**TD# 5 et 6 : L'effet photoélectrique**

**Les questions A.1, A.2 et A.3 sont à faire en préparation du TD.**

L'effet photoélectrique désigne l'émission d'électrons par un matériau soumis à l'action de la lumière. Dans le traitement que nous allons en faire, nous considèrerons un atome d'hydrogène dans son état fondamental $|\Psi_{100}\rangle$ caractérisé par son hamiltonien indépendant du temps $\hat{H}_0$. À partir d'un instant $t_0$, cet atome est soumis à un champ électromagnétique uniforme dérivant d'un potentiel vecteur de la forme

$$\mathbf{A}(t) = -\frac{\mathbf{E}_0}{\omega}\sin(\omega t) \tag{1}$$

Nous utiliserons ici la règle d'or de Fermi qui donne la probabilité de transition $\mathrm{d}\Gamma$ entre un état lié $|g\rangle$ et un état du continuum $|e\rangle$ d'énergie $E_e$ sous l'action d'une perturbation extérieure par unité d'angle solide $\mathrm{d}^2\Omega$ :

$$\mathrm{d}\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar}|W_{eg}|^2\rho(E_e,\theta,\varphi)\mathrm{d}^2\Omega \tag{2}$$

$$\rho(E_e,\theta,\varphi) = \frac{dN}{dE\mathrm{d}^2\Omega} \tag{3}$$

Où $W_{eg}$ est l'élément de matrice de l'Hamiltonien d'interaction couplant les états liés au continuum. Nous déterminerons dans un premier l'expression de cet élément de matrice pour ensuite calculer la probabilité par unité de temps que le champ électrique (perturbation) "arrache" l'électron de son état lié et "l'éjecte" sous la forme d'un électron libre (taux d'ionisation) ainsi que la section efficace d'ionisation.

# A. Calcul de l'élément de matrice de transition

L'atome d'hydrogène de masse $m$ est placé au centre d'un repère orthonormé $[O,\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\mathbf{e}_3]$. L'électron final est arraché avec la quantité de mouvement $\hbar\mathbf{k}$, repéré par les angles $\Theta$ et $\Phi$ dans ce référentiel (Fig. 1).

**1/** * Soit $\omega_0$ la fréquence du champ électrique correspondant à l'énergie minimale à apporter pour arracher un électron à l'atome dans son état fondamental (fréquence d'ionisation de l'atome). Calculer $\omega_0$ en fonction de $m$, $c$, $\hbar$ et $\alpha$ puis démontrer la relation suivante :

$$\omega_0 a_0^2 = \frac{\hbar}{2m} \tag{4}$$

***indice :*** $E_g = -mq^4/(32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2)$ et $\alpha = q^2/(4\pi\hbar c\varepsilon_0)$.

**2/** * L'interaction entre l'atome et le champ est décrite par l'hamiltonien :

$$\hat{H}_I = -\frac{q}{m}\hat{\mathbf{p}}.\mathbf{A}(t). \tag{5}$$

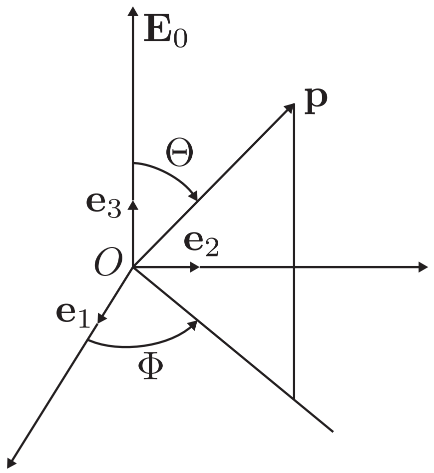


FIGURE 1 – Le référentiel fixe $[O, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$

Montrez que dans la jauge de Coulomb ($\nabla.\mathbf{A} = 0$) on a

$$\hat{H}_I = -\frac{q}{m}\mathbf{A}(t).\hat{\mathbf{p}} \tag{6}$$

**3/** * Calculer l'élément de matrice responsable des transitions entre l'état lié $|g\rangle$ et un état ionisé $|e\rangle$ en l'écrivant sous la forme

$$\langle e|\,\hat{H}_I\,|g\rangle = W_{eg}\left(\mathrm{e}^{-\imath\omega t} - \mathrm{e}^{\imath\omega t}\right) \tag{7}$$

