

Projet numérique de physique moderne

Valérie Roux
Yanis Kassou
Gweltaz Collin

11 JUIN 2025

Sommaire

- 03 Introduction
- 05 Problématique
- 06 Résolution analytique
- 07 États stationnaires
- 09 Expériences plus récentes
- 10 Paquet d'ondes
- 12 Conclusion
- 13 Remerciements

Introduction

RAMSAUER & TOWNSEND

PIONNIERS DANS LE DOMAINE DES COLLISIONS D'ÉLECTRONS
ET DE PROTONS AVEC DES MOLÉCULES DE GAZ.



CARL RAMSAUER (1879-1955)



JOHN TOWNSEND (1898-1957)

Introduction

EFFET DE RAMSAUER-TOWNSEND

- Phénomène de mécanique quantique
 - Diffusion d'électrons lents par des gaz nobles (l'argon, le krypton)
 - Électrons de basse énergie (eV) traversent un gaz d'atomes nobles, chute anormale de la section efficace de certaines énergies
 - Contre-intuitif selon la physique classique
 - Phénomène dû à la nature ondulatoire
-

Problématique

Comment un modèle unidimensionnel de puits de potentiel à profondeur finie permet-il d'expliquer l'annulation de la section efficace de diffusion observée dans l'effet Ramsauer-Townsend ?

Résolution analytique

En 1921, Carl RAMSAUER et John S. TOWNSEND observèrent que la section efficace de diffusion d'un électron par un atome d'un gaz noble s'annulait pour certaines valeurs de l'énergie de l'électron. Autrement dit, pour certaines valeurs de l'énergie, la probabilité que l'électron soit dévié était nulle.

L'objectif final du projet est de parvenir à expliquer cet effet à l'aide d'un modèle à une dimension d'espace. Le potentiel au voisinage de la particule cible sera modélisé par un puits de potentiel de profondeur finie $-V_0$.

Montrons analytiquement ces résultats.

CY Tech

Projet numérique

Résolution analytique de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

Yanis KASSOU, Gweltaz COLLIN et Valérie ROUX

Juin 2025

1 Résolution analytique

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

Equation de Schrödinger indépendante du temps

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Psi = 0$$

1.1 Région 1 : $x < 0$ (Avant le puits)

Soit $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$$\Rightarrow \frac{d^2\Psi}{dx^2} + k_1^2\Psi = 0$$

Soit $\tilde{\Psi} = \tilde{\Psi}_0 e^{rx}$

$$\Rightarrow \tilde{\Psi}_0 e^{rx}(r^2 + k_1^2) = 0$$

or $\forall x \in \mathbb{R}, \tilde{\Psi}_0 e^{rx} \neq 0$

$$\Rightarrow r^2 + k_1^2 = 0$$

$$\Rightarrow r = \pm ik_1$$

Ainsi les deux solutions de l'Ansatz sont

$$\tilde{\Psi}_1(x) = e^{ik_1x}, \tilde{\Psi}_2(x) = e^{-ik_1x}$$

La solution générale est une combinaison linéaire entre $\tilde{\Psi}_1$ et $\tilde{\Psi}_2$

$$\tilde{\Psi}_1(x) = \tilde{A}_1 e^{ik_1 x} + \tilde{B}_1 e^{-ik_1 x}, k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow \Psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

1.2 Région 2 : $0 \leq x \leq a$

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

$$\text{Soit } k_2^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}$$

$$\tilde{\Psi}(x) = \tilde{\Psi}_0 e^{rx}$$

$$\Rightarrow \tilde{\Psi}_0 e^{rx} (r^2 + k_2^2) = 0$$

$$\forall x \in \mathbb{R}, \tilde{\Psi}_0 e^{rx} \neq 0$$

$$\Rightarrow r^2 + k_2^2 = 0$$

$$\Rightarrow r = \pm i k_2$$

Ainsi, les deux solutions sont :

$$\tilde{\Psi}_3(x) = e^{ik_2 x}, \tilde{\Psi}_4(x) = e^{-ik_2 x}$$

La solution générale est une combinaison linéaire

$$\tilde{\Psi}_{II}(x) = \tilde{A}_2 e^{ik_2 x} + \tilde{B}_2 e^{-ik_2 x}$$

$$\Rightarrow \Psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}$$

1.3 Région 3 : $x > a$

$$V(x) = 0 \Rightarrow \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + k_1^2 \Psi = 0$$

