La diffusion des électrons et la répartition des flux

J. Winter

► To cite this version:

J. Winter. La diffusion des électrons et la répartition des flux. J. Phys. Radium, 1933, 4 (6), pp.316-323. 10.1051/jphysrad:0193300406031600 . jpa-00233155

HAL Id: jpa-00233155

<https://hal.science/jpa-00233155>

Submitted on 1 Jan 1933

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

LA DIFFUSION DES ÉLECTRONS ET LA RÉPARTITION DES FLUX

Par J. WINTER.

Sommaire. — Dans le problème de la diffusion des électrons, on étudie la répartition angulaire des flux et on discute la validité des expressions asymptotiques employées.

But du problème. — Les *faits expérimentaux* qu'il s'agit d'interpréter sont les phénomènes de diffusion de jets électroniques par les gaz et, notamment, l'effet Ramsauer, qui a été ainsi mis en évidence : on a constaté des minima de diffusion, lorsque la vitesse des électrons incidents varie.

Ici, nous nous plaçons à un point de vue purement mathématique, et reprenons une question, que les études déjà faites ⁽¹⁾ ne traitaient pas rigoureusement : la répartition angulaire des flux diffusés.

Position du problème. — L'idée de base est due à M. Sommerfeld. Elle consiste à déterminer la perturbation introduite par un corps diffuseur dans la propagation d'une onde plane, en se donnant a priori la forme de l'expression de l'onde perturbée à l'infini : si le potentiel perturbateur, qui représente l'influence de l'atome diffuseur, a la symétrie sphérique, on peut admettre qu'à l'infini, l'onde perturbée comprendra :

1° L'onde plane primitive ;

2° Une onde sphérique divergente, introduite par le corps perturbateur.

Il ne semble pas qu'on puisse considérer cette manière d'énoncer les conditions aux limites comme absolument rigoureuse. Quoi qu'il en soit, cette idée a été féconde : cette condition, jointe aux conditions, habituelles en mécanique ondulatoire, de régularité de la fonction d'onde, a permis de résoudre parfaitement le problème.

Hypothèses de MM. Allis et Morse. — L'onde plane incidente de de Broglie se propage dans la direction ox (fig. 1). Autour du centre O , règne un potentiel perturbateur, de symétrie sphérique, renfermé dans une sphère S_0 de rayon r_0 . Afin d'introduire, d'une manière commode, la condition à l'infini de M. Sommerfeld, on décomposera l'onde plane en fonctions sphériques par la formule connue de Lord Rayleigh.

$$e^{-iKr \cos \theta} = \sum_n (-i)^n \sqrt{\frac{\pi}{2Kr}} (2n+1) J_{n+\frac{1}{2}}(Kr) P_n(\cos \theta) \quad (1)$$

(r, θ définis sur figure (1)).

(K quantité de mouvement des électrons incidents, J fonction de Bessel, P_n polynôme de Legendre). On sait de plus, que chaque fonction de Bessel, J_n se décompose en deux fonctions de Hankel.

$$J_n = \frac{1}{2} (H_n^{(1)} + H_n^{(2)}) \quad (2)$$

⁽¹⁾ ALLIS et MORSE, *Zeitschrift für Physik*, **70** (1931), p. 567 ; CONDON, *Review of Modern Physics*, **3** (1931), 43 ; MORSE, *Review of Modern Physics*, **4** (1932), 577 ; DE BROGLIE, *Annales de l'Institut Poincaré*, **3** (1933), 349.

⁽²⁾ Nous n'écrirons jamais les exponentielles en t , car le problème est stationnaire et il n'y a pas, par hypothèse, d'échange d'énergie.

