Université Joseph Fourier. Master 1 Physique.
TD de mécanique quantique, Frédéric Faure.

---

***TD : Diffusion (2). Ondes partielles. Résonances***

---

# 1 Diffusion sur une sphère

Références : [1] chap.13, [2] chap.8. [3].

On considère une particule de masse $m$ qui diffuse sur le potentiel central :

$$\begin{aligned} V(r) &= -V_0 \text{ si } r < a \qquad V_0 > 0 \\ &= 0 \qquad \text{si } r \geq a \end{aligned}$$

On posera $U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$, et $U_0 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0$.

1. Partant de l'équation de Schrödinger stationnaire $\hat{H}\psi = E\psi$, l'écrire en coordonnées sphériques avec $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta,\varphi)$, et obtenir l'équation radiale que doit satifaire $R(r)$ sous la forme d'une equation de Bessel [1] (distinguer les cas $r < a$ et $r > a$). Aide : le laplacien s'écrit $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\vec{L}}^2}{\hbar^2 r^2}$ où $\hat{\vec{L}}$ est l'opérateur moment angulaire. On posera $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.
2. On cherche maintenant à résoudre l'équation de Schrödinger radiale de la question (1) : $R(r)$ est combinaison linéaire des fonctions de Bessel $j_l$ et $n_l$. Utiliser la condition que $R(r)$ doit être fini en $r = 0$. Poser $K^2 = k^2 + U_0$. Ecrire le raccordement en $r = a$ pour

---

1. **Rappel sur les fonctions de Bessel radiales :** L'équation de Bessel est

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} - l(l+1)\frac{1}{\rho^2} + 1\right) F(\rho) = 0$$

et admet les solutions linéairement indépendantes suivantes (i.e. la solution s'écrit $F(\rho) = \alpha j_l(\rho) + \beta n_l(\rho)$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$) (A) les "**fonctions sphériques de Bessel**" :

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\sin\rho}{\rho}$$

et (B) les "**fonctions de Neumann sphériques**" :

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\cos\rho}{\rho}$$

dont les comportements limites sont pour $\rho \to 0$ :

$$j_l(\rho) \simeq \frac{1}{3.5.\ldots(2l+1)}\rho^l, \qquad n_l(\rho) \simeq -3.5.\ldots(2l-1)\frac{1}{\rho^{l+1}}$$

et pour $\rho \to \infty$ :

$$j_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho - \frac{\pi l}{2}\right), \qquad n_l(\rho) \simeq -\frac{1}{\rho}\cos\left(\rho - \frac{\pi l}{2}\right)$$

(qui sont des approximations correctes si $\rho \gg \frac{l(l+1)}{2}$).

la fonction $R(r)$ et sa dérivée et déduire que l'équation de Schrödinger est équivalente à

$$\frac{Kj_l'(Ka)}{j_l(Ka)} = \frac{k(Bj_l'(ka) + Cn_l'(ka))}{Bj_l(ka) + Cn_l(ka)}$$

où $n_l', j_l'$ sont les dérivées, $B, C \in \mathbb{C}$ des coefficients inconnus.

3. Montrer que pour $r \to \infty$, $R(r)$ peut s'écrire :

$$R(r) = A\frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)$$

Pourquoi appelle t-on $\delta_l$ "le déphasage" ? Montrer que l'on peut aussi écrire :

$$R(r) = -\frac{1}{2ik}Ae^{-i\delta_l}\left(\frac{e^{-ikr}}{r} - S_l\frac{e^{ikr}}{r}\right)$$

et donner l'expression de $S_l$ à partir de $\delta_l$. Donner l'interprétation de $S_l$.

4. A partir de la question (2), donner l'expression de $\tan\delta_l$.
5. Donner qualitativement la liste des ondes partielles $l$ qui participent à la diffusion, en fonction de $k$ et $a$ (Argument semi-classique qui fait intervenir la relation entre le paramètre d'impact $b$ et le moment angulaire $L = bp$, $L \simeq \hbar l$).
6. On étudie maintenant le secteur d'ondes partielles $l = 0$, qui est important à basse énergie $k \to 0$. Donner l'expression de $\tan\delta_0$ en fonction de $k$,$a$ et $K$ ?
7. Rappels : la section efficace totale se décompose $\sigma_{tot} = \sum_l \sigma_l$, et

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l$$

On définit la longueur de diffusion $\alpha$ à basse énergie par :

$$\alpha = -\lim_{k\to 0}\frac{\tan\delta_0}{k}$$

Alors $\sigma_{tot} \to 4\pi\alpha^2$ pour $k \to 0$.
Montrer ici que

$$\alpha = a\left(1 - \frac{\tan\gamma}{\gamma}\right), \qquad \gamma = a\sqrt{U_0}$$

et tracer $\alpha$ en fonction de $\gamma$. Identifier les "résonances" qui correspondent "pics" de $\sigma_{tot}$.

8. **(Option)** On étudier maintenant la limite $U_0 \to \infty$ qui correspond à une "sphère dure". A partir de (4) donner l'expression de $\tan\delta_l$, et son expression si $ka \ll 1$, et montrer que $l = 0$ domine.
9. **(Option)** A basse énergie, exprimer $\delta_0$ et $\sigma_{tot}$. Comparer à la surface d'un disque de rayon $a$. Même questions à haute énergie.

## References


[1] B.H. Bransden and C.J. Joachain. *Introduction to quantum mechanics.* Longman, 1989.

[2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Mécanique quantique.*

[3] F. Faure. *Cours de Mécanique quantique pour Master M1 de physique.* http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure/enseignement.