$$\tilde{\Psi}(x) = \tilde{\Psi}_0 e^{rx}$$

$$\Rightarrow \tilde{\Psi}_0 e^{rx} (r^2 + k_1^2) = 0$$

$$\forall x \in \mathbb{R}, \tilde{\Psi}_0 e^{rx} \neq 0$$

$$\Rightarrow r^2 + k_1^2 = 0$$

$$\Rightarrow r = \pm ik_1$$

$$\tilde{\Psi}_5(x) = e^{ik_1x}, \tilde{\Psi}_6(x) = e^{-ik_1x}$$

Or il n'y a pas d'ondes incidentes venant de $+\infty$. On a :

$$\Rightarrow \tilde{\Psi}_{III}(x) = \tilde{A}_3 e^{ik_1x}$$

$$\Rightarrow \Psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1x}$$

2 Conditions de continuité

$$\Psi_I(x \rightarrow 0) = \Psi_{II}(x \rightarrow 0)$$

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$\left. \frac{\partial \Psi_I}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial \Psi_{II}}{\partial x} \right|_{x=0}$$

$$k_1 A_1 - k_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2$$

$$\Psi_{II}(x \rightarrow a) = \Psi_{III}(x \rightarrow a)$$

$$A_2 e^{ik_2a} + B_2 e^{-ik_2a} = A_3 e^{ik_1a}$$

$$\left. \frac{\partial \Psi_{II}}{\partial x} \right|_{x=a} = \left. \frac{\partial \Psi_{III}}{\partial x} \right|_{x=a}$$

$$ik_2(A_2 e^{ik_2a} - B_2 e^{-ik_2a}) = ik_1 A_3 e^{ik_1a}$$

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 & (1) \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2 & (2) \\ A_2 e^{ik_2a} + B_2 e^{-ik_2a} = A_3 e^{ik_1a} & (3) \\ k_2 A_2 e^{ik_2a} - B_2 e^{-ik_2a} = k_1 A_3 e^{ik_1a} & (4) \end{cases}$$

Le but est de trouver les amplitudes :

$$\frac{A_2}{A_1}, \frac{B_2}{A_2}, \frac{A_3}{A_2}, \frac{B_2}{A_2}$$

Dans le cadre de l'effet Ramsauer-Townsend on observe que l'électron traverse l'atome sans être dévié pour certaines énergies. Cela signifie qu'il n'y a pas d'onde réfléchie. Ainsi,

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = 0$$

$$\Rightarrow |B_1|^2 = 0 \Rightarrow B_1 = 0$$

Donc :

$$\begin{cases} A_1 = A_2 + B_2 & (1) \\ k_1 A_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2 & (2) \quad L_2 \leftarrow \frac{1}{k_2} L_2 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} A_1 = A_2 + B_2 \\ \frac{k_1}{k_2} A_1 = A_2 - B_2 \quad L_2 \leftarrow L_2 + L_1 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} B_2 = A_1 - A_2 \\ 2A_2 = A_1(1 + \frac{k_1}{k_2}) \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} B_2 = A_1 - A_2 \\ A_2 = \frac{1}{2} A_1 (1 + \frac{k_1}{k_2}) \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} B_2 = -\frac{1}{2} A_1 \left[1 - 2 + \frac{k_1}{k_2} \right] = \frac{1}{2} A_1 \left(1 - \frac{k_1}{k_2} \right) \\ A_2 = \frac{1}{2} A_1 \left(1 + \frac{k_1}{k_2} \right) \end{cases}$$

$$\begin{aligned} A_3 e^{ik_1 a} &= \frac{1}{2} A_1 \left(1 + \frac{k_1}{k_2} \right) e^{ik_2 a} + \frac{1}{2} A_1 \left(1 - \frac{k_1}{k_2} \right) e^{-ik_2 a} \\ A_3 &= \frac{1}{2} A_1 \frac{\left[\left(1 + \frac{k_1}{k_2} \right) e^{ik_2 a} + \left(1 - \frac{k_1}{k_2} \right) e^{-ik_2 a} \right]}{e^{ik_1 a}} \end{aligned}$$

$$\text{ou } T=1 \Rightarrow \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = 1$$