$H^{(1)}$ représentant une onde convergente et $H^{(2)}$ une onde divergente. On représentera donc l'onde résultante (onde incidente + onde diffusée) par la formule :

$$\Psi = \sum_n (-1)^n \sqrt{\frac{\pi}{2Kr}} (2n+1) \left[J_{n+\frac{1}{2}}(Kr) + C_n H_{n+\frac{1}{2}}^{(2)}(Kr) \right] P_n(\cos \theta). \quad (3)$$

Les C_n sont des coefficients qu'il s'agit de déterminer et qui mesureront précisément la diffusion d'ordre n .

Fig. 4.

A l'intérieur de la sphère S_0 , on aura une fonction d'onde Γ qui devra être régulière en O. Ce ne sera pas une fonction propre de l'équation d'onde de Schrödinger à l'intérieur de S_0 . En effet :

1° Γ n'a pas à vérifier la condition de tendre vers 0 pour r infini.

2° Mais par contre, l'énergie des corpuscules est imposée, puisqu'on a à faire à un problème stationnaire sans échange d'énergie.

Γ aura la forme :

$$\Gamma = \sum_n C'_n f_n(r) P_n(\cos \theta)$$

car le problème a la symétrie cylindrique. Les f_n sont les solutions régulières en O du terme radial de l'équation de Schrödinger, où l'énergie a une valeur imposée d'avance. Les C'_n sont des coefficients à déterminer.

En écrivant que sur la sphère S_0 , $\Gamma = \Psi$ et $\frac{\partial \Gamma}{\partial r} = \frac{\partial \Psi}{\partial r}$ on assure la régularité de la fonction d'onde dans tout l'espace, et on obtient deux séries de conditions (on pourra traiter à part les coefficients de chaque polynôme $P_n(\cos \theta)$) qui détermineront les C_n et les C'_n .

Voici les résultats obtenus. — 1° Si l'on remplace dans (3) les $J_{n+\frac{1}{2}}$ par leurs valeurs (2), les C_n sont tels que :

$$\left| \frac{1}{2} + C_n \right| = \frac{1}{2}.$$

Il y a dans l'onde plane incidente, *déphasage* des coefficients des fonctions $H_{n+\frac{1}{2}}^{(2)}$ par rapport à ceux des fonctions $H_{n+\frac{1}{2}}^{(1)}$. Si ce déphasage vaut $2\delta_n$, on a :

$$|C_n| = \sin \delta_n.$$

2° Si le rapport r_0/λ est suffisamment petit (λ est la longueur d'onde des électrons incidents) la série des (C_n) converge comme $(Kr_0)^{2n+1}$ — Physiquement, il faut pour cela qu'on ait des électrons de quelques volts seulement.

3° Il s'agit maintenant de donner une définition de la diffusion, qu'on puisse comparer avec les résultats expérimentaux. MM. Allis et Morse admettent que la valeur de la diffusion d'ordre n est donnée par l'intégration sur une sphère de grand rayon de la densité de l'onde diffusée d'ordre n

$$\left| (-i)^n \sqrt{\frac{\pi}{2Kr}} (2n+1) C_n H_{n+\frac{1}{2}}^{(2)} \right|^2$$

multipliée par la vitesse $\frac{K}{m}$ des électrons incidents; on trouve pour ce flux, désigné par Q_n

$$Q_n = \frac{4\pi}{K^2} (2n+1) |C_n|^2.$$

Pratiquement, en raison des dimensions des atomes du gaz diffuseur, il suffira de calculer Q_0 , Q_1 et Q_2 . On a pu ainsi interpréter d'une manière satisfaisante les phénomènes de diffusion des électrons et l'effet Ramsauer.

Critique des résultats précédents. — Nous remarquerons que l'expression $\Psi\Psi^*$ doit être intégrée dans un volume et non sur une surface comme on l'a fait. Il y a là une manière de procéder incorrecte. L'expression du flux est :

$$\frac{eh}{4\pi im} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial n} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial n} \right)$$

et doit être intégrée sur une surface

$$\left(\frac{\partial}{\partial n} \text{ dérivée normale, } e, h, m, \text{ constantes usuelles } ^{(1)} \right).$$

De plus, en raison de la régularité imposée dans tout l'espace à la fonction d'onde, le flux résultant traversant une surface fermée quelconque doit être nécessairement nul. Et il semble, au contraire, qu'on ait ici un flux divergent résultant, à travers les sphères de grand rayon, centrées en O. Il y a donc là un paradoxe apparent. Le calcul doit montrer qu'il n'en est rien.

