Physique moderne

Encadré par M. AKRIDAS

MI-5 • Année de Préing 2

Groupe MI5-C

Étude analytique

Réalisé par :

Romain MICHAUT-JOYEUX

Ziyad HADDADI

Nathan CHOUPIN

Année universitaire 2024/2025

Résolution analytique du problème

A. Résolution de l'équation de Schrödinger

On considère un électron de masse **m** et d'énergie **E** > 0 arrivant dans un puits de potentiel fini, tel que :

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

On peut représenter la situation par le schéma suivant :

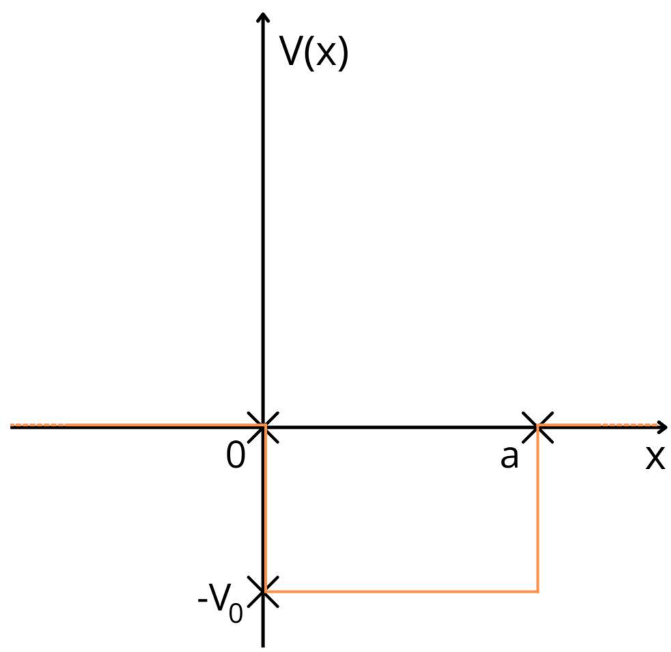

Figure 1: Potentiel (J) en fonction de la position (m), réalisé avec Canva.

Posons l'équation de Schrödinger indépendante du temps, en une dimension :

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

Où :

$\psi(x)$ est la fonction d'onde de la particule étudiée (en m^1/2).

$\hbar$ est la constante de Planck réduite (en J.s).

En région I, $x < 0, V(x)=0$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}=E\psi_1(x)$$

$$\Leftrightarrow\frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}-E\psi_1(x)=0$$

$$\Leftrightarrow\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+\frac{2mE\psi_1(x)}{\hbar^2}=0$$

$$\Leftrightarrow\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+k_1^2\psi_1(x)=0 \text{ avec } k_1=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

On en déduit la solution de l'équation différentielle :

$\psi_1(x)=Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x}$, où Ae^{ik_1x} est l'onde incidente, Be^{-ik_1x} l'onde réfléchie et A et B sont des complexes.

En région II, $x\in[0,a], V(x)=-V_0$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}-V_0\cdot\psi_2(x)=E\cdot\psi_2(x)$$

$$\Leftrightarrow\frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}-(V_0+E)\psi_2(x)=0$$

$$\Leftrightarrow\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}\psi_2(x)=0$$

$$\Leftrightarrow\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+k_2^2\psi_2(x)=0 \text{ avec } k_2=\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$$

D'où on déduit la solution :

$\psi_2(x)=Ce^{ik_2x}+De^{-ik_2x}$, où C et D sont des complexes.

En région III, $x > a, V(x)=0$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2}=E\psi_3(x)$$

$$\Leftrightarrow\frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2}-E\psi_3(x)=0$$

$$\Leftrightarrow\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2}+k_3^2\psi_3(x)=0 \quad \text{avec} \quad k_3=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

D'où on déduit la solution :

$\psi_3(x)=F\,e^{ik_3x}$ où ψ_3 est l'onde transmise vers $+x$ et F complexe.

En effet, il n'y a pas d'onde incidente venant à droite, donc on ne met pas de terme en e^{-ik_3x} dans la région III.

B. Coefficient de transmission

L'équation de Schrödinger indépendante du temps est une équation différentielle du second ordre. Cette équation implique que si le potentiel $V(x)$ est fini, alors $\psi(x)$ doit être continue pour que $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ existe.

Cette condition de continuité implique les relations suivantes :

$$(S):\begin{cases}\psi_1(0) & = & \psi_2(0)\\ \psi_1'(0) & = & \psi_2'(0)\\ \psi_2(a) & = & \psi_3(a)\\ \psi_2'(a) & = & \psi_3'(a)\end{cases}$$ qui est un système linéaire à cinq inconnues.

Posons $k=k_1=k_3$ et $q=k_2$.