$$\begin{aligned} \frac{A_3}{A_1} &= \frac{1}{e^{ik_1 a}} \left[\frac{e^{ik_2 a} + e^{-ik_2 a}}{2} + \frac{k_1}{k_2} \left(\frac{e^{ik_2 a} - e^{-ik_2 a}}{2} \right) \right] \\ &= \frac{1}{e^{ik_1 a}} \left[\cos(k_2 a) + \frac{k_1}{k_2} i \sin(k_2 a) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 &= \frac{\left| \cos(k_2 a) + \frac{k_1}{k_2} i \sin(k_2 a) \right|^2}{|e^{ik_1 a}|^2} \\ &= \cos^2(k_2 a) + \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sin^2(k_2 a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{car } |e^{ik_1 a}|^2 &= |\cos(k_1 a) + i \sin(k_1 a)|^2 \\ &= \cos^2(k_1 a) + \sin^2(k_1 a) = 1 \end{aligned}$$

$$\left(\frac{k_1}{k_2} \right)^2 = \frac{2mE/\hbar^2}{2m(E+V_0)/\hbar^2} = \frac{2mE}{2m(E+V_0)} = 1 + \frac{2mE}{2mV_0} = 1 + \frac{E}{V_0} \text{ si } V_0 \neq 0$$

$$\left(\frac{k_1}{k_2} \right)^2 = 1 \text{ si } V_0 = 0 \Rightarrow A_1 = A_2 = A_3$$

Il s'agit de la solution d'onde plane progressive

On sait que $1 - \sin^2(k_2a) = \cos^2(k_2a)$

$$\Rightarrow \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = 1 - \sin^2(k_2a) + \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sin^2(k_2a) = 1$$

$$\Rightarrow \left[\left(\frac{k_1}{k_2} \right)^2 - 1 \right] \sin(k_2a) = 0$$

$$\left(\frac{k_1}{k_2} \right)^2 - 1 = 0 \Rightarrow k_1^2 = k_2^2$$

$$\Rightarrow \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \Rightarrow V_0 = 0$$

Sans potentiel, il n'y a rien à diffuser. L'onde incidente continue sans jamais être perturbée. La section efficace est donc nulle partout.

$$\sin(k_2a) = 0$$

$$\Rightarrow k_2a = n\pi \text{ avec } n \in \mathbb{N}^*$$

$$\Rightarrow k_2 = \frac{n\pi}{a} = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow 2m(E + V_0) = \left(\frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2$$

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

Ainsi, il s'agit de l'énergie pour laquelle l'électron peut traverser le puits sans être réfléchi.

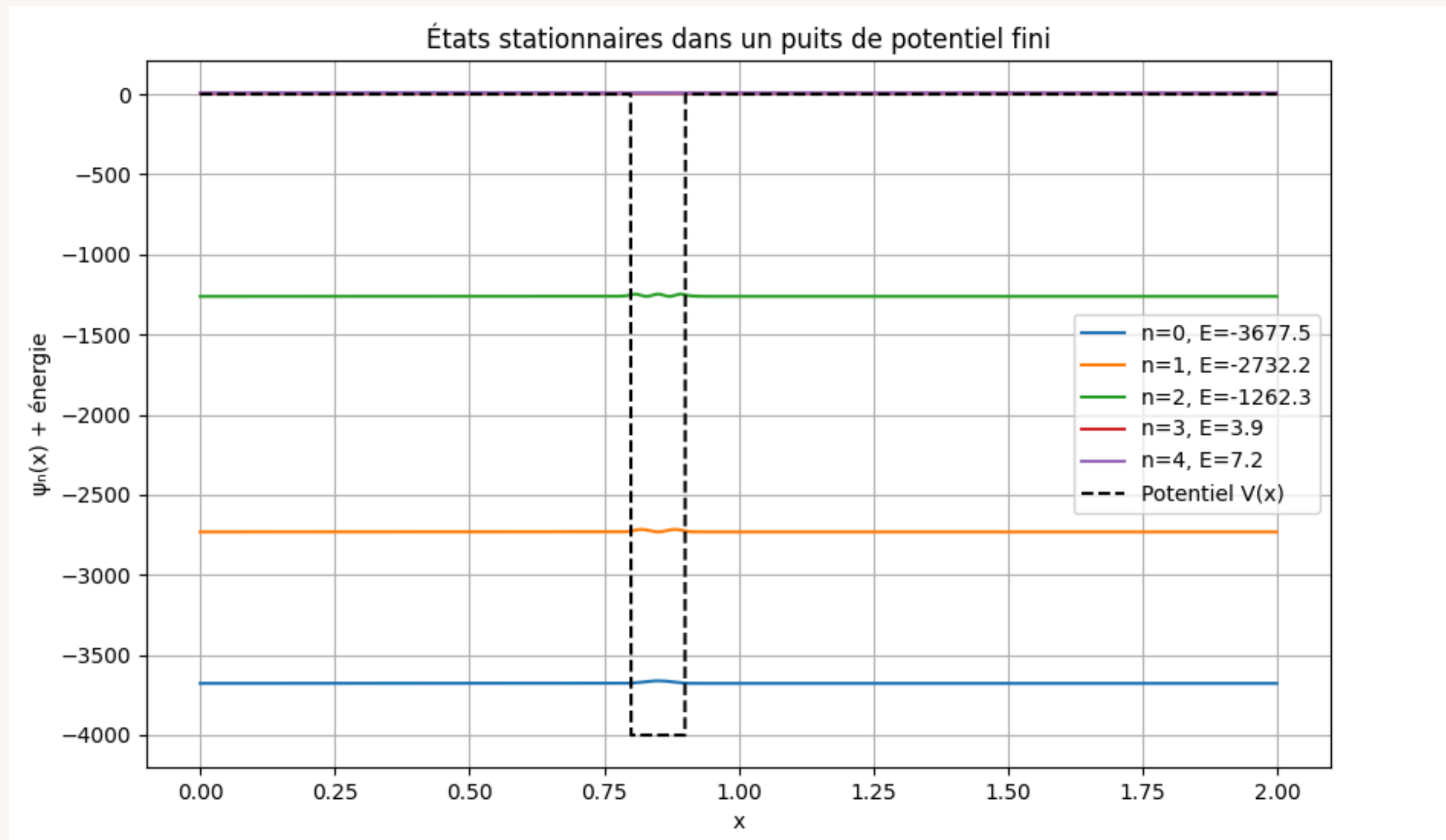
$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x} \\ \psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x} \\ \psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1x} \end{cases}$$