Autre position du problème ⁽²⁾. — Nous pouvons poser le problème d'une manière légèrement différente, qui paraît mieux adaptée à un problème de propagation et qui nous conduira intuitivement, à certains des résultats obtenus.

L'onde plane incidente peut être décomposée par les formules (1) et (2) en ondes convergentes vers O et en ondes divergentes de O. Si nous introduisons une sphère de potentiel perturbatrice S_0 , cette sphère ne modifiera pas les ondes convergentes *avant* qu'elles aient pu atteindre S_0 . Nous considérons donc séparément chaque onde convergente et chercherons à voir ce qui peut advenir d'elle après réfraction en S_0 ; elle se transformera en onde divergente, et se dissipera.

Si cette onde a pour expression $a_n H_{n+\frac{1}{2}}^{(1)}(Kr) P_n(\cos \theta)$, l'onde divergente aura pour expression :

$$a_n e^{2i\delta_n} H_{n+\frac{1}{2}}^{(2)} P_n(\cos \theta).$$

(1) Afin de simplifier nous adopterons les unités de Hartree et n'écrirons plus e, h, m .

(2) Born, *Z. Physik*, t. 38 (1926), p. 808.

En effet, le problème est réversible; l'onde divergente doit pouvoir être réfléchie, revenir en sens inverse et redonner les flux primitifs, changés de sens. Or si la fonction Ψ_1 donne un certain flux, la fonction Ψ_1^* donnera des flux opposés et le résultat subsistera si on multiplie par un facteur de phase arbitraire. Le flux convergent dû à Ψ_1 deviendra après passage à travers S_0 , le flux divergent dû à Ψ_2 ; si je change les sens de ces flux, en remplaçant Ψ_2 par Ψ_2^* , j'aurai des flux convergents, qui se transformeront après passage en S_0 en les flux divergents dus à Ψ_1^* . D'autre part, les propriétés de symétrie sphérique de Ψ_1 doivent se retrouver en Ψ_2 puisque le champ a la symétrie sphérique autour de O. Donc les flux de Ψ_1 doivent être ceux de Ψ_2 retournés. Donc, à un facteur de phase près, $\Psi_1^* = \Psi_2$.

Etude de la répartition des flux. — Nous venons donc de voir que le seul effet possible de la sphère sera de déphaser les coefficients des fonctions de Hankel $H^{(2)}$, par rapport à ceux des fonctions $H^{(1)}$ qui ne seront pas modifiés. Etudions l'effet de ces déphasages sur la répartition de flux dans l'espace, en faisant les hypothèses suivantes, qui ne modifieront pas sensiblement l'allure des phénomènes.

1° r_0/λ est assez petit pour que seul le déphasage δ_0 (diffusion d'ordre 0) soit à considérer. Nous avons vu que pour certains problèmes, cette hypothèse peut être vérifiée.

2° Remplaçons les fonctions de Hankel par leurs expressions asymptotiques

$$H_{n+\frac{1}{2}}^{(1)} \sim \sqrt{\frac{2}{\pi Kr}} e^{i\left(Kr - \frac{n+1}{2}\pi\right)}$$

$$H_{n+\frac{1}{2}}^{(2)} \sim \sqrt{\frac{2}{\pi Kr}} e^{-i\left(Kr - \frac{n+1}{2}\pi\right)}$$

Cette opération est permise pour le calcul des flux à grande distance, car les dérivées des fonctions de Bessel sont des combinaisons simples de fonctions de Bessel elles-mêmes, et peuvent être aussi représentées asymptotiquement.