On calcule la dérivée de ψ_1 :

$$\psi_1(x)=A\,e^{ikx}+B\,e^{-ikx}$$
$$\psi_1'(x)=ik\,A\,e^{ikx}-ik\,B\,e^{-ikx}$$

Dérivée de ψ_2 :

$$\psi_2'(x)=iq\,C\,e^{iqx}-iq\,D\,e^{-iqx}$$

Dérivée de ψ_3 :

$\psi_3'(x)=i\,k\,F\,e^{ikx}$ où

On a le système suivant :

$$(S):\begin{cases} A+B & = & C+D & (1)\\ k(A-B) & = & q(C-D) & (2)\\ C\,e^{iqa}+D\,e^{-iqa} & = & F\,e^{ika} & (3)\\ q(C\,e^{iqa}-D\,e^{-iqa}) & = & k\,F\,e^{ika} & (4)\end{cases}$$

Les constantes utiles pour nos calculs sont A et F. On cherche à éliminer B en calculant $(1)\cdot k+(2)$:

$$(S):\begin{cases} kA+kB & = & C+D\\ kA-kB & = & qC-qD\end{cases} \Rightarrow\ 2kA\ =\ (k+q)C+(k-q)D \qquad (5)$$

On cherche à éliminer D en calculant $(3)\cdot q+(4)$:

$$(S):\begin{cases} qC\,e^{iqa}+qD\,e^{-iqa} & = & qF\,e^{iqa} \\ qC\,e^{iqa}-qD\,e^{-iqa} & = & kF\,e^{ika} \end{cases} \Rightarrow\ 2kC\,e^{iqa}\ =\ F(k+q)e^{ika} \qquad (6)$$

On cherche à éliminer C en calculant $(3)\cdot q-(4)$:

$$(3)\cdot q-(4)\ \Rightarrow\ 2\,qD\,e^{-iqa}\ =\ F(q-k)e^{ika} \qquad (7)$$

On remplace ensuite C et D dans (5) à l'aide des expressions (6) et (7) et on obtient :

$$2kA\ =\ \frac{(k+q)^2}{2q}\cdot F\,e^{i(k-q)a}-\frac{(k-q)^2}{2q}\cdot F\,e^{i(k+q)a}$$

Le coefficient de transmission T modélise la probabilité que l'onde soit transmise, où T est compris entre 0 et 1). Il se calcule à l'aide du rapport de l'intensité de l'onde incidente sur l'intensité de l'onde transmise.

Ainsi, $T\ =\ |\frac{F}{A}|^2\ =\ \frac{|F|^2}{|A|^2}$ où $|\cdot|$ représente le module au carré.

Isolons le rapport $\frac{F}{A}$

$$\frac{F}{A}\ =\ \frac{4\,kq\,e^{-ika}}{(k+q)^2 e^{-iqa}-(k-q)^2 e^{iqa}}$$

On calcule les modules et on utilise la forme trigonométrique pour faciliter le calcul :

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{16k^2q^2}{|(k+q)^2[\cos(qa)-i\sin(qa)]-(k-q)^2[\cos(qa)+i\sin(qa)]|^2}$$

On regroupe les termes réels puis imaginaires puis on utilise $|a+ib|^2 = a^2+b^2$:

$$T = \frac{16k^2q^2}{|((k+q)^2-(k-q)^2)\cos(qa)-i((k+q)^2+(k-q)^2)\sin(qa)|^2}$$

$$T = \frac{16k^2q^2}{16k^2q^2\cos^2(qa)+4(k^2+q^2)^2\sin^2(qa)}$$

$$T = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2\cos^2(qa)+(k^2+q^2)^2\sin^2(qa)}$$

En injectant les expressions de k et de q , on obtient :

$$T = \left(1+\frac{V_0^2}{4E(E+V_0)}\cdot\sin^2\left(\sqrt{(2m(E+V_0))}\frac{a}{\hbar}\right)\right)^{-1}$$ (ne dépend que de q)

C. <u>Résultats</u>

En physique quantique, un électron est dévié (ou diffusé) s'il a été réfléchi partiellement ou totalement. On s'intéresse ici au cas où l'électron ne serait pas du tout réfléchi, mais totalement transmis. Nous savons qu'une particule peut être transmise ou réfléchie, ce qui implique que $T+R=1$, où R représente le coefficient de réflexion. On observe l'effet Ramsauer-Townsend lorsque $T=1$, c'est-à-dire quand $R=0$.

Or $T=1 \Rightarrow \cos^2(qa)=1 \quad et \quad \sin^2(qa)=0 \Rightarrow \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}a=n\pi \quad , \quad n\in\mathbb{Z}$

On a de plus :

$$\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}a=n\pi \Leftrightarrow 2m(E+V_0)=\frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{a^2} \Leftrightarrow E=\frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}-V_0$$

D. Interprétation physique

La condition $\sin^2(qa)=0$ implique qu'il existe des valeurs précises prises par l'énergie d'un électron, lui permettant traverser l'atome sans être dévié. En physique quantique, la section efficace de diffusion est une mesure qui indique la probabilité qu'une particule incidente interagisse avec une autre particule lors de leur rencontre. Cette section, dans laquelle les collisions sont rendues possibles, s'annule pratiquement lorsqu'on observe cet effet. En une dimension de l'espace, la section efficace se calcule par $\sigma = 1-T$ (sans unité). En effet, la seule quantité mesurable est le flux incident et le flux réfléchi, du fait de l'absence de surface et d'angle de diffusion en une dimension.

Cela contredit la physique classique puisque ce phénomène montre la nature ondulatoire des particules. En effet, si l'on perçoit une particule comme une onde lorsqu'elle arrive dans le puits de potentiel, celle-ci est réfléchie à gauche du puits et transmise à droite. Or, ces ondes se superposent et s'additionnent ou s'annulent selon leur phase (et donc leur énergie) : on parle de phénomène d'interférences. L'effet Ramsauer–Townsend correspond à une annulation totale de ces deux ondes.