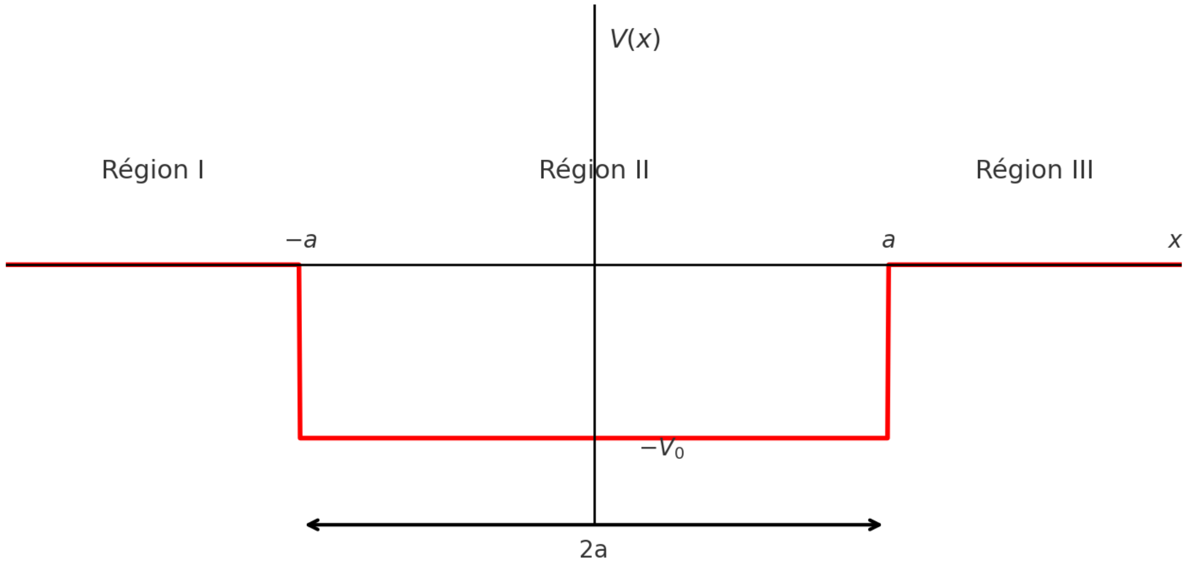
Résolution analytique – Effet Ramsauer–Townsend

1. Définition du puits de potentiel :

On considère un **puits de potentiel rectangulaire** centré en $x = 0$, de largeur $2a$ et de profondeur $V0 > 0$:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & si\ x < -a \\ -V0 & si\ -a \leq x \leq a \\ 0 & si\ x > a \end{cases}$$

Fig. 1 : Puits de potentiel de largeur 2a et de profondeur $-V_0$



On se place dans le cas où $E > -V0,$ avec $V0 > 0$

2. On rappelle l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

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

3. Solutions générales dans les trois régions :

Région I : $x < -a$

Dans cette région, $V(x) = 0$, donc l'équation de Schrödinger devient :

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \iff \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{\boldsymbol{2mE}}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

$$\Longrightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + {\kappa_1}^2\psi(x) = 0$$

$$\text{avec } \kappa_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Solution générale :

$$\psi_I(x) = Ae^{i\kappa_1 x} + Be^{-i\kappa_1 x}$$

- A : amplitude de l'onde incidente (venant de la gauche)
- B : amplitude de l'onde réfléchie (vers la gauche)

Région II : $a \leq x \leq a$

Dans cette région, $V(x) = -V0$, donc l'équation de Schrödinger devient :

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E + V0)}{\hbar^2}\psi(x) \Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + {\kappa_2}^2\psi(x) = 0$$

$$\text{avec } \kappa_2 = \frac{\sqrt{2m(E+V0)}}{\hbar}$$

Solution générale :

2 formes équivalentes :

(elles sont reliées par des identités d'Euler $e^{-ikx} = \cos(kx) + \mathrm{i}\sin(kx)$)