**4/** La fonction d'onde décrivant l'atome dans son état fondamental est

$$\Psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0^{3/2}}\mathrm{e}^{-r/a_0} \tag{8}$$

Dans le cas des états ionisés de grande énergie, peu affectés par le potentiel attractif coulombien du noyau, les états finaux du processus d'ionisation peuvent être décrits par des ondes planes dans une boite de taille $L$ :

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}}\mathrm{e}^{\imath\mathbf{k}.\mathbf{r}} \tag{9}$$

ayant pour énergie $E_{\mathbf{k}} = \mathbf{p}^2/2m = \hbar^2k^2/2m$.

a) Écrire l'élément de matrice $W_{eg}$ sous forme d'une intégrale. Quelle est la dimension de cet élément de matrice ?

b) En effectuant une intégration par partie de façon à faire agir l'opérateur $\hat{\nabla}$ sur la fonction d'onde de l'électron final, exprimer $W_{eg}$ en fonction de $E = |\mathbf{E}_0|$, $k = |\mathbf{k}|$, $\Theta$ et de l'intégrale

$$I = \iiint \mathrm{e}^{-\imath\mathbf{k}.\mathbf{r} - r/a_0}\mathrm{d}^3\mathbf{r} \tag{10}$$

Pour calculer cette intégrale, on définit un repère $[O, \mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z]$ de sorte que $\mathbf{k}$ soit orienté suivant $\mathbf{e}_z$ (Fig. 2). L'angle $\Theta$ devient donc l'angle formé par les vecteurs

$\mathbf{k}$ et $\mathbf{A}$. $\mathbf{r}$ a pour coordonnées sphériques $r$, $\theta$ et $\varphi$.

c) En posant $x = \cos(\theta)$, calculer $I$. Mettre le résultat sous la forme

$$I = K \frac{a_0^3}{\left[1 + (a_0 k)^2\right]^2} \tag{11}$$

En déduire l'expression de l'élément de matrice $W_{eg}$.

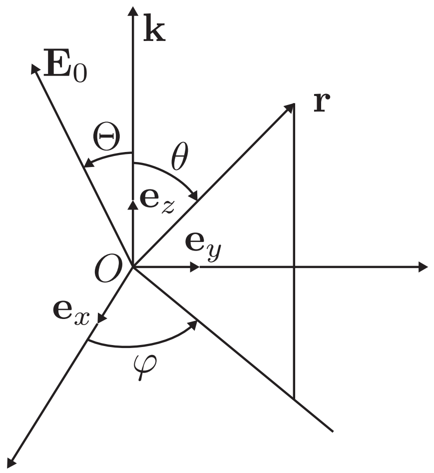


FIGURE 2 – Le référentiel auxiliaire $[O, \mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z]$

## B. Calcul du taux d'ionisation différentiel

Le taux d'ionisation différentiel, pour un électron éjecté dans l'élément d'espace de phase $\mathrm{d}\mathbf{k}$ avec l'énergie $E_{\mathbf{k}}$, est donné par la règle d'or de Fermi

$$\begin{aligned} \mathrm{d}w_{|100\rangle \to |\mathbf{k}\rangle} &= \frac{2\pi}{\hbar} |W_{eg}|^2 \delta(E_{\mathbf{k}} - E_g - \hbar\omega) \mathrm{dN} & (12) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |W_{eg}|^2 \delta(E_{\mathbf{k}} - E_g - \hbar\omega) \mathrm{d}^3\mathbf{k} \frac{L^3}{(2\pi)^3} & (13) \end{aligned}$$

**5*/** Montrer que la distribution $\delta(E_{\mathbf{k}} - E_g - \hbar\omega)$ implique la relation

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar}(\omega - \omega_0) \tag{14}$$

