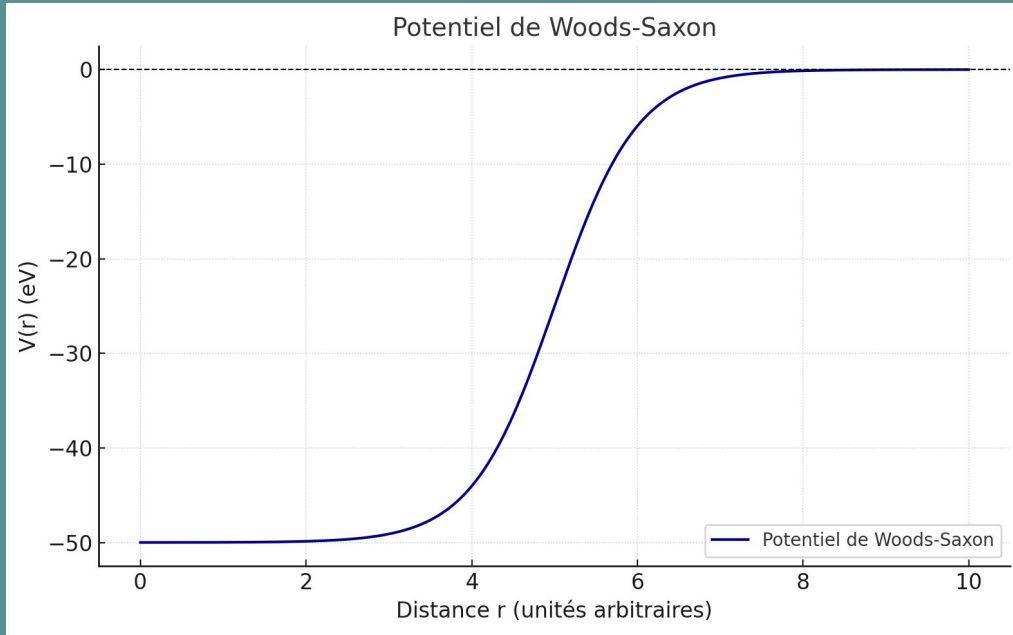
5. Modèle de potentiel plus réaliste (Woods-Saxon)

Dans notre première approche, on a modélisé l'atome comme une boîte à bords rigides : un puits de potentiel. C'est une approximation simple à manipuler, mais très éloignée de la réalité.

En effet, les atomes n'ont pas de murs nets : la force qu'ils exercent sur un électron ne change pas brusquement, mais varie en douceur. Le nuage d'électrons diffuse la charge, et l'interaction devient progressivement plus faible à mesure qu'on s'éloigne du noyau.

Pour mieux représenter cela, on peut utiliser un modèle plus réaliste appelé le potentiel de *Woods-Saxon*. Ce potentiel a une forme de vallée douce : il attire l'électron lorsqu'il est proche du centre, puis s'atténue lentement à distance. Ce modèle est plus fidèle à la physique réelle des gaz nobles. Même avec un modèle plus réaliste, on continue à observer l'effet Ramsauer-Townsend. Cela montre que ce phénomène ne vient pas d'un simple modèle approximatif, mais qu'il reflète vraiment le comportement ondulatoire des électrons dans la réalité.

5. Modèle de potentiel plus réaliste (Woods-Saxon)



La forme du potentiel est :

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

avec V_0 la profondeur du puits de potentiel
 R le rayon du noyau
 a l'épaisseur de la surface du noyau
 r la distance du centre du noyau



FIN