- Forme exponentielle :

$$\psi_{II}(x) = Ce^{i\kappa_2 x} + De^{-i\kappa_2 x}$$

- Forme trigonométrique : (c'est ce qu'on va utiliser)

$$\psi_{II}(x) = \alpha\cos(\kappa_2 x) + \beta sin(\kappa_2 x)$$

Région III : $x > a$

Dans cette région, $V(x) = 0$, donc on obtient la même équation qu'en région I : $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + {\kappa_1}^2\psi(x) = 0$

Solution générale :

$$\psi_{III}(x) = Fe^{i\kappa_1 x}$$

Remarque : pas de $e^{-i\kappa_1 x}$ parce qu'il n'y a pas d'onde incidente venant de l'infini à droite, donc pas de réflexion depuis la droite.

Et **F** correspond à l'amplitude de l'onde transmise.

4. Continuité de la fonction d'onde $\psi(x)$:

L'équation de Schrödinger impose que :

La fonction d'onde **ψ(x)** et sa dérivée **ψ′(x)** doivent être **continues partout**, même aux points où le potentiel change brutalement.

Donc on impose à :

- $x = -a$:

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a)$$
$$\psi'_I(-a) = \psi'_{II}(-a)$$

- $x = a$:

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$$
$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a)$$

Application des conditions aux bords :

- À $x = -a$:

  1. **Continuité de ψ(x) :**

$$Ae^{-i\kappa_1 a} + Be^{i\kappa_1 a} = Ce^{-i\kappa_2 a} + De^{i\kappa_2 a} \quad (1)$$

  2. **Continuité de ψ′(x) :**

$$i\kappa_1[-Ae^{-i\kappa_1 a} + Be^{i\kappa_1 a}] = i\kappa_2[-Ce^{-i\kappa_2 a} + De^{i\kappa_2 a}] \quad (2)$$

- À $x = a$:

  3. **Continuité de ψ(x) :**

$$Ce^{i\kappa_2 a} + De^{-i\kappa_2 a} = Fe^{i\kappa_1 a} \quad (3)$$

  4. **Continuité de ψ′(x) :**

$$i\kappa_2[Ce^{i\kappa_2 a} - De^{-i\kappa_2 a}] = i\kappa_1 Fe^{i\kappa_1 a} \quad (4)$$

5. Résolution du système :

- À $x = a$:

Soit le système M_1:

$$\begin{cases} Ce^{i\kappa_2 a} + De^{-i\kappa_2 a} = Fe^{i\kappa_1 a} & (3) \\ i\kappa_2\left[\mathrm{C}e^{i\kappa_2 a} - \mathrm{D}e^{-i\kappa_2 a}\right] = i\kappa_1 Fe^{i\kappa_1 a} & (4) \end{cases}$$

On résout ce système à deux équations pour C et D, en fonction de F :

Additionnons et soustrayons les équations :

$$(3) \implies Ce^{i\kappa_2 a} + De^{-i\kappa_2 a} = Fe^{i\kappa_1 a}$$

$$(4) \implies [\mathrm{C}e^{i\kappa a} - \mathrm{D}e^{-i\kappa a}] = \frac{\kappa_1}{\kappa_2} Fe^{i\kappa_1 a}$$

En posant :

$$X = Ce^{i\kappa_2 a} \quad et \quad Y = De^{-i\kappa_2 a}$$

On a : $$\begin{cases} X + Y = Fe^{i\kappa_1 a} \\ X - Y = \frac{\kappa_1}{\kappa_2} Fe^{i\kappa_1 a} \end{cases} \implies \begin{cases} X = \frac{F}{2}(1 + \frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{i\kappa_1 a} \\ Y = \frac{F}{2}(1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{i\kappa_1 a} \end{cases}$$

Donc : $$\boxed{\begin{aligned} C &= \frac{F}{2}(1 + \frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{i(\kappa_1 - \kappa_2)a} \\ D &= \frac{F}{2}(1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{i(\kappa_1 + \kappa_2)a} \end{aligned}}$$

