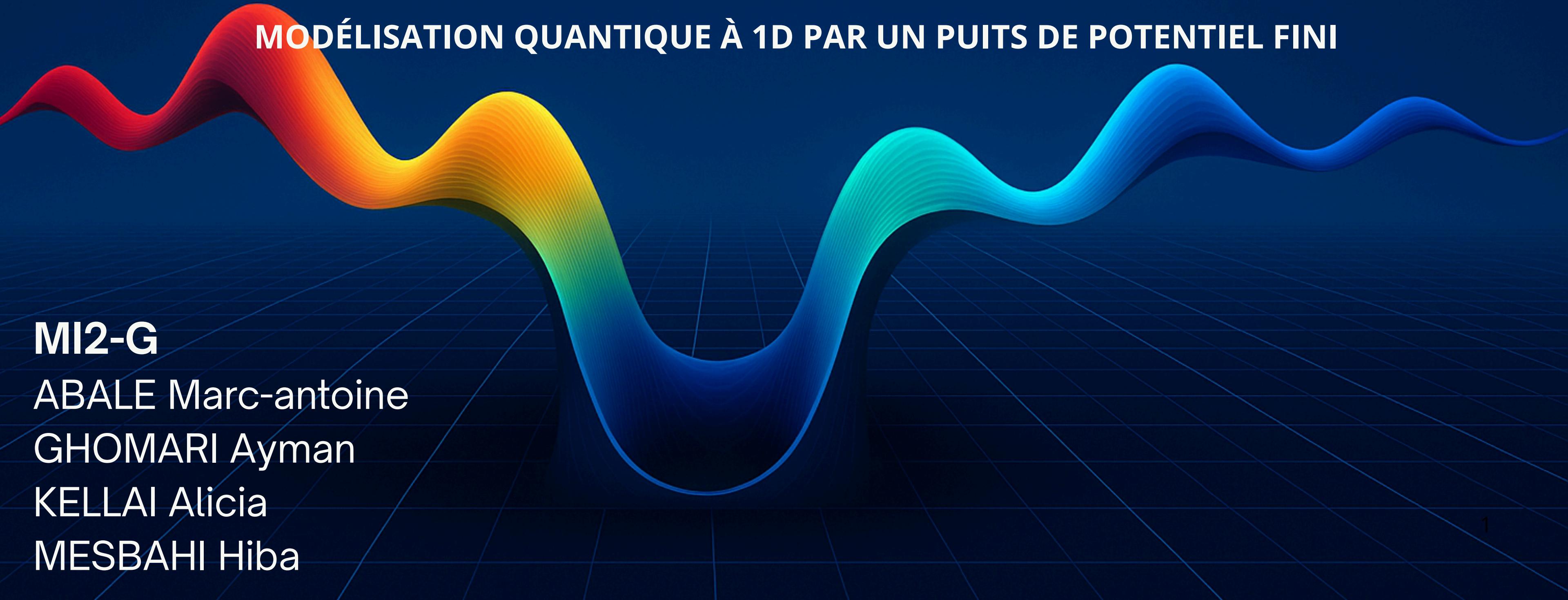


Effet Ramsauer-Townsend

MODÉLISATION QUANTIQUE À 1D PAR UN PUITS DE POTENTIEL FINI



MI2-G

ABALE Marc-antoine

GHOMARI Ayman

KELLAI Alicia

MESBAHI Hiba

Sommaire

- 01 **Introduction**
- 02 **Objectif du projet**
- 03 **Définitions des notions principales**
- 04 **Modélisation théorique**
- 05 **Résolution analytique**
- 06 **Résolution numérique**
- 07 **Comparaison / Conclusion**

Introduction

Lorsqu'une particule entre en interaction avec une autre, comme un électron avec un atome, elle peut être déviée de sa trajectoire initiale. En physique classique, on modélise cette interaction par un choc entre les objets. Mais à l'échelle quantique, ce type de raisonnement ne suffit plus.

C'est là qu'intervient la notion de section efficace : elle mesure la probabilité qu'une particule incidente soit diffusée en passant près d'une autre. En 1921, Ramsauer et Townsend ont mis en évidence un phénomène surprenant : pour certaines énergies bien précises, la section efficace de diffusion d'un électron dans un gaz noble devient quasiment nulle. Autrement dit, l'électron traverse l'atome sans être dévié, comme s'il ne le "voyait" pas.

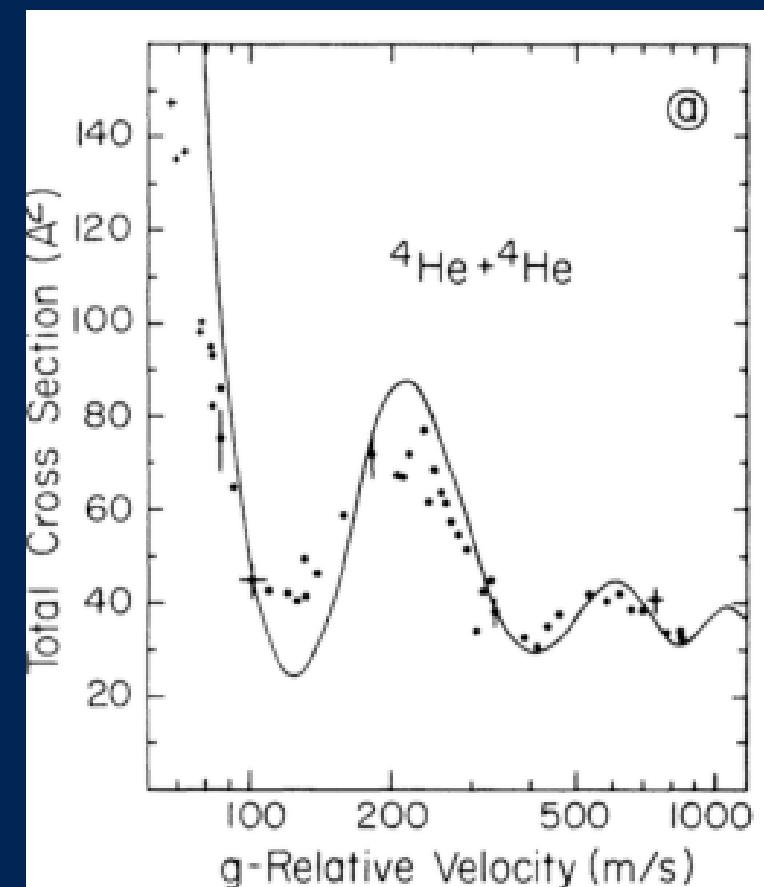
Ce comportement contre-intuitif, appelé effet Ramsauer–Townsend, ne peut être expliqué que par la mécanique quantique. Il met en évidence la nature ondulatoire des particules et les interférences qui en résultent.