Si le puits commence pas en 0 mais en b
alors $X = x - b$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A_1 e^{ik_1(x-b)} + B_1 e^{-ik_1(x-b)} \\ \psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2(x-b)} + B_2 e^{-ik_2(x-b)} \\ \psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1(x-b)} \end{cases}$$

États stationnaires

Nous avons créé un code "résolution_état_stationnaire.py" qui "trouve" les états stationnaires d'une onde



États stationnaires

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.linalg import eigh_tridiagonal

dx = 0.001
nx = int(1 / dx) * 2 # Nombre de point spatiaux
x = np.linspace(0, (nx - 1) * dx, nx) # Vecteur des positions x de taille nx
v0 = -4000 # valeur du potentiel
V = np.zeros(nx)
V[(x >= 0.8) & (x <= 0.9)] = v0 # définition du potentiel pour x appartenant à [0.8, 0.9]

# construction de l'hamiltoniens
diag_principale = 1 / dx**2 + V # Diagonale principale ("V(n)" + 1/dx**2)
hors_diag = -0.5 / dx**2 * np.ones(nx - 1) # Terme (-1/2dx**2) hors de la diagonale correspond au psi(i+-1)

# Résolution du problème H*psi = E*psi
vp_Energie, vectp_onda = eigh_tridiagonal(diag_principale, hors_diag) # fonction qui renvoie les valeurs propre et vecteur propre importé par scipy

# création des 3 premiers états propres
plt.figure(figsize=(10, 6))
for n in range(5):
    psi_n = vectp_onda[:, n]
    psi_n /= np.sqrt(np.sum(psi_n**2) * dx) # Normalisation
    plt.plot(x, psi_n**2 + vp_Energie[n], label=f"n={n}, E={vp_Energie[n]:.1f}") # affichage des fonction avec des décalage pour ne pas les superposer

# affichage
plt.plot(x, V, 'k--', label='Potentiel V(x)')
plt.title("États stationnaires dans un puits rectangulaire")
plt.xlabel("x")
plt.ylabel(" $\Psi_n(x) + \text{énergie}$ ")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

CY Tech

Projet numérique

Justification de l'algorithme

Yanis KASSOU, Gweltaz COLLIN et Valérie ROUX

Juin 2025

On cherche une solution particulière de :

$$\psi(x, t) = \phi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

En injectant dans l'équation de Schrödinger :

$$\begin{aligned}i\hbar \left(-\frac{iE}{\hbar}\right) \phi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} &= H\phi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \\ \Rightarrow E\phi(x) &= H\phi(x) \\ \Rightarrow E\phi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + V(x)\phi(x)\end{aligned}$$

$\phi(x)$ est vecteur propre donc un état propre de l'énergie, et E est valeur propre (l'énergie associée).