**6*/** En déduire la relation

$$1 + k^2 a_0^2 = \frac{\omega}{\omega_0} \tag{15}$$

**7*/** Donner l'expression de $\mathrm{d}^3\mathbf{k}$ en fonction de $\hbar$, $m$, $k$, $\mathrm{d}E_{\mathbf{k}}$ et $\mathrm{d}^2\Omega$. Pour cela, vous passerez par les étapes suivantes :

— Écrire $\mathrm{d}^3\mathbf{k}$ en fonction de $\mathrm{d}k$ et $\mathrm{d}^2\Omega$

— Écrire la relation entre $E_k$ et $k$ et en déduire la relation entre $\mathrm{d}E_k$ et $\mathrm{d}k$.

— En déduire l'expression de $\mathrm{d}^3\mathbf{k}$ en fonction de $\hbar$, $m$, $k$, $\mathrm{d}E_k$ et $\mathrm{d}^2\Omega$.

**8*/** Déterminez l'expression résultante pour $\mathrm{d}w_{|100\rangle\to|\mathbf{k}\rangle}$

# C. Calcul du taux d'ionisation

**9*/** Intégrer $\mathrm{d}w_{|100\rangle\to|\mathbf{k}\rangle}$ sur l'énergie finale et montrer que le taux d'ionisation différentiel, pour un électron émis dans l'élément d'angle solide $\mathrm{d}^2\Omega$, peut être mis sous la forme :

$$\mathrm{d}w_{|100\rangle\to|\mathbf{k}\rangle} = B\left(\frac{eEa_0}{mc^2\alpha^2}\right)^2\left(\frac{\alpha c}{a_0}\right)\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6\left(\frac{\omega}{\omega_0}-1\right)^{3/2}\cos^2(\Theta)\mathrm{d}^2\Omega \tag{16}$$

où $B$ est un coefficient numérique qui ne dépend pas de la taille de la boite L. Commentez cette non-dépendance.

**10*/** Exprimer l'élément d'angle solide $\mathrm{d}^2\Omega$ en fonction des angles $\Theta$ et $\Phi$ d'émission de l'électron par rapport au référentiel $[O, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$, puis intégrer l'expression (16) sur ces angles pour obtenir le taux d'ionisation $w(\omega)$.

**11*/** Calculer la valeur de $\omega_{\text{max}}$ pour laquelle le taux d'ionisation est maximal. Donner l'allure du graphe de $w(\omega)$ en fonction de $\omega/\omega_0$.

**12*/** On considère un champ électrique de pulsation $\omega = \omega_{\text{max}}$ et d'intensité $E = 1~\mathrm{kV/m}$. Calculer le taux d'ionisation correspondant à ce champ.

# D. Section efficace d'ionisation

La section efficace d'ionisation est définie par

$$\sigma(\omega) = \frac{w(\omega)}{F(\omega)} \tag{17}$$

où $F(\omega)$ est le flux de photons incident, c'est à dire le nombre de photons de pulsation $\omega$ par unité de surface et par unité de temps.

**13*/** Calculer l'expression de l'intensité $I(\omega)$ en fonction de $E$, $\varepsilon_0$ et $c$. En déduire l'expression du flux $F(\omega)$.

**14*/** Montrer que la section efficace s'écrit

$$\sigma(\omega) = \frac{256\pi}{3}\alpha a_0^2\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^5\left(\frac{\omega}{\omega_0}-1\right)^{3/2} \tag{18}$$

Quelle est la forme asymptotique de cette section efficace ?

**15*/** Calculer la valeur $\omega'_{\text{max}}$ pour laquelle la section efficace est maximale. Donner l'allure du graphe de $\sigma(\omega)$ en fonction de $\omega/\omega_0$. Calculer cette valeur maximale.

***Formulaire :*** $\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\alpha r}r^2\mathrm{d}r = \frac{2!}{\alpha^3}$ et $\int_{-1}^1 \frac{\mathrm{d}x}{(\alpha+\beta x)^3} = \frac{2\alpha}{(\alpha^2-\beta^2)^2}$