Objectif du projet

- Comprendre un phénomène de diffusion quantique
- Utiliser un modèle simple de puit de potentiel fini pour l'interpréter
- S'appuyer sur une approche à la fois analytique et numérique

Définition : Effet Ramsauer-Townsend

L'effet Ramsauer-Townsend, aussi appelé effet Ramsauer ou effet Townsend, est un phénomène physique qui provoque la diffusion des électrons de faibles énergies par les atomes d'un gaz noble. Il est nommé en l'honneur de Carl Ramsauer (1879-1955) et John Townsend (1868-1957), qui ont indépendamment étudié les collisions entre les atomes et les électrons de faibles énergies au début des années 1920. Cet effet s'explique à l'aide de la mécanique quantique. (Wikipédia)

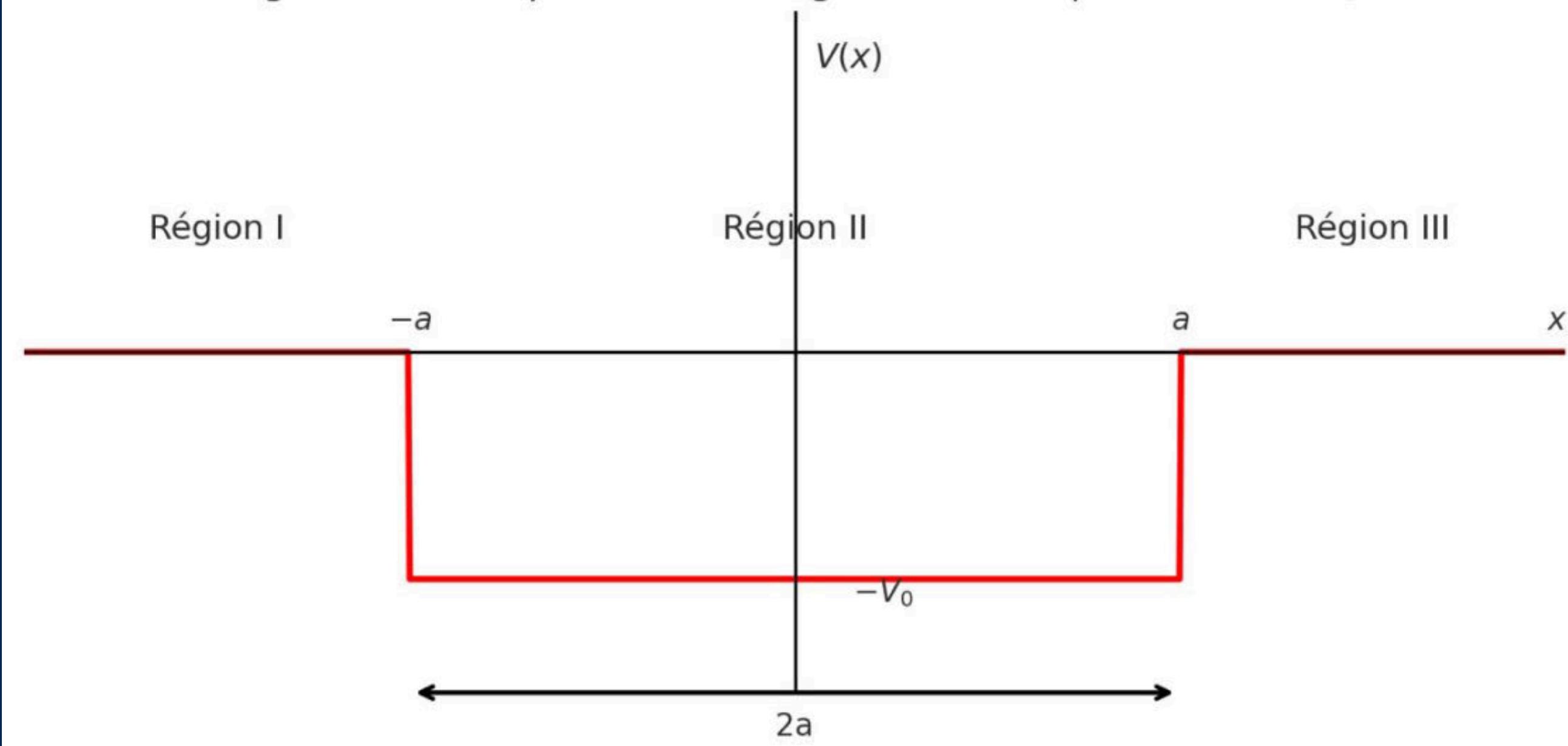


Définition : La section efficace

- Mesure la probabilité d'interaction entre une particule et un potentiel (ici le puit)
- La transmission $T(E)$ représente la probabilité que la particule traverse le potentiel
- La réflexion $R(E)$ représente la probabilité qu'elle soit réfléchie
- $T(E) + R(E) = 1$

Modèle utilisé

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



- Modèle physique : puits de potentiel rectangulaire fini, symétrique centré en 0, de largeur $2a$
- Domaine : 1D, segment $[-a, a]$
- Forme du potentiel $V(x)$:

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

Pourquoi un puits de potentiel ?

- ◆ **Représente l'attraction électron-noyau**
 - L'atome est modélisé comme une zone attractive pour l'électron.
 - Le potentiel est négatif dans le puits → il attire la particule.
 - En dehors du puits, $V(x)=0$ → la particule est libre.
- ◆ **Modèle symétrique, 1D = analytique et visuel**
 - Modèle 1D : réduit la complexité mathématique du problème réel (3D).
 - Puits symétrique → simplifie les conditions aux bords.
 - On peut résoudre exactement l'équation de Schrödinger.