H opérateur ou matrice

On pose le développement de Taylor autour de x_i :

$$\phi(x_i + dx) = \phi(x_i) + dx \phi'(x_i) + \frac{dx^2}{2} \phi''(x_i)$$

$$\phi(x_i - dx) = \phi(x_i) - dx \phi'(x_i) + \frac{dx^2}{2} \phi''(x_i)$$

Somme des deux :

$$\phi(x_i + dx) + \phi(x_i - dx) = 2\phi(x_i) + dx^2 \phi''(x_i)$$

$$\phi''(x_i) = \frac{\phi(x_i + dx) - 2\phi(x_i) + \phi(x_i - dx)}{dx^2}$$

On approxime $\frac{d^2\phi}{dx^2}$ par $\frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{dx^2}$

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

On obtient :

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

$$\Rightarrow -E\phi(x_i) = -\frac{\hbar^2}{2mdx^2}\phi(x_{i+1}) + \left(\frac{\hbar^2}{mdx^2} + V_i\right)\phi(x_i) - \frac{\hbar^2}{2mdx^2}\phi(x_{i-1})$$

Matrice diagonale principale

$$H_{ii} = \frac{\hbar^2}{mdx^2} + V(x_i)$$

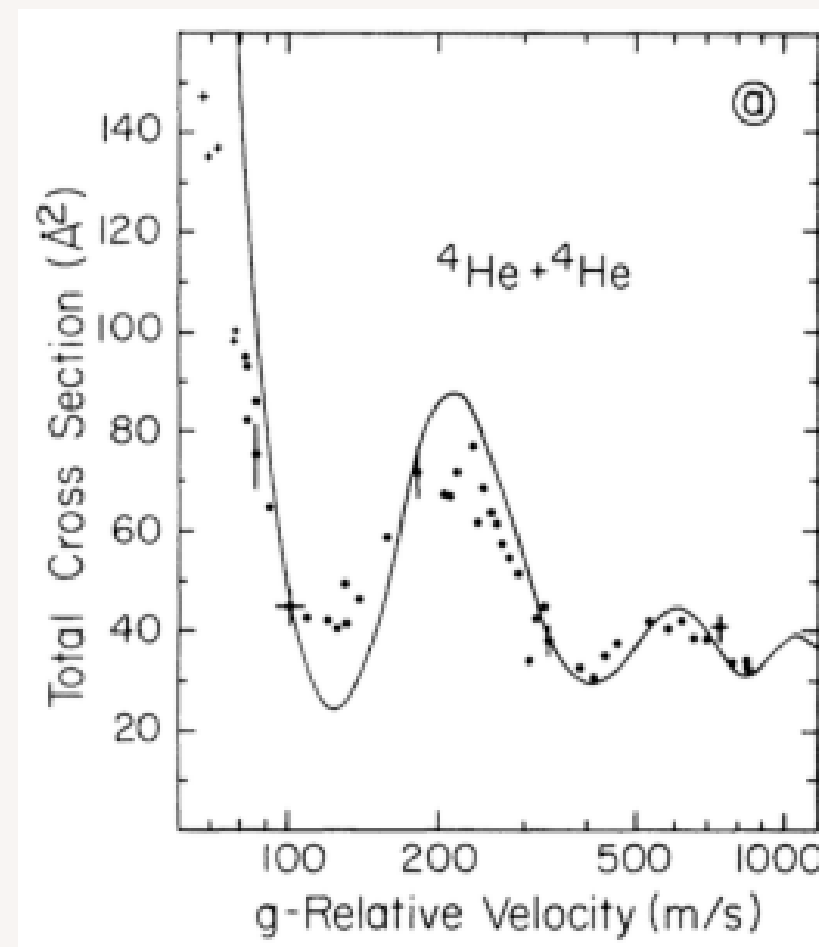
Matrice diagonale inférieure et supérieure

$$H_{i,i\pm 1} = -\frac{\hbar^2}{2mdx^2}$$

Remarque : dans le code Python, on a mis \hbar et m égal à 1 pour simplifier.