- À $x = -a$:

Soit le système M_2:

$$\begin{cases} Ae^{-i\kappa_1 a} + Be^{i\kappa_1 a} = Ce^{-i\kappa_2 a} + De^{i\kappa_2 a} & (1) \\ i\kappa_1\left[-\mathrm{A}e^{-i\kappa_1 a} + \mathrm{B}e^{i\kappa_1 a}\right] = i\kappa_2\left[-Ce^{-i\kappa_2 a} + De^{i\kappa_2 a}\right] & (2) \end{cases}$$

On injecte les expressions de C et D trouvées dans M_1 :

En posant :

$$Ce^{-i\kappa_2 a} = \frac{F}{2}\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{i(\kappa_1-2\kappa_2)a}$$
$$De^{i\kappa_2 a} = \frac{F}{2}(1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{i(\kappa_1+2\kappa_2)a}$$

On obtient finalement le **système à deux équations** $entre\ A, B,\ et\ F$:

$$Ae^{-i\kappa_1 a} + Be^{i\kappa_1 a} = \frac{F}{2}\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{i(\kappa_1-2\kappa_2)a} + \frac{F}{2}(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{i(\kappa_1+2\kappa_2)a}$$
$$\kappa_1\left[-Ae^{-i\kappa_1 a} + Be^{i\kappa_1 a}\right] = \kappa_2\left[-\frac{F}{2}\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{i(\kappa_1-2\kappa_2)a} + \frac{F}{2}(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{i(\kappa_1+2\kappa_2)a}\right]$$

Afin de simplifier le système et de fixer une norme de référence, on suppose une onde incidente unitaire en posant $A = 1$. Cette hypothèse est physiquement légitime car, en mécanique quantique, les seules quantités pertinentes sont les **probabilités** de réflexion et de transmission, données par :

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 ; T = \left|\frac{F}{A}\right|^2$$

Ces grandeurs dépendent uniquement des **rapports entre les amplitudes**, et non de leur valeur absolue.
Poser $A = 1$ revient donc à fixer une convention de normalisation, sans perte de généralité.
Ainsi notre système précèdent devient :

$$\begin{cases} e^{-i\kappa_1 a} + Be^{i\kappa_1 a} = \frac{F}{2}\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{i(\kappa_1-2\kappa_2)a} + \frac{F}{2}(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{i(\kappa_1+2\kappa_2)a} & (a) \\ \kappa_1\left[-e^{-i\kappa_1 a} + Be^{i\kappa_1 a}\right] = \kappa_2\left[-\frac{F}{2}\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{i(\kappa_1-2\kappa_2)a} + \frac{F}{2}(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{i(\kappa_1+2\kappa_2)a}\right] & (b) \end{cases}$$

On multiplie par $e^{-i\kappa_1 a}$ pour simplifier, on obtient :

$$\begin{cases} e^{-2i\kappa_1 a} + B = \frac{F}{2}\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-i2\kappa_2 a} + \frac{F}{2}(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{2i\kappa_2 a} & (a) \\ \kappa_1\left[-e^{-2i\kappa_1 a} + B\right] = \frac{F}{2}\kappa_2\left[-\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-2i\kappa_2 a} + (1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{2i\kappa_2 a}\right] & (b) \end{cases}$$

On exprime B depuis (a) :

$$B = \frac{F}{2}\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-i2\kappa_2 a} + \frac{F}{2}(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{2i\kappa_2 a} - e^{-2i\kappa_1 a} \quad (c)$$