3° Nous calculons les flux sur une sphère de grand rayon. Nous négligeons donc les termes qui dans le flux seront multipliés par $\frac{1}{r^n}$ avec $n > 2$.

a) **Calcul du flux non perturbé traversant une couronne $(\theta, \theta + d\theta)$.** — Son expression est :

$$\Phi = \frac{\pi}{2K^2} \left\{ \sum_n \sum_{n'} a_n a_{n'}^* e^{-i(\gamma_n - \gamma_{n'})} P_n(\cos \theta) P_{n'}(\cos \theta) - \sum_n \sum_{n'} a_n a_{n'}^* e^{i(\gamma_n - \gamma_{n'})} P_n(\cos \theta) P_{n'}(\cos \theta) \right\} \sin \theta d\theta$$

avec :

$$a_n = (-i)^n (2n+1)$$

et :

$$\gamma_n = Kr - \frac{n+1}{2}\pi$$

d'où :

$$\Phi = \frac{\pi}{2K^2} \left\{ \sum_n \sum_{n'} (2n+1)(2n'+1) P_n(\cos \theta) P_{n'}(\cos \theta) - \sum_n \sum_{n'} (-1)^{n+n'} (2n+1)(2n'+1) P_n(\cos \theta) P_{n'}(\cos \theta) \right\} \sin \theta d\theta. \quad (4)$$

b) **Introduction du déphasage $2\delta_0$.** — Il n'agira que sur les termes provenant des $H^{(2)}$ et sur les facteurs où un seul des deux indices n ou n' sera égal à 0. De plus, les expressions

$a_n e^{-i\gamma_n}$ et $a_n^* e^{i\gamma_n}$ sont réelles, en vertu de l'identité $i = e^{i\frac{\pi}{2}}$. Le déphasage $2\delta_0$ multipliera le terme d'indice $(0, n)$ par $e^{2i\delta_0}$ et le terme $(n, 0)$ par $e^{-2i\delta_0}$. Comme ces termes sont réels, cela équivaudra à multiplier les deux par $\cos(2\delta_0)$. Écrivons donc l'expression du flux supplémentaire, ajouté à Φ (les flux sortants sont comptés positivement), sous l'influence du déphasage d'ordre 0, considéré comme agissant seul. Supposons ce flux intégré dans une couronne (θ_1, θ_2) (fig. 1)

$$(\cos 2\delta_0 - 1) \frac{\pi}{K^2} \int_{\theta_1}^{\theta_2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) P_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta = -\frac{2\pi}{K^2} \sin^2 \delta_0 I_{\theta_1}^{\theta_2}$$

en appelant l'intégrale $I_{\theta_1}^{\theta_2}$.

On a l'identité suivante ⁽¹⁾ :

$$P'_{n+1}(x) - P'_{n-1}(x) = (2n+1) P_n(x),$$

donc $I_{\theta_1}^{\theta_2} =$ limite pour n infini de

$$[P_n(\cos \theta) + P_{n+1}(\cos \theta) - P_1(\cos \theta)]_{\theta_1}^{\theta_2}.$$

Or $P_1(\cos \theta) = \cos \theta$, et de plus, on a les identités

$$\begin{aligned} P_n(1) &= 1 \\ P_n(-1) &= (-1)^n \\ \int_{-1}^{+1} P_n^2(x) dx &= \frac{2}{2n+1}. \end{aligned}$$

Donc $P_n(x)$ tend vers 0 quand n tend vers l'infini quel que soit x , pourvu que x soit compris entre (-1) et $(+1)$.

