

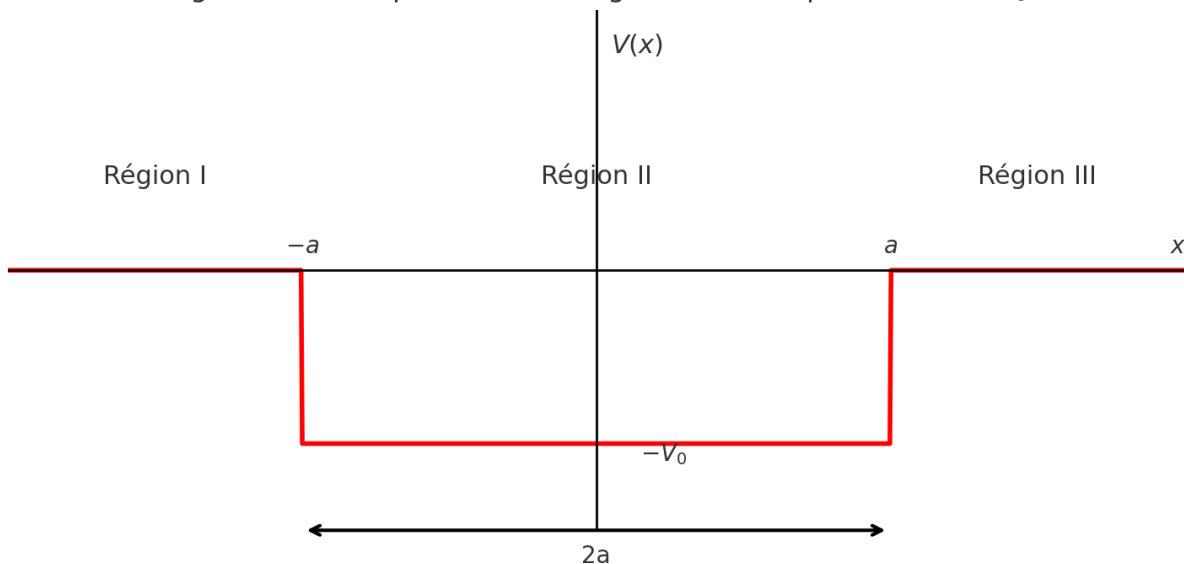
Résolution analytique – Effet Ramsauer–Townsend

1. Définition du puits de potentiel :

On considère un **puits de potentiel rectangulaire** centré en $x = 0$, de largeur $2a$ et de profondeur $V_0 > 0$:

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

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



On se place dans le cas où $E > -V_0$, avec $V_0 > 0$

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 :

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} &= E \psi(x) \Leftrightarrow \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \\ \Rightarrow \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \kappa_1^2 \psi(x) &= 0 \\ \text{avec } \kappa_1 &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \end{aligned}$$

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, $V(x) = -V_0$, donc l'équation de Schrödinger devient :

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}\psi(x) \Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \kappa_2^2\psi(x) = 0$$

$$\text{avec } \kappa_2 = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$$

Solution générale :

2 formes équivalentes :

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

- 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 $\psi(x)$ et sa dérivée $\psi'(x)$ 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 $\psi(x)$:

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

2. Continuité de $\psi'(x)$:

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

- À $x = a$:

3. Continuité de $\psi(x)$:

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

4. Continuité de $\psi'(x)$:

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

5. Résolution du système :

- À $x = a$:

Soit le système M_1 :

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

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

Additionnons et soustrayons les équations :

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

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

En posant :

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

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

Donc :

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

• À $x = -a$:

Soit le système M_2 :

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

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

En posant :

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

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

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

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

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 précédent devient :

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

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

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

On exprime B depuis (a) :

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

On injecte (c) dans (b) :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

On isole F :

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

Donc :

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

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

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

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

Donc :

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

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

Ainsi :

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

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

6. Coefficient de transmission :

Lorsqu'une particule incidente rencontre une région de potentiel, elle peut être partiellement transmise et partiellement réfléchi. 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 : $J = |A|^2 \cdot k$

Dans notre cas :

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

Donc :

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

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 :

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

On obtient donc la condition de transmission parfaite :

$$\kappa_2 = \frac{(2n+1)\pi}{4a}, n \in \mathbb{N}$$

$$\text{Avec } \kappa_2 = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$$

8. Énergies pour lesquelles la transmission est parfaite :

Isolons E_n :

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{2m(E_n + V_0)}}{\hbar} &= \frac{(2n + 1)\pi}{4a} \\ \Rightarrow \frac{2m(E_n + V_0)}{\hbar^2} &= \left(\frac{(2n+1)\pi}{4a}\right)^2 \\ \Rightarrow E_n &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{(2n+1)\pi}{4a}\right)^2 - V_0 \end{aligned}$$

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).