Expériences plus récentes

Des expériences similaires [G76] ont été reprises dans les années 1970 en mesurant la section efficace de diffusion d'un atome d'hélium 4 avec un autre. La figure ci-dessous présente un des résultats où l'on observe bien que la section efficace passe par un premier minimum lorsque la vitesse relative des deux atomes augmente. Pour des vitesses relatives supérieures à $200 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, les variations de section efficace ne sont pas une manifestation de l'effet Ramsauer–Townsend.



- On observe bien une énorme baisse de la taille de la section efficace pour une vitesse $\sim 130 \text{ (m/s)}$, cependant celle-ci ne s'annule pas. Cela reflète un phénomène d'interférence destructrice entre les parties de l'onde diffusée. Ici la vitesse au carrée est équivalent à l'énergie cinétique (car $E \propto v^2$). Ainsi quand la vitesse augmente l'énergie augmente.

CY Tech

Projet numérique

Étude analytique du paquet d'onde

Yanis KASSOU, Gweltaz COLLIN et Valérie ROUX

Juin 2025

1 Méthode stationnaire (Onde plane)

$\Psi(x) = \Psi_0 e^{i\vec{k}x}$ avec \vec{k} : vecteur d'onde

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

Dans cette approche, la particule est modélisée par une onde plane infinie, ce qui revient à la considérer comme délocalisée dans l'espace. Elle possède une énergie unique, comme démontrée précédemment par résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour déterminer le coefficient de transmission, l'énergie...

Ainsi, il s'agit donc d'une description statique sans notion du temps.

Cette méthode ne décrit ni le mouvement ni l'évolution temporelle de la particule.

2 Méthode dynamique - Paquet d'ondes gaussien

$$\Psi(x, t) = \int A(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad \text{avec} \quad \omega(k) = \frac{1}{2m} \hbar k^2$$

La particule est représentée par un paquet d'ondes localisé, c'est à dire une superposition d'ondes planes proche de k_0 . Elle a donc une énergie moyenne, mais pas parfaitement définie (ondes stationnaires).

Cette méthode permet de suivre l'évolution du paquet dans le temps notamment lorsqu'il rencontre un potentiel. Après l'interaction, le paquet se divise en une partie transmise et une partie réfléchie.

Cette approche est plus réaliste, car elle décrit une particule en mouvement et permet d'observer des effets comme les interférences.

Paquet d'ondes

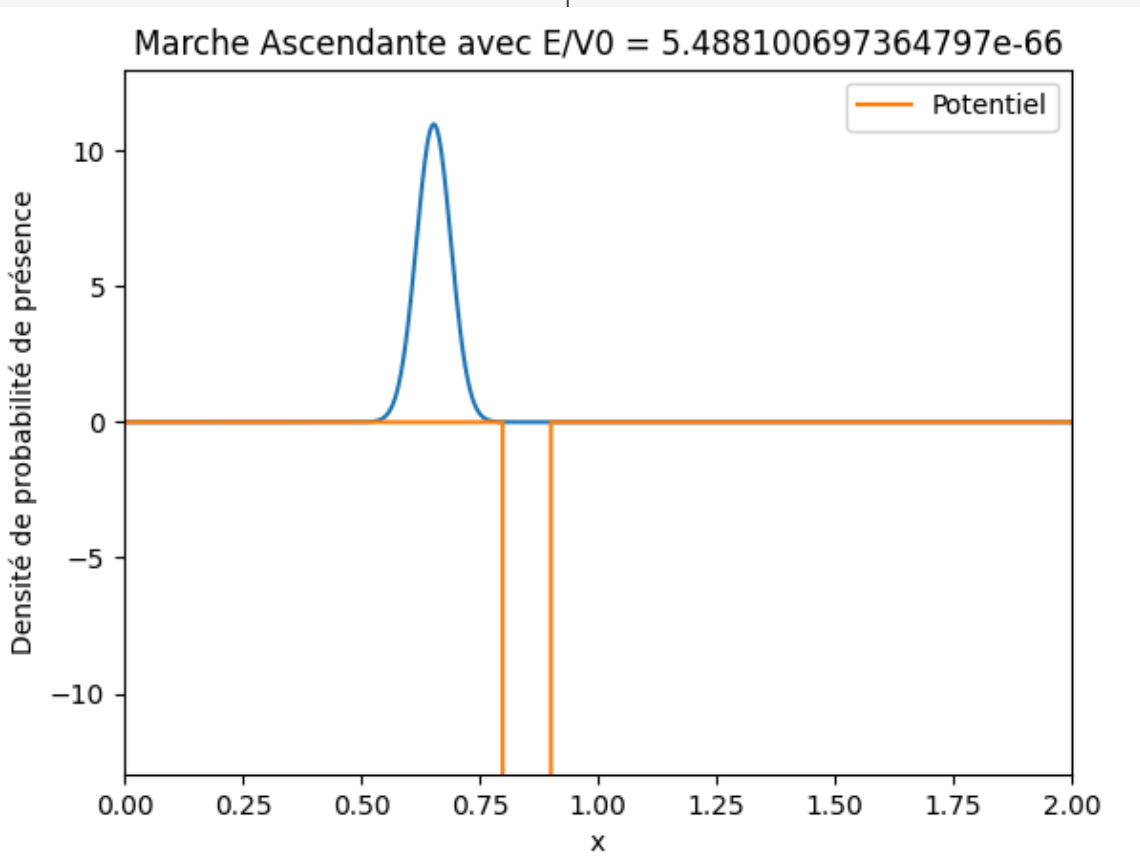
Étudier l'onde plane seule n'est pas rigoureux, car elle ne permet pas suivre son évolution dans le temps. Une description en termes de paquet d'ondes est donc plus réaliste et plus adaptée.