Donc :

$$I_{\theta_1}^{\theta_2} = \cos \theta_2 - \cos \theta_1.$$

Ce résultat subsiste si $\theta_2 = \pi$ car on a toujours

$$P_n(-1) + P_{n+1}(-1) = 0.$$

Mais on a :

$$I_0^{\theta_2} = \cos \theta_2 + 1.$$

Il apparaît donc pour $\theta = 0$, une discontinuité qui tient aux propriétés des polynômes de Legendre et qui se manifestera par l'apparition d'un flux discontinu, d'intensité finie, coupant une sphère de centre O sur une surface nulle. On a donc :

1° Un flux divergent isotrope, issu de O.

2° Un flux discontinu, dirigé vers O, en sens inverse du flux incident, et dont l'intensité est égale à l'intensité totale du flux divergent. Ce flux représente la diminution d'intensité du flux incident et lève le paradoxe auquel nous avons fait allusion.

c) **Introduction des déphasages d'ordre supérieur.** — Supposons qu'il y ait maintenant à considérer des déphasages $\delta_0, \delta_1, \dots, \delta_p$ en nombre quelconque, mais fini.

Reportons-nous à l'expression du flux initial Φ . Nous pourrions partager les termes en plusieurs classes.

1° On a n et $n' > p$. — Les termes ne sont pas modifiés. Il ne leur correspond aucun flux supplémentaire.

(1) Voir par ex. WHITTAKER et WATSON, *Modern analysis*.

2° On a n et $n' \leq p$. — Nous avons ici des termes en nombre fini. Chacun devra être multiplié par $\cos 2(\delta_n - \delta'_n)$.

Il en résultera un certain flux continu, issu de 0.

3° Un seul des deux indices n et n' est $> p$. — Nous avons alors à étudier l'influence de $p + 1$ séries analogues à celles ci-dessus étudiées. Celle d'indice k sera

$$\int_{\theta_1}^{\theta_2} \sum_{n=p+1}^{\infty} (2n+1)(2k+1) P_n(\cos \theta) P_k(\cos \theta) \sin \theta d\theta.$$

On procèdera d'une manière identique :

On remplacera $(2n+1)P_n$ par une différence de dérivées. Tous les termes s'élimineront sauf :

1° Les deux dérivées d'indices inférieurs qui donneront de nouveau des flux continus issus de 0.

2° Les deux dérivées d'indice supérieur n et $n+1$.

On aura à évaluer la limite de :

$$\int_{x_1}^{x_2} P_k(x) P'_n(x) dx \quad \text{pour } n \text{ infini.}$$

Or on a

$$\int_{x_1}^{x_2} P_k P'_n dx = [P_k P_n]_{x_1}^{x_2} - \int_{x_1}^{x_2} P'_k P_n dx.$$

Le terme intégré donne 0 si x_1 et x_2 sont différents de -1 et $+1$; il donne -1 , si $x_2 = 1$. La deuxième intégrale donne toujours 0, car P'_k est bornée supérieurement et P_n tend vers 0 pour n infini.

Dans chaque déphasage $2\delta n$ introduira un flux de direction $\theta = \theta$, dont l'intensité sera donnée par l'expression

$$\frac{4(2n+1)}{K^2} \sin^2 \delta n$$

et dirigé en sens inverse du flux incident.

Nous voyons donc que les Q_n d'Allis et Morse ne sont autres que les intensités les contre-flux de direction $\theta = 0$ et d'ordre n (ou ce qui revient au même, les intensités résultantes de tous les flux continus, puisqu'il y a conservation des flux).

d) Les résultats précédents n'ont de sens que si la série de terme général

$$(2n+1) \sin^2 \delta n$$

est convergente.

Nous avons vu que si r/λ est suffisamment petit, cette convergence est assurée et est même rapide ; cela suffit pour les cas pratiquement étudiés.