Résolution analytique

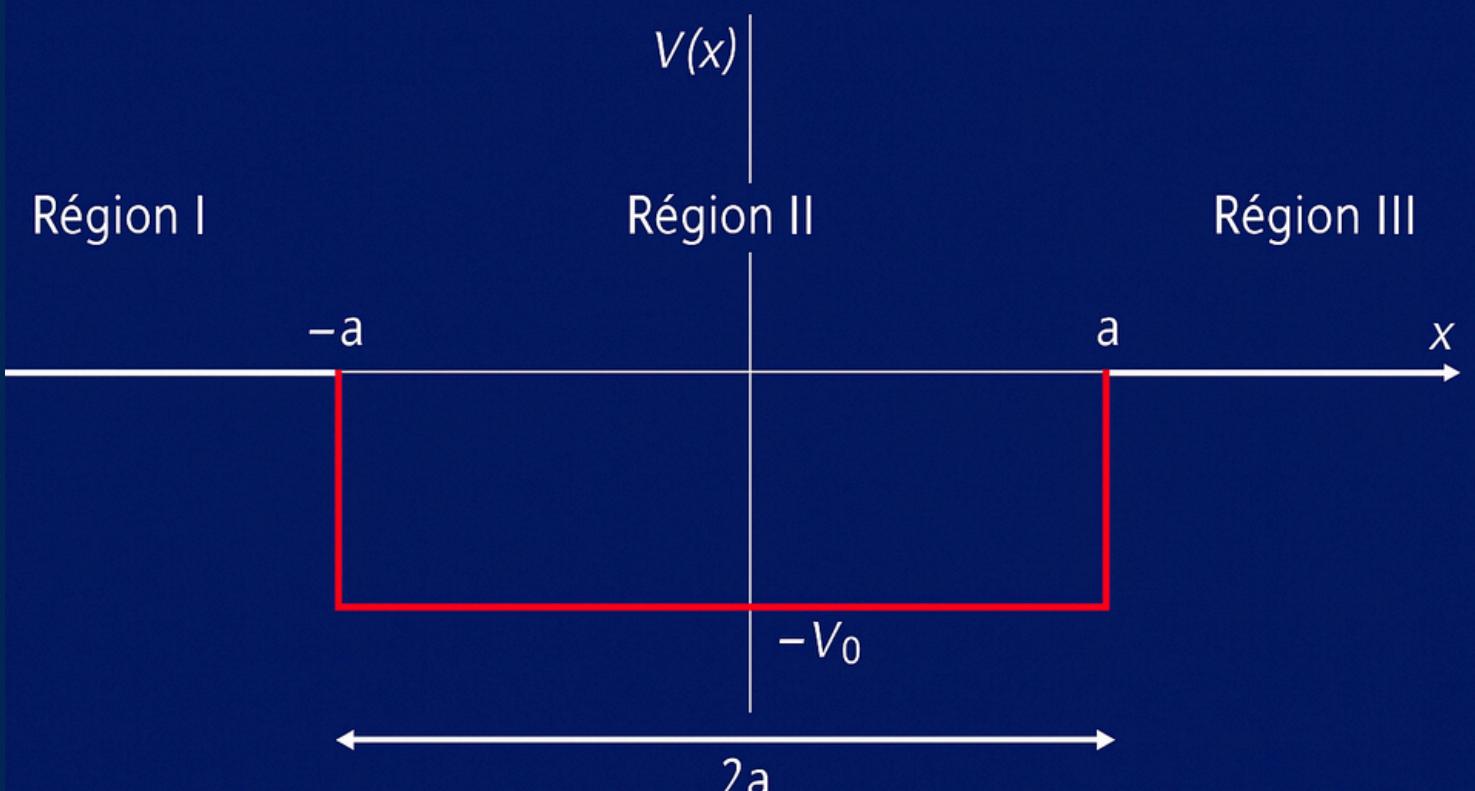
1- Définition du puits et des 3 régions d'étude

On modélise l'atome par un puits de potentiel symétrique :

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

- Largeur du puits : $2a$
- Profondeur : $-V_0$

Modèle de potentiel – Puits rectangulaire fini



2- Les états stationnaires

Équation de Schrödinger indépendante du temps :

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

Solutions générales dans les 3 régions :

$$\underline{\psi_I(x)} = A e^{i\kappa_1 x} + B e^{-i\kappa_1 x}$$

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

$$\underline{\psi_{III}(x)} = F e^{i\kappa_1 x}$$

Avec

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

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

3- Conditions de continuité

📌 Ces conditions garantissent la cohérence physique de la solution (pas de saut dans l'onde ni sa pente).

- $x = -a$:

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a)$$

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

- $x = a$:

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$$

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

4- Coefficient de transmission analytique

Après résolution du système, on obtient :

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

📌 Le coefficient $T(E)$ varie fortement avec l'énergie : il peut atteindre 1 → transparence totale.

- Transmission parfaite $\Leftrightarrow T(E) = 1$
- Cela se produit lorsque :

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

- En remplaçant dans l'expression de κ_2 , on obtient l'énergie correspondante :

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{(2n+1)\pi}{4a} \right)^2 - V_0$$

Ce sont les énergies où l'atome devient « transparent » → **manifestation de l'effet Ramsauer-Townsend.**

5- Vers un modèle plus réaliste : paquet d'ondes

Nous étudions ici analytiquement le cas d'une particule diffusée par un paquet d'ondes.

A partir de la résolution analytique du problème on a

$$T = \frac{4k_1 k_2 e^{-2ik_1 a}}{(k_1 + k_2)^2 e^{-2ik_1 a} - (k_1 - k_2)^2 e^{2ik_1 a}}$$

$$|T|^2 = \frac{16k_1^2 k_2^2}{(k_1 + k_2)^4 + (k_1 - k_2)^4 - 2(k_1^2 - k_2^2)^2 \cos(4ka)}$$

$$\alpha |T|^2 = 1$$

$$\text{d'où } k_2 = \frac{(2n+1)\pi}{4a} \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{(2n+1)\pi}{4a} \right)^2 - V_0$$

longeur d'onde

$$\phi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \phi_k(x) e^{-i \frac{E(k)}{\hbar} t} dk$$

avec $\phi_k(x)$ solution stationnaire

$$\phi(x,t) \approx T(k_0) e^{i \frac{(k_0 x - E_0 t)}{\hbar}} e^{-(x - v_0 t)^2 / 4\sigma_x^2}$$

$$\text{où } v = \frac{\hbar k_0}{m} \quad \text{et avec } g(k) = \left(\frac{2\pi}{\Delta k^2} \right)^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\Delta k^2}}$$

Résolution numérique – Paramètres physiques

```
dt=1E-7
dx=0.001
nx=int(1/dx)**2
nt=90000
nd=int(nt/1000)+1
n_frame = nd
s=dt/(dx**2)
xc=0.6
sigma=0.05
A=1/(math.sqrt(sigma*math.sqrt(math.pi)))
v0=-4000
e=5#Valeur du rapport E/v0
E=e*v0
k=math.sqrt(2*abs(E))
```

```
import numpy as np
import math
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.animation as animation
import time

o = np.linspace(0, (nx - 1) * dx, nx)
V = np.zeros(nx)
V[(o >= 0.8) & (o <= 0.9)] = v0 # Puits
```

(h et m sont approximé à 1)

Résolution numérique – Calculs

```
cpt = A * np.exp(1j * k * o - ((o - xc) ** 2) / (2 * (sigma ** 2)))
densite = np.zeros((nt, nx))
densite[0, :] = np.abs(cpt) ** 2
final_densite = np.zeros((n_frame, nx))
re = np.real(cpt)
im = np.imag(cpt)
b = np.zeros(nx)
```