On injecte (c) dans (b) :

$$(b):\ \kappa_1\left[-e^{-2i\kappa_1 a}+\frac{F}{2}\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-i2\kappa_2 a}\ +\ \frac{F}{2}(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{2i\kappa_2 a}\ -\ e^{-2i\kappa_1 a}\right]$$
$$=\ \frac{F}{2}\kappa_2\ \left[-\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-2i\kappa_2 a}\ +(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{2i\kappa_2 a}\right]$$

$$\Longrightarrow\quad (b):\ \ -2\kappa_1 e^{-2i\kappa_1 a}+\frac{F}{2}\kappa_1\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-i2\kappa_2 a}\ +\ \frac{F}{2}\kappa_1(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{2i\kappa_2 a}$$
$$=\ \ -\frac{F}{2}\kappa_2\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-2i\kappa_2 a}\ +\frac{F}{2}\kappa_2(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{2i\kappa_2 a}$$

$\Longrightarrow\ (b): -2\kappa_1 e^{-2i\kappa_1 a}+\frac{F}{2}\kappa_1\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-i2\kappa_2 a}\ +\ \frac{F}{2}\kappa_1(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{2i\kappa_2 a}\ +$ $\frac{F}{2}\kappa_2\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-2i\kappa_2 a}\ -\frac{F}{2}\kappa_2(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{2i\kappa_2 a}\ =\ \ 0$

$\Longrightarrow -2\kappa_1 e^{-2i\kappa_1 a}+\frac{F}{2}\left[\kappa_1\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)\ +\ \kappa_2\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)\right]e^{-2i\kappa_2 a}+\frac{F}{2}\left[\kappa_1(1\ -\frac{\kappa_1}{\kappa_2})\ -\right.$ $\left.\kappa_2(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})\right]e^{2i\kappa_2 a}=\ \ 0$

$\Longrightarrow -2\kappa_1 e^{-2i\kappa_1 a}+\frac{F}{2}(\kappa_1\ +\kappa_2\ )\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-2i\kappa_2 a}+\frac{F}{2}(\kappa_1\ -\ \kappa_2\ )(1\ -$ $\frac{\kappa_1}{\kappa_2})\ e^{2i\kappa_2 a}=0$

On isole F :
$\frac{F}{2}\left[\ (\kappa_1\ +\kappa_2\ )\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-2i\kappa_2 a}\ +\ (\kappa_1\ -\ \kappa_2\ )(1\ -\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{2i\kappa_2 a}\right]\ =2\kappa_1 e^{-2i\kappa_1 a}$

Donc :

$$F\ =\frac{4\kappa_1 e^{-2i\kappa_1 a}}{(\kappa_1\ +\kappa_2\ )\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-2i\kappa_2 a}\ +\ (\kappa_1\ -\ \kappa_2\ )(1\ -\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{2i\kappa_2 a}}$$

On note que :

Le numérateur a une phase $e^{-2i\kappa_1 a}$, donc $|e^{-2i\kappa_1 a}|$=1,

$$|F|^2=\left|\frac{4\kappa_1}{D}\right|^2=\frac{16{\kappa_1}^2}{|D|^2}$$

avec $D=(\kappa_1 + \kappa_2)\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-2i\kappa_2 a} + (\kappa_1 - \kappa_2)(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{2i\kappa_2 a}$

$On\ a:\ D=(\kappa_1 + \kappa_2)\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)e^{-2i\kappa_2 a} + (\kappa_1 - \kappa_2)(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})e^{2i\kappa_2 a}$

On rappelle que : $\left|Ae^{-i\theta} + Be^{i\theta}\right|^2 = A^2 + B^2 + 2AB\cos(2\theta)$

Donc :

$|D|^2=\left[(\kappa_1 + \kappa_2)\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)\right]^2 + \left[(\kappa_1 - \kappa_2)(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})\right]^2 + 2(\kappa_1+\kappa_2)\left(1+\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)(\kappa_1 - \kappa_2)(1-\frac{\kappa_1}{\kappa_2})\cos(4\kappa_2 a)$

$\Longrightarrow\ |D|^2=\frac{(\kappa_1+\kappa_2)^4}{\kappa_2{}^2}+\frac{(\kappa_1-\kappa_2)^4}{\kappa_2{}^2}+2\frac{(\kappa_1{}^2-\kappa_2{}^2)^2}{\kappa_2{}^2}\cos(4\kappa_2 a)$

