

TD 2 - ÉTATS DE DIFFUSION : EFFET RAMSAUER-TOWNSEND –
CORRIGÉ –

L'effet Ramsauer a été observé pour la première fois il y a environ 100 ans, en 1921, dans l'étude de collisions d'électrons sur des atomes de gaz rares (helium, argon ou néon). Un faisceau d'électrons est créé dans une cellule en verre contenant un gaz rare. Pour certaines valeurs de leur énergie cinétique, les électrons traversent le gaz sans être affectés par sa présence.

1 Modèle

Pour expliquer ce phénomène, nous allons utiliser le modèle unidimensionnel suivant : les électrons de masse m et d'énergie $E > 0$ sont modélisés par une solution stationnaire de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de la Figure 1. Le faisceau d'électrons se déplace vers la droite dans le sens des x croissants. L'atome de gaz rare est modélisé par un puits de potentiel attractif de largeur $2a$ et de profondeur $V_0 > 0$, centré en $x = 0$.

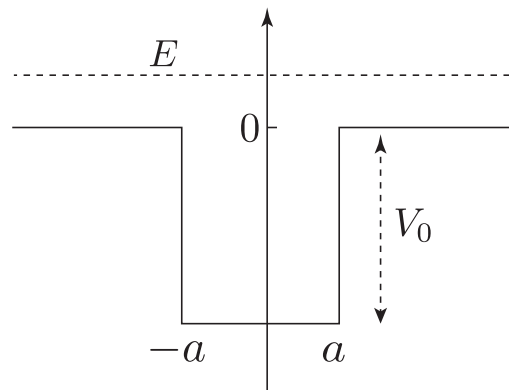


FIGURE 1 – Energie potentielle d'un électron incident sur un atome de gaz rare.

La partie spatiale des solutions est

$$\begin{aligned}\varphi(x) &= e^{ikx} + Ae^{-ikx} & \text{si } x \leq -a \text{ (région I)} \\ \varphi(x) &= Be^{iqx} + Ce^{-iqx} & \text{si } -a < x < a \text{ (région II)} \\ \varphi(x) &= De^{ikx} & \text{si } x \geq a \text{ (région III)},\end{aligned}$$

où A, B, C, D sont des nombres complexes.

1. Justifier la solution donnée pour chaque région de l'espace en précisant le sens de propagation des électrons.

Solution: Dans les régions I et III, les électrons ne sont pas soumis à une énergie potentielle. La partie spatiale de la fonction d'onde est solution de l'équation différentielle

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0 \quad \text{équation de la forme} \quad \frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + k^2 \varphi(x) = 0$$

Dans la région II, les électrons ressentent une énergie potentielle qui vaut $-V_0$. La partie spatiale de la fonction vérifie alors

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \varphi(x) = 0 \quad \text{équation de la forme} \quad \frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + q^2 \varphi(x) = 0$$

Les solutions des deux équations ci-dessus sont bien sinusoïdales.

Dans la région I, $\varphi(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx}$ est composée d'une partie représentant les électrons incidents e^{ikx} se déplaçant dans le sens des x croissants et d'une partie représentant les électrons réfléchis Ae^{-ikx} se déplaçant dans le sens des x décroissants. C'est la même chose pour la région II, Be^{iqx} pour les x croissants et Ce^{-iqx} pour les x décroissants. Dans la région III, seuls des électrons De^{ikx} se déplaçant dans le sens des x croissants peuvent être présents.

2. Donner les expressions de k et q en fonction de l'énergie totale E de l'électron, de sa masse m et de V_0 .

Solution:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

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

2 Courant de probabilité

On va maintenant considérer ce problème sous l'angle du formalisme du courant de probabilité.

3. Donner la fonction d'onde complète $\psi(x, t)$ (dépendances spatiale et temporelle).

Solution:

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

avec $\varphi(x)$ qui dépend de la région considérée.

4. Rappeler l'expression de la densité de probabilité de présence $\rho(x, t)$ en fonction de $\psi(x, t)$.

Solution:

$$\rho(x, t) = \psi^*(x, t)\psi(x, t) = |\psi(x, t)|^2$$

5. En utilisant l'équation de Schrödinger, montrer que pour un problème tri-dimensionnel $\rho(\vec{r}, t)$ s'écrit

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*)$$

Solution: L'évolution temporelle de $\rho(\vec{r}, t)$ est

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} (\psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)) = \left[\frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t) + \psi^*(\vec{r}, t) \left[\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \right]$$

L'équation de Schrödinger s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t). \quad (1)$$

L'équation complexe conjuguée s'écrit alors

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^*(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi^*(\vec{r}, t). \quad (2)$$

En multipliant l'Eq. 1 par $\psi^*(\vec{r}, t)$ et l'Eq. 2 par $\psi(\vec{r}, t)$ puis en soustrayant membre à membre les deux équations ainsi obtenues, on arrive à

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)) = -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi^*(\vec{r}, t) \Delta \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \Delta \psi^*(\vec{r}, t)],$$

soit

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar}{2im} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*)$$

La densité de courant de probabilité \vec{J} est définie par l'équation de continuité

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \text{div } \vec{J} = 0,$$

aussi appelée équation de conservation de la probabilité. On peut faire l'analogie avec une densité de courant électrique, ou une densité de courant de particules, ou n'importe quelle autre densité de courant.