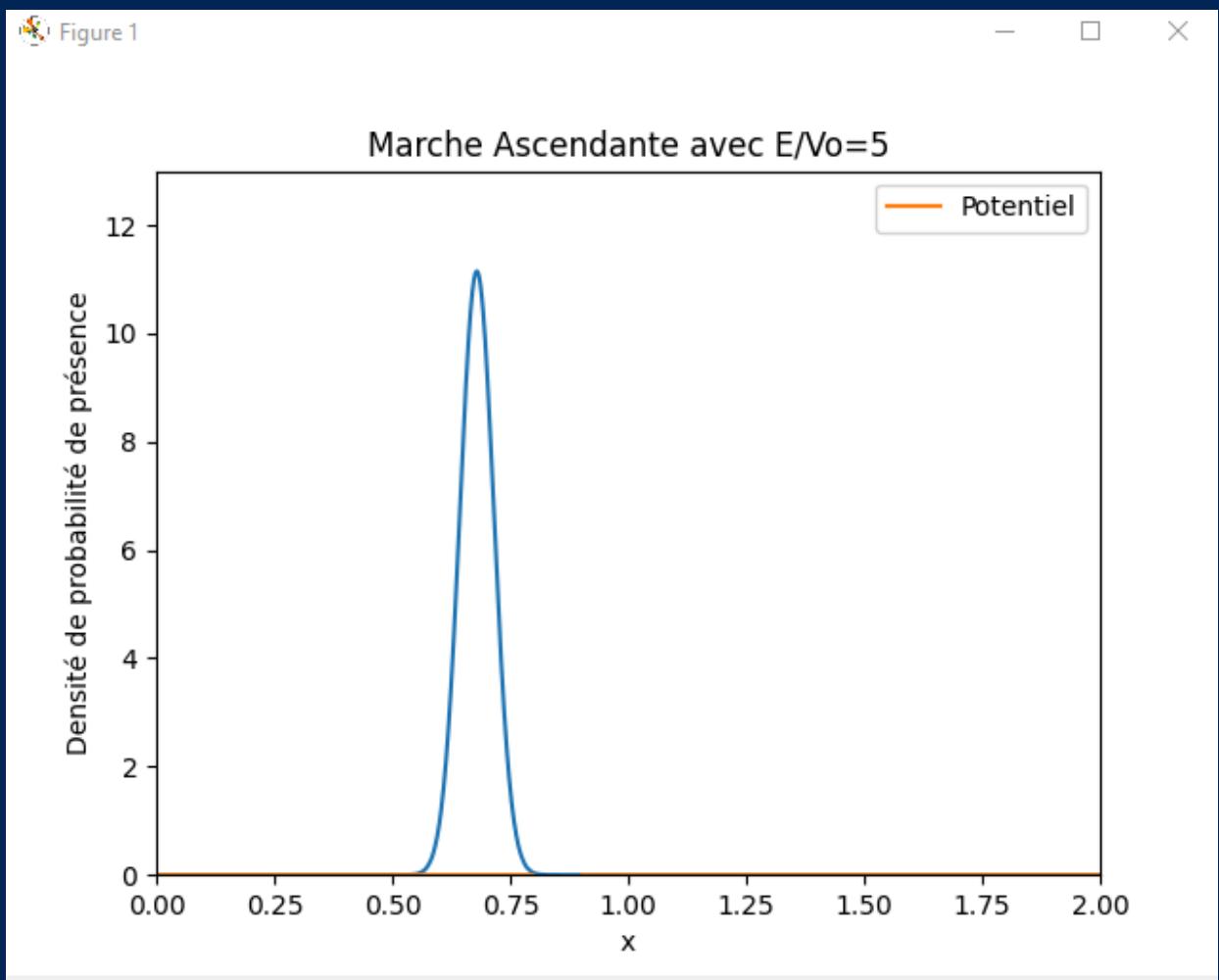
```
it = 0
for i in range(1, nt):
    if i % 2 != 0:
        b[1:-1] = im[1:-1]
        im[1:-1] = im[1:-1] + s * (re[2:] + re[:-2]) - 2 * re[1:-1] * (s + V[1:-1] * dt)
        densite[i, 1:-1] = re[1:-1]**2 + im[1:-1]**b[1:-1]
    else:
        re[1:-1] = re[1:-1] - s * (im[2:] + im[:-2]) + 2 * im[1:-1] * (s + V[1:-1] * dt)
    if (i - 1) % 1000 == 0:
        it += 1
        final_densite[it][:] = densite[i][:]
```

```

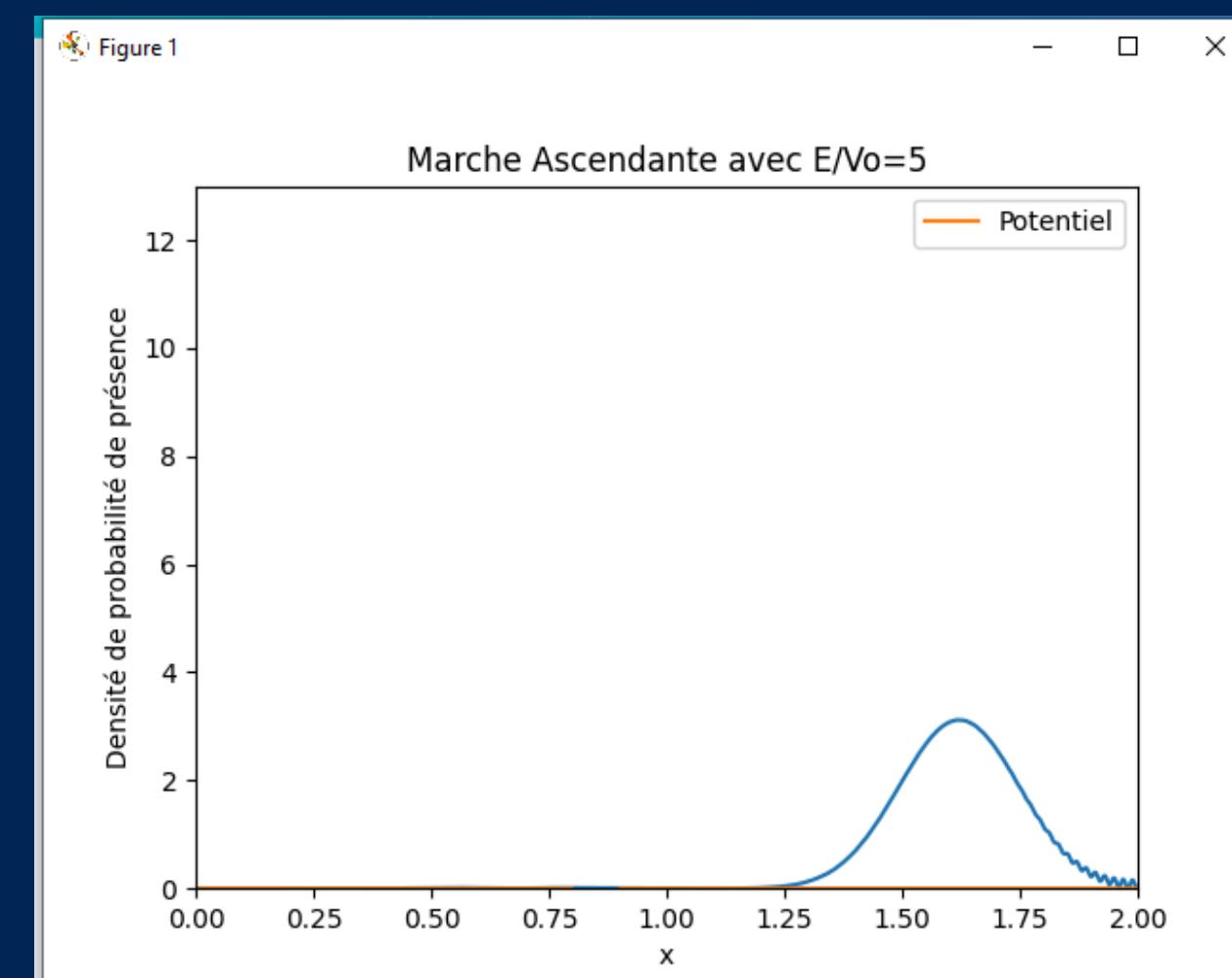
plot_title = "Propagation d'un paquet d'onde – E/V0 = " + str(e)
fig = plt.figure()
line, = plt.plot([], [])
plt.ylim(0, 13)
plt.xlim(0, 2)
plt.plot(o, v, label="Potentiel")
plt.title(plot_title)
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("Densité de probabilité de présence")
plt.legend()

ani = animation.FuncAnimation(fig, animate, init_func=init, frames=nd, blit=False, interval=100, repeat=False)
plt.show()