Etude de la formule de Rayleigh. — Ainsi, la conservation des flux n'est assurée qu'au prix de l'introduction de contre-flux discontinus, ce qui est physiquement inadmissible. L'origine de ce paradoxe est à chercher dans la nature de la formule de Rayleigh. Celle-ci s'obtient de la manière suivante : La forme du développement de l'onde plane en

fonctions sphériques étant admise, on détermine les coefficients $(-i)^n \sqrt{\frac{\pi}{2}} (2n+1)$ en écrivant que les dérivées successives de la série par rapport à $\cos \theta$, prise pour $r=0$ sont les mêmes que celles de l'expression $e^{-iKr \cos \theta}$. On obtient ainsi une représentation de l'onde plane, qui pour des valeurs croissantes de n , devient de plus en plus exacte au voisinage de l'origine, et peut être étendue à des intervalles de plus en plus grands (si

l'on admet une approximation donnée). Mais, *jamais* l'on n'aura une représentation valable à l'infini. La figure 2 rend compte de ce processus (convergence faible). Les courbes C convergent faiblement vers AB.

Fig. 2.

Si dans la formule (4) qui donne les flux, nous nous limitons à l'indice n , nous obtenons, par un calcul qui ressemble à celui déjà fait, que le flux de l'onde initiale, non perturbée, à travers une couronne (θ_1, θ_2) de la sphère de rayon infini vaut

$$\int_{\theta_1}^{\theta_2} P'_n(\cos \theta) P'_{n-1}(\cos \theta) \sin \theta \, d\theta.$$

Fig. 3.

Ce flux est très faible partout, sauf au voisinage de la direction $\theta = 0$, où il devient très grand et positif, et de la direction $\theta = \pi$, où il devient très grand et négatif. La formule de Rayleigh, limitée à l'ordre n , donnera donc de l'onde plane une représentation telle que celle de la figure 3. Si n croît, la partie assimilable à une onde plane, s'élargit de plus en plus. Elle est sensiblement comprise dans un cylindre qui a son axe suivant la direction $\theta = 0$, dont la longueur l_n et le rayon r_n croissent indéfiniment avec n mais le rapport l_n/r_n croît aussi indéfiniment avec n , mais en dehors de la partie plane, les lignes de flux vont se resserrer de plus en plus autour des demi-droites $\theta = 0$ et $\theta = \pi$. Le contre-flux discontinu représente donc simplement la diminution du flux sortant par la droite et qui sera transformée en onde divergente (fig. 4).

Ainsi, l'origine des flux singuliers dans nos calculs est la suivante : nous avons d'abord remplacé toutes les fonctions de Hankel par leurs expressions asymptotiques, et ensuite avons fait augmenter n indéfiniment. Nous

introduisons une singularité à l'infini, qui provient de la nature de la formule de Rayleigh. MM. Allis et Morse n'ont évité cette difficulté qu'en considérant une onde

supplémentaire $C_n H_{n+\frac{1}{2}}^{(2)}$ dont ils ont calculé le flux sans tenir compte des autres termes de la fonction d'onde.

Fig. 4.

Conclusion. — Le calcul précédent ne permet pas une interprétation rigoureuse des courbes expérimentales, aussi ne se justifie-t-il que par les deux raisons suivantes : 1° Il tient compte de la définition théorique exacte du flux. 2° Il permet une interprétation des faits expérimentaux, qui est certes grossière, mais résulte d'un calcul très court. Les hypothèses de départ, très simplifiées (on néglige les phénomènes d'échange, de polarisation) ne permettent pas d'attendre plus. Bullard et Massey ⁽¹⁾ ont étudié la répartition angulaire de la diffusion d'électrons lents (à partir de 6 volts). On trouve bien aux bas voltages des diffusions isotropes; puis, si le voltage croît, des flux dirigés vers l'avant. Or notre calcul montre immédiatement que le déphasage δ , aura pour effet d'ajouter au flux isotrope, un flux en $\cos^2 \theta$ et un flux en $\cos^3 \theta$.

En terminant, je tiens à exprimer mes très vifs remerciements à M. L. de Broglie qui, au cours de nombreux entretiens, m'a laissé profiter de ses conseils et de ses critiques.

⁽¹⁾ *Proc. Roy. Soc.*, t. 133 (1931), p. 637.