Pour cela nous allons utiliser un code mis à notre disposition qui simule le passage d'un paquet d'onde au dessus d'un puits de potentiel.
Nous avons rentré l'énergie trouvée lors de la résolution analytique avec $n = 1$, $m = 1$

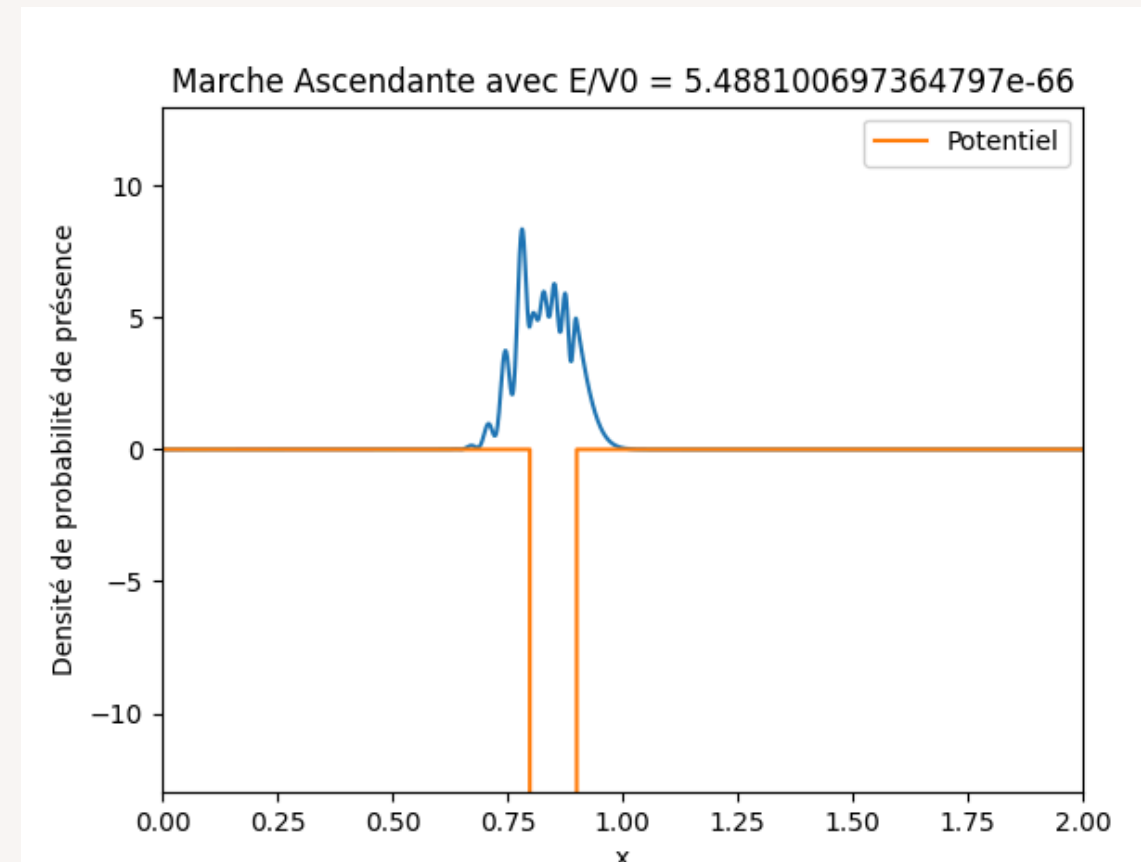
```
e = (1/2)*(pow((np.pi*h_bar)/0.1, 2))
E = e - v0 #energie
```