```

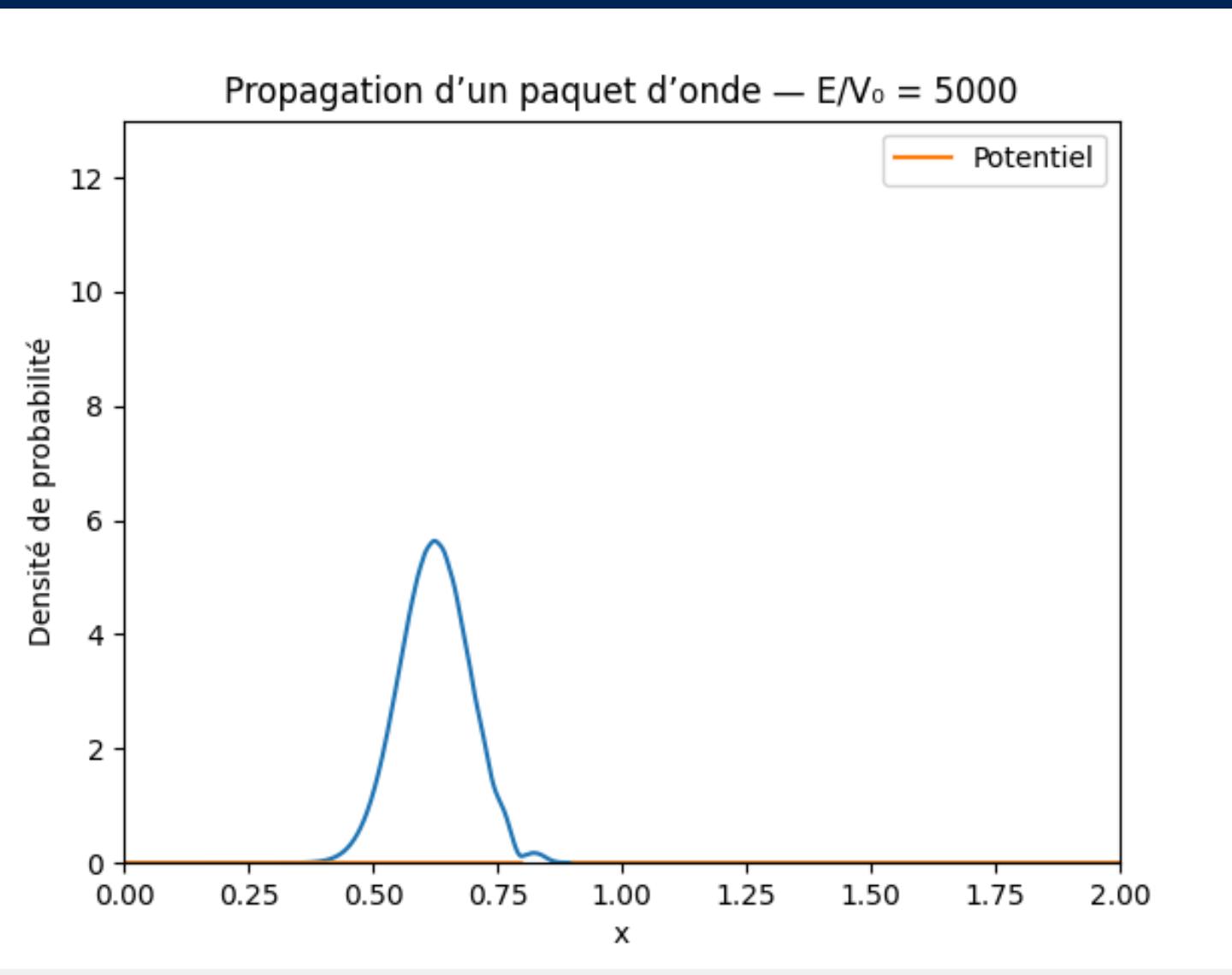


$E / V_0 = 5$

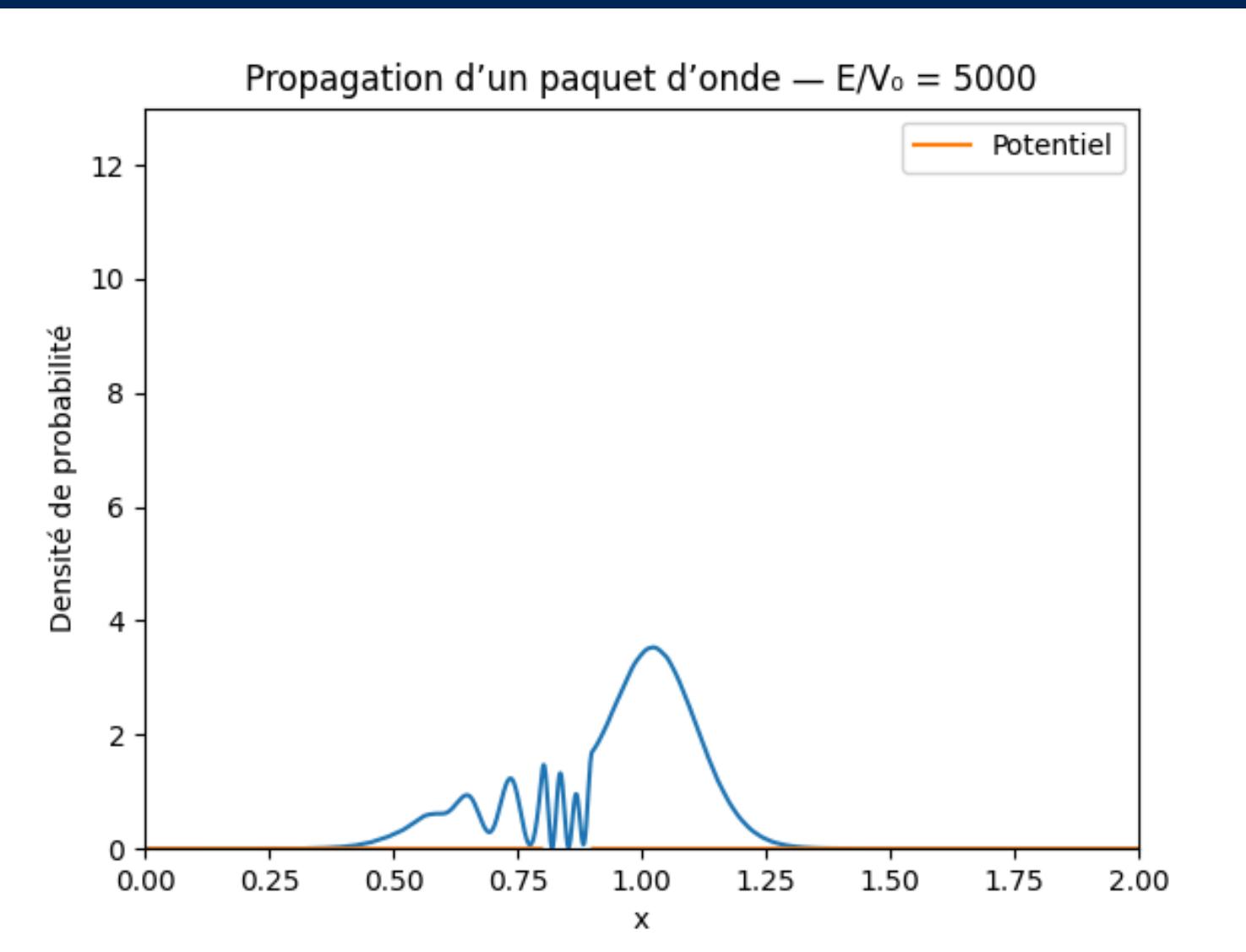


Il y a effet ramsauer car $T \approx 1$

Propagation d'un paquet d'onde — $E/V_0 = 5000$



Propagation d'un paquet d'onde — $E/V_0 = 5000$



$E / V_0 = 5000$

pas d'effet ramsauer car $T \neq 1$

Résolution numérique – États stationnaires

```
hbar = 1
m = 1
diag = np.full(nx, -2.0)
offdiag = np.full(nx - 1, 1.0)
laplacien = (np.diag(diag) + np.diag(offdiag, 1) + np.diag(offdiag, -1)) / dx**2
H = -(hbar**2 / (2 * m)) * laplacien + np.diag(v)