6. À l'aide de la question précédente, montrer que

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*).$$

Solution: On part du résultat de la question précédente, où l'on a introduit le courant de probabilité grâce à la formule

$$\text{div } \vec{J} = \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*).$$

Or on a $\vec{\nabla} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right) = \vec{\nabla} \psi^* \cdot \vec{\nabla} \psi + \psi^* \vec{\nabla}^2 \psi - \vec{\nabla} \psi \cdot \vec{\nabla} \psi^* - \psi \vec{\nabla}^2 \psi^* = (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*)$
 On a donc $\vec{J} = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right)$.

7. Montrer que $\vec{J}(\vec{r}, t) = \text{Re} \left[\psi^* \frac{\hat{p}}{m} \psi \right]$, où \hat{p} est l'opérateur impulsion.

Solution: $\vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right) = \frac{1}{2m} \left(\psi^* \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi + \psi \frac{\hbar}{-i} \vec{\nabla} \psi^* \right)$.
 $\vec{J}(\vec{r}, t)$ est la somme d'un complexe avec son complexe conjugué. On a donc

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{1}{m} \text{Re} \left[\psi^* \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi \right]$$

3 Effet Ramsauer

8. En utilisant le résultat de la question précédente, calculer le courant de probabilité incident \vec{J}_{inc} et le courant de probabilité réfléchi dans la région I. En déduire le coefficient de réflexion R donné par $\frac{\|\vec{J}_{ref}\|}{\|\vec{J}_{inc}\|}$.

Solution: Dans la région I, $\varphi^{inc}(x) = e^{ikx}$ et $\varphi^{ref}(x) = Ae^{-ikx}$.

$$J_x^{inc} = \frac{1}{m} \text{Re} \left[e^{-ikx} \frac{\hbar}{i} (ik) e^{ikx} \right] = \frac{\hbar k}{m}.$$

J_x^{inc} a la dimension d'une vitesse et est positif, donc J_x^{inc} représente les particules qui se déplacent vers les x croissants.

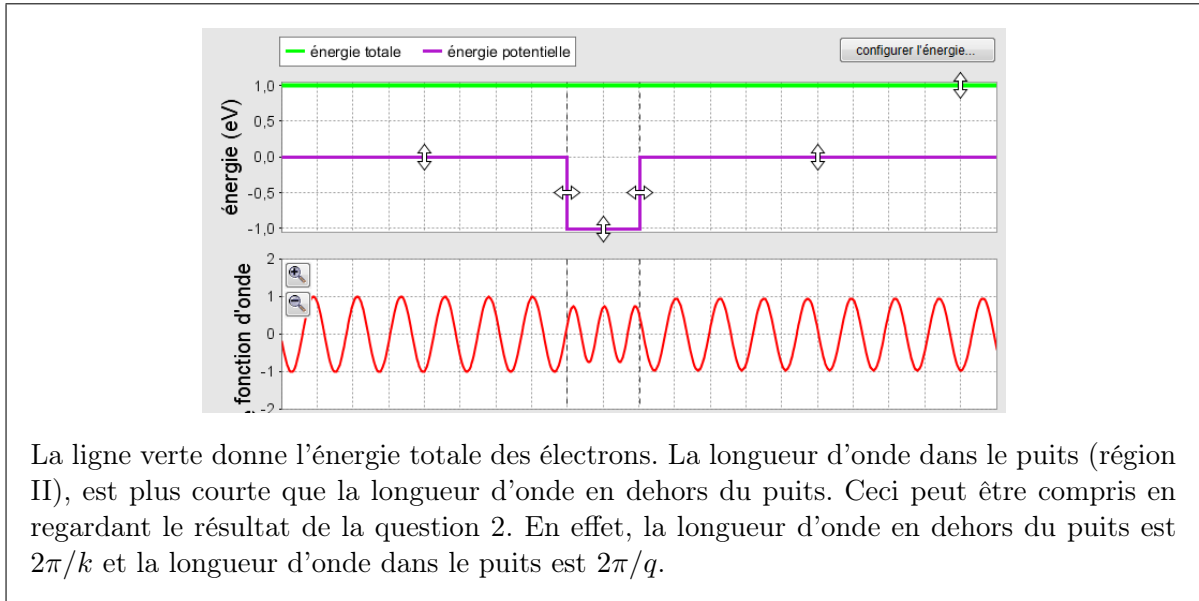
$$J_x^{ref} = \frac{1}{m} \text{Re} \left[A^* e^{ikx} \frac{\hbar}{i} (-ik) A e^{-ikx} \right] = -\frac{\hbar k}{m} |A|^2.$$

J_x^{ref} est négatif, donc il représente les particules qui se déplacent vers les x décroissants.