Ainsi :

$$|F|^2 = \frac{16\kappa_1{}^2}{|D|^2} = \frac{16\kappa_1{}^2}{\frac{(\kappa_1+\kappa_2)^4}{\kappa_2{}^2}+\frac{(\kappa_1-\kappa_2)^4}{\kappa_2{}^2}+2\frac{(\kappa_1{}^2-\kappa_2{}^2)^2}{\kappa_2{}^2}\cos(4\kappa_2 a)}$$

$$\boxed{|F|^2 = \frac{16\kappa_1{}^2\kappa_2{}^2}{(\kappa_1+\kappa_2)^4+(\kappa_1-\kappa_2)^4+2(\kappa_1{}^2-\kappa_2{}^2)^2\cos(4\kappa_2 a)}}$$

6. Coefficient de transmission :

Lorsqu'une particule incidente rencontre une région de potentiel, elle peut être partiellement transmise et partiellement réfléchie. Le **coefficient de transmission** T mesure la **probabilité que la particule traverse le potentiel**. Il est défini comme le **rapport entre le flux de probabilité transmis et le flux incident** :

$$T = \frac{J_{transmise}}{J_{incidente}}$$

Le flux de probabilité associé à une onde plane $\Psi(x) = Ae^{ikx}$ est donné, en unités réduites $(\hbar = m = 1), par:\ \boldsymbol{J} = |\boldsymbol{A}|^2.\boldsymbol{k}$

Dans notre cas :

- L'onde incidente a une amplitude 1 : $J_{incidente} = \kappa_1$
- L'onde transmise a une amplitude F : $J_{transmise} = |F|^2.\kappa_1$

Donc :

$$T = \frac{|F|^2.\kappa_1}{\kappa_1} = |F|^2$$

Cette expression permet d'analyser les conditions de **transmission parfaite** ($T = 1$) caractéristiques de l'**effet Ramsauer–Townsend**.

$$T = |F|^2 = \frac{16{\kappa_1}^2{\kappa_2}^2}{(\kappa_1 + \kappa_2)^4 + (\kappa_1 - \kappa_2)^4 + 2\,({\kappa_1}^2 - {\kappa_2}^2)^2\cos(4\kappa_2 a)}$$

7. Condition pour transmission parfaite :

Pour que la transmission soit parfaite il faut que $T = 1$, or

$$T = \frac{16{\kappa_1}^2{\kappa_2}^2}{(\kappa_1 + \kappa_2)^4 + (\kappa_1 - \kappa_2)^4 + 2\,({\kappa_1}^2 - {\kappa_2}^2)^2\cos(4\kappa_2 a)}$$

Cette expression est une fonction oscillante de κ_2, à cause du terme en $\cos(4\kappa_2 a)$. Le coefficient T est **maximal** lorsque ce cosinus atteint sa **valeur minimale**, c'est-à-dire :

$$\cos(4\kappa_2 a) = -1 \implies 4\kappa_2 a = (2n+1)\pi$$

On obtient donc la condition de transmission parfaite :

$$\boxed{\kappa_2 = \frac{(2n+1)\pi}{4a},\ n \in \mathbb{N}} \qquad \text{Avec } \kappa_2 = \frac{\sqrt{2m(E+V0)}}{\hbar}$$

8. Énergies pour lesquelles la transmission est parfaite :

Isolons E_n :

$$\frac{\sqrt{2m(E_n + V0)}}{\hbar} = \frac{(2n+1)\pi}{4a}$$

$$\implies \frac{2m(E_n + V0)}{\hbar^2} = \left(\frac{(2n+1)\pi}{4a}\right)^2$$

$$\implies \boxed{E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{(2n+1)\pi}{4a}\right)^2 - V0}$$

Cette formule nous donne :

- Les **énergies précises** pour lesquelles la **transmission est parfaite**.
- Ce sont les **positions théoriques des creux dans la section efficace** (σ).