```

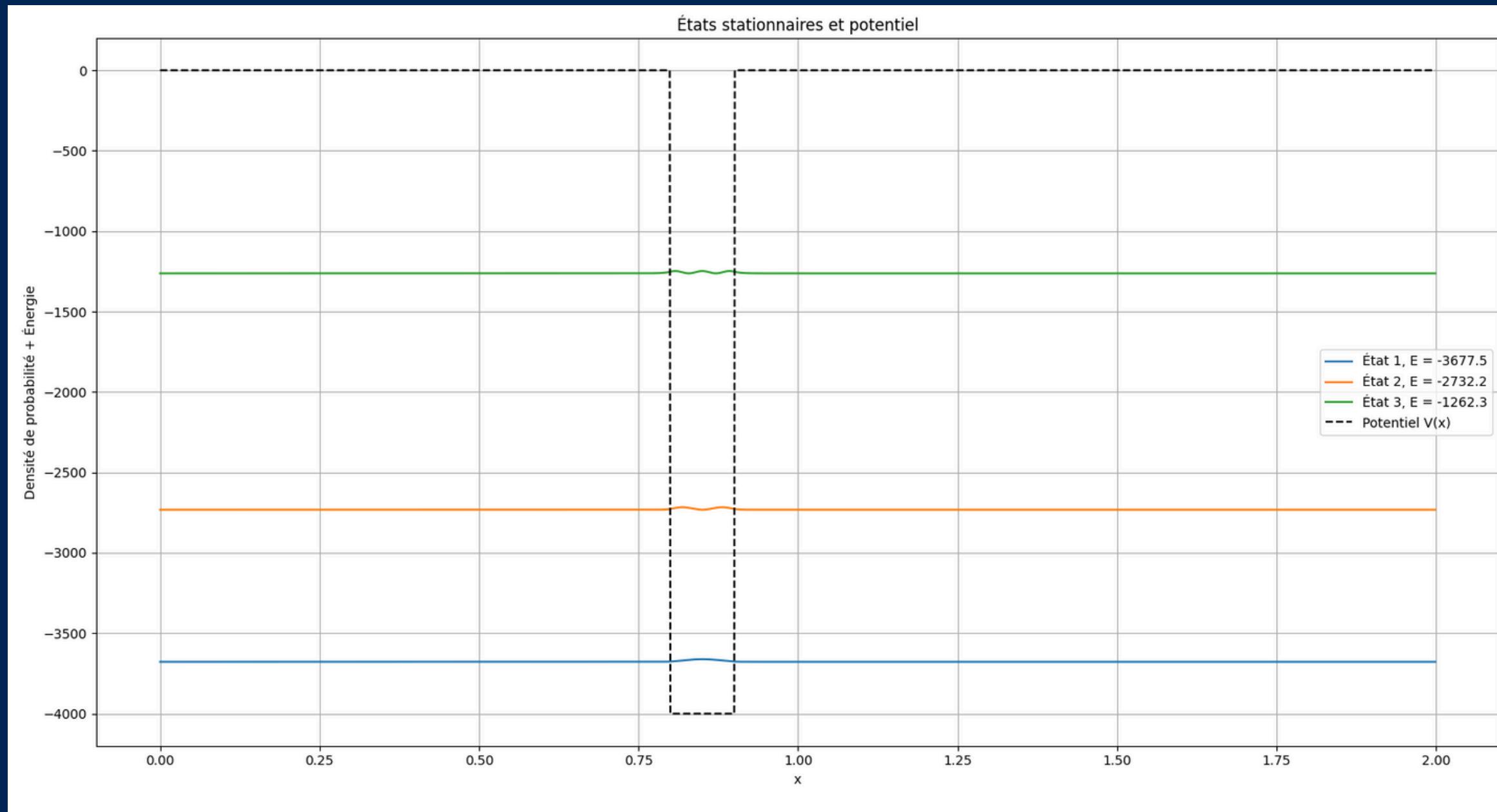
- On obtient une matrice tridiagonale :
- 2 sur la diagonale principale
- 1 sur les diagonales adjacentes

```
energies_stationnaires, vecteurs_stationnaires = np.linalg.eigh(H)
indices_bornes = np.where(energies_stationnaires < 0)[0][:50]
etats_stationnaires = []
for n in indices_bornes:
    psi_n = vecteurs_stationnaires[:, n]
    norm = np.sqrt(np.sum(np.abs(psi_n)**2) * dx)
    psi_n = psi_n / norm
    etats_stationnaires.append((energies_stationnaires[n], psi_n))
```