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

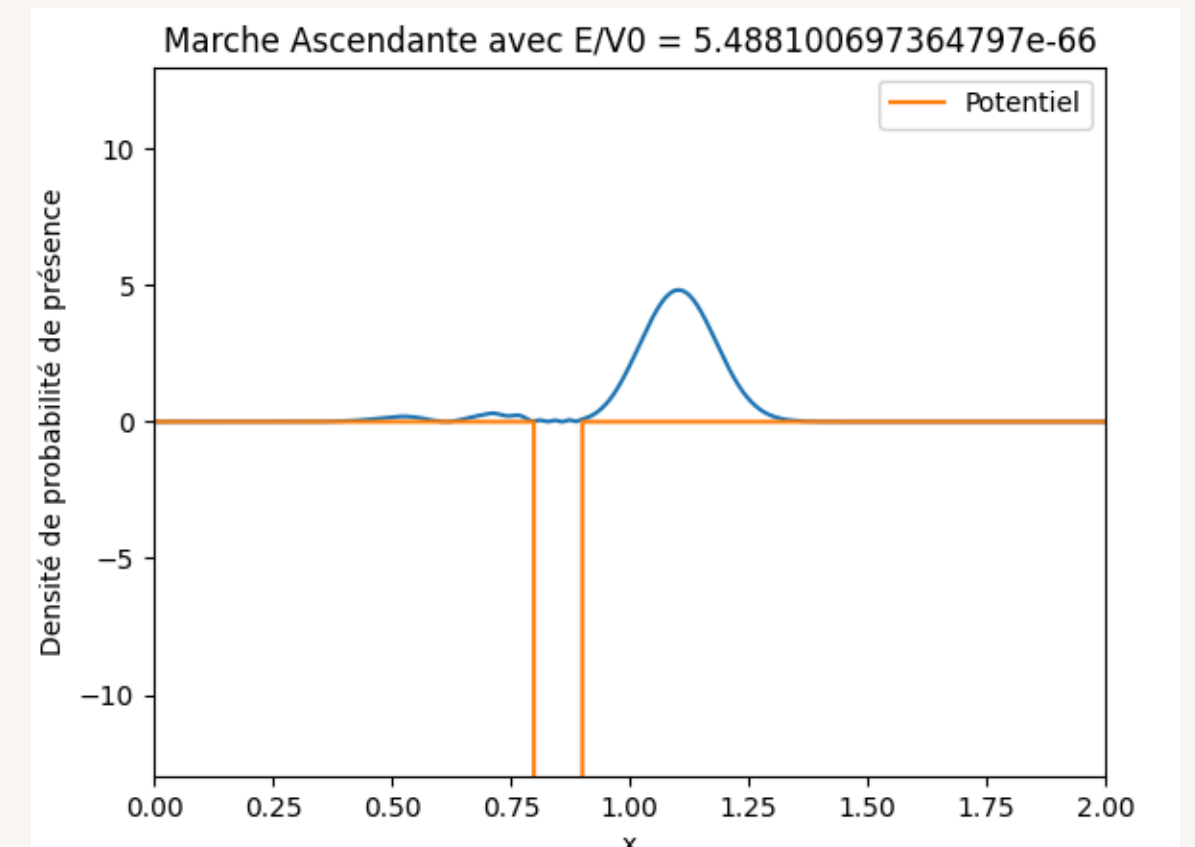
Paquet d'ondes



T1



T2



T3

On observe au T3 qu'une partie du paquet d'ondes est réfléchi alors que l'on a une énergie qui supposément transmet intégralement l'onde. Ce résultat correspond à ce qui a été observé pendant les expériences de 1970

Conclusion

A travers un modèle simple en une dimension basé sur un puits de potentiel, nous avons pu comprendre comment à certaines énergies l'électron peut traverser l'atome avec quasiment aucune déviation, grâce à des interférences destructrices caractéristiques de l'effet Ramsauer-Townsend.

Merci !

PROJET NUMÉRIQUE