Finalement, $R = |A|^2$.

9. En se plaçant à l'instant $t = 0$ représenter de façon schématique la partie réelle de la fonction d'onde dans chacune des trois régions de l'espace.

Solution:



10. Quel système d'équations permet de relier les coefficient A, B, C, D ? (On ne demande pas ici de le résoudre.)

Solution: Il faut écrire les conditions de continuité de la fonction d'onde en $x = -a$ et $x = a$.

En $x = -a$,

$$e^{-ika} + A e^{ika} = B e^{-iqa} + C e^{iqa}$$

$$ik(e^{-ika} - A e^{ika}) = iq(B e^{-iqa} - C e^{iqa})$$

En $x = a$,

$$B e^{iqa} + C e^{-iqa} = D e^{ika}$$

$$iq(B e^{iqa} - C e^{-iqa}) = ik D e^{ika}$$

11. Le coefficient A est donné par

$$A = \frac{k^2 - q^2}{\Delta} e^{-2ika} (1 - e^{4iqa}),$$

avec $\Delta = (q + k)^2 - e^{4iqa}(q - k)^2$. Donner l'expression du coefficient de réflexion R et de transmission T (sans chercher à expliciter $|\Delta|^2$.)

Solution:

$$A = \frac{k^2 - q^2}{\Delta} e^{-2ika} e^{2iqa} (e^{-2iqa} - e^{2iqa}) = \frac{k^2 - q^2}{\Delta} e^{-2ika} e^{2iqa} (-2i) \sin(2qa).$$

Comme $R = |A|^2$, on a directement

$$R = 4 \frac{(k^2 - q^2)^2}{|\Delta|^2} \sin^2(2qa),$$

et

$$T = 1 - R = 1 - 4 \frac{(k^2 - q^2)^2}{|\Delta|^2} \sin^2(2qa).$$

12. Donner la condition sur q qui permet d'observer l'effet Ramsauer (qui assure une transmission totale). En déduire une condition sur l'énergie de l'électron incident.

Solution: La transmission est totale quand $T = 1$ c'est à dire quand $R = 0$. Ceci entraîne une condition sur q .

$$\sin(2qa) = 0 \quad \text{si} \quad q = n \frac{\pi}{2a} \quad \text{avec } n > 0 \text{ un entier}$$

Comme q est relié à l'énergie totale (question 2) par la relation

$$q^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2},$$

on a

$$E = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} - V_0.$$

Ce résultat est différent du cas classique où la transmission est totale quelle que soit l'énergie cinétique des électrons incidents. Ici la transmission ne vaut 1 que pour un ensemble discret de valeurs de l'énergie cinétique, et est inférieure à 1 pour les autres.

On observe que la condition sur l'énergie fait intervenir les énergies propres d'un puits carré infini.

13. Interpréter le résultat de la question précédente.

Solution: La résonance a lieu lorsque l'énergie de l'électron incident est égale à l'énergie d'un niveau du puits infini de même largeur $2a$. En effet, dans un puits infini les énergies propres s'écrivent $E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$. La condition $q = n \frac{\pi}{2a}$ est exactement celle vérifiée dans un puits infini (la largeur du puits, $2a$, est égale à un nombre entier de fois la demi-longueur d'onde de de Broglie dans le puits). Mais ici, notez que comme $E > 0$, en réalité n ne peut prendre que des valeurs supérieures à $\sqrt{8ma^2 V_0 / \pi^2 \hbar^2}$. Le premier n qui mène à une résonance est celui qui correspond au premier état du puits infini qui est d'énergie positive (à l'intérieur d'un puits de profondeur fini, il y a une nombre fini de niveaux d'énergie).

Autre remarque, on peut faire une analogie avec la transmission d'une onde électromagnétique à travers un interféromètre de Fabry-Pérot : la transmission est totale quand l'épaisseur

du Fabry-Pérot est égale à un nombre entier de fois la demi-longueur d'onde de l'onde dans le Fabry-Pérot.

14. Expliquer comment procéder expérimentalement pour déterminer V_0 .

Solution: Pour obtenir V_0 , il faut faire varier l'énergie des électrons incidents et relever un certain nombre d'énergies résonantes. On trace ensuite la courbe donnant l'énergie en fonction de son ordre d'apparition, puis on ajuste la courbe par une parabole du type $y = \alpha x^2 + \beta$. On en déduit $\beta = -V_0$.