- Valeur propres représente les énergies stationnaires
- Vecteur propres représente les fonctions d'onde associée

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

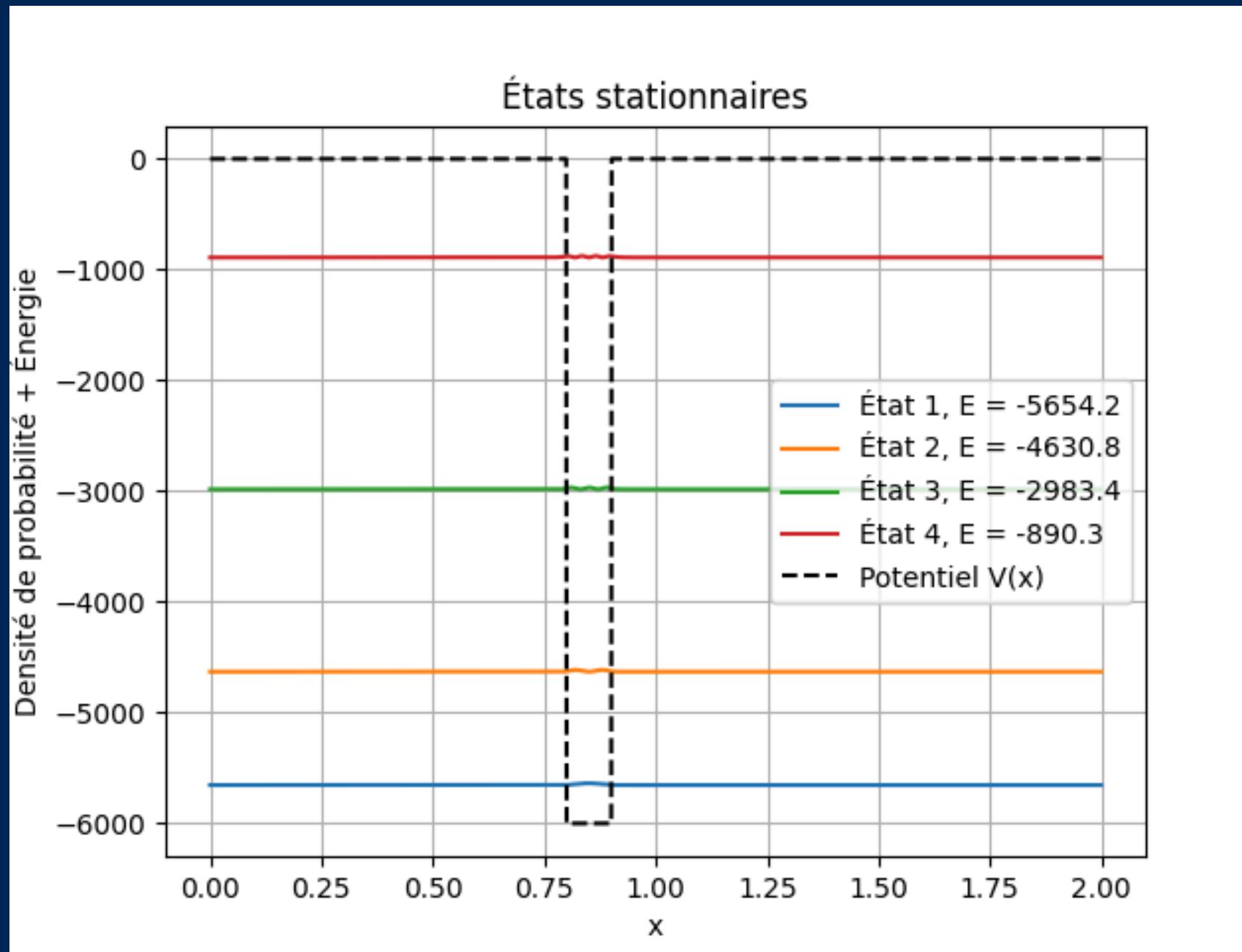
Résolution numérique – États stationnaires



- $a = 0.1$
- $v_0 = -4000$

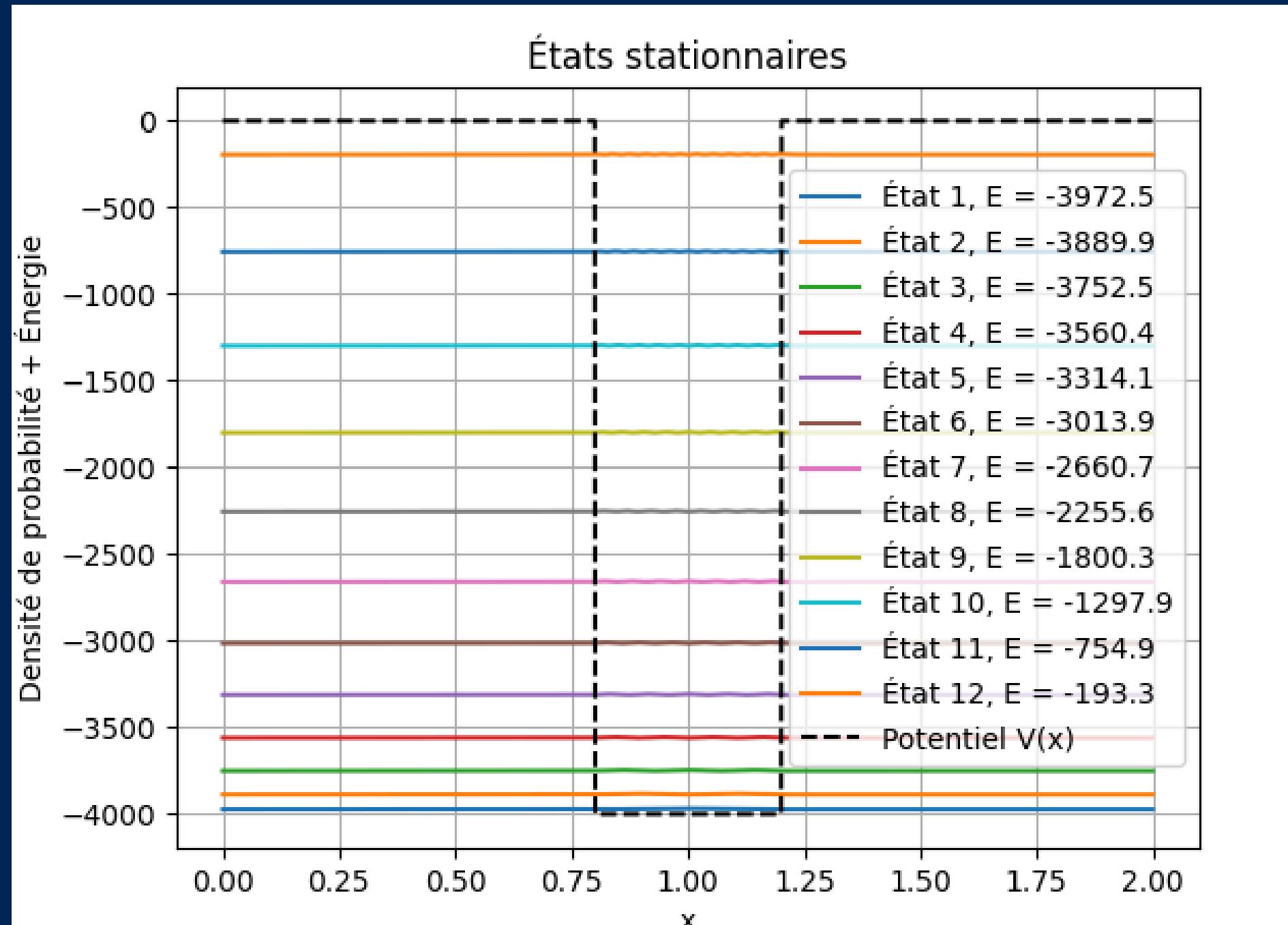
```
plt.figure()
for idx, (E_n, psi_n) in enumerate(etats_stationnaires):
    plt.plot(o, abs(psi_n**2) + E_n, label=f"État {idx+1}, E = {E_n:.1f}")
plt.plot(o, V, 'k--', label="Potentiel V(x)")
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("Densité de probabilité + Énergie")
plt.title("États stationnaires")
plt.legend()
plt.grid()
plt.show()
```

Résolution numérique – États stationnaires



- $a = 0.1$
- $v_0 = -6000$
- Plus V_0 est grand, plus il y a d'états stationnaires

Résolution numérique – États stationnaires



- $a = 0.4$
- $v_0 = -4000$
- Plus a est grand,
plus il y a d'états
stationnaires

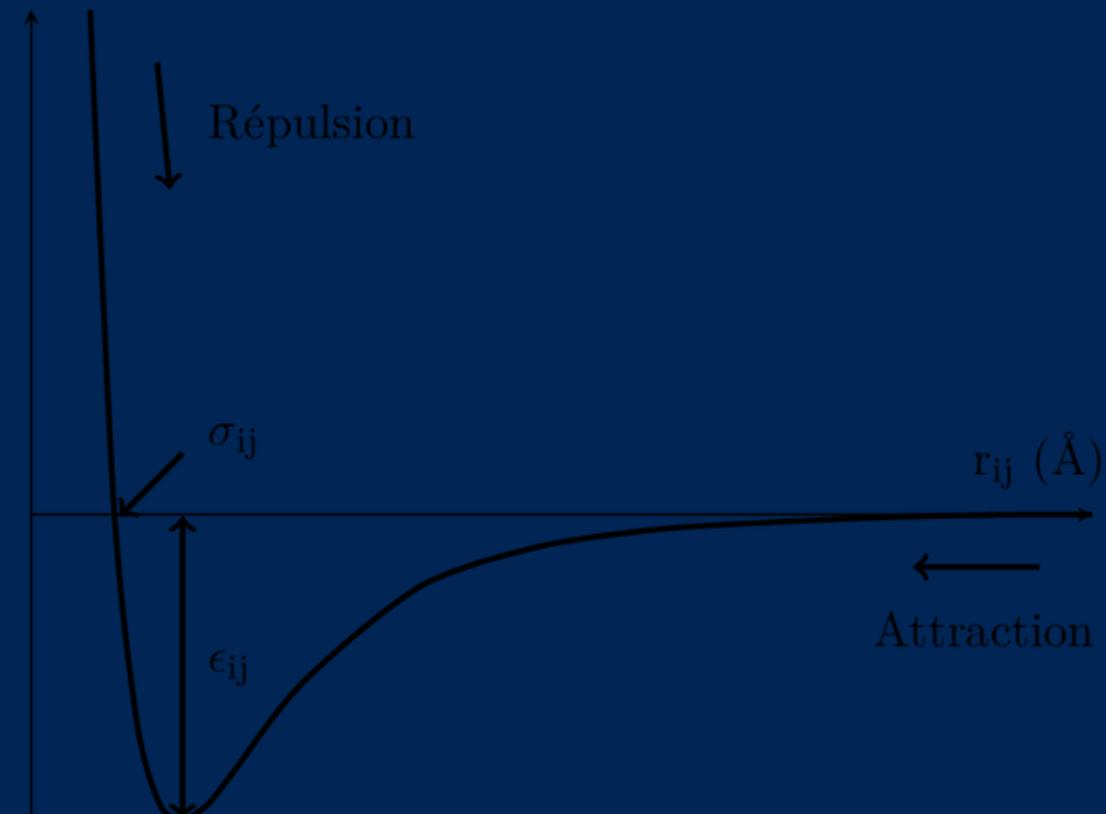
Comparaison des résultats

- Accord partiel avec l'expérience
- limitation du modèle
- Pistes d'amélioration

Potentiel Réaliste – Lennard-Jones

Potentiel attractif-répulsif :

$$V_{\text{LJ}}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$$



Puits rectangulaire fini	Potentiel de Lennard-Jones
Modèle simple et analytique	Modèle réaliste mais non analytique
Permet une Résolution exacte de Schrödinger	Nécessite une Résolution numérique
Approximatif, mais donne les bons ordres de grandeur	Meilleur accord avec l'expérience
Potentiel à valeur constante dans la région centrale	Potentiel continu , forme réaliste $\sim \frac{1}{r^{12}} - \frac{1}{r^6}$
Idéal pour comprendre les principes fondamentaux	Représente vraiment l'interaction entre atomes
Utile pour tester des phénomènes comme T(E) , effets de résonance	Reproduit des minima d'énergie réels et les positions d'équilibre

Détails des calculs et démonstrations des expressions (T , $E...$) : sur GITHUB

lien :

<https://github.com/hibamesbahi/projet-numrique-en-physique-moderne/blob/main/Résolution%20analytique.pdf>