TD n°14
Diffusion

① Equation de Schrödinger : $\hat{H}\psi = E\psi$

on cherche une solution $\begin{cases} E \in \mathbb{R} \\ \psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \end{cases}$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(r)$$

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} = \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$

alors : $\Delta\psi = \left(\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) R \cdot Y_{\ell m}$

car $L^2 Y_{\ell m} = \hbar^2\left(\ell(\ell+1)\right) Y_{\ell m}$

au final :

$\hat{H}\psi = E\psi$, posant $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R + \frac{\hbar^2}{2m}U(r)\,R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} R$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \ell(\ell+1)\frac{1}{r^2} - U(r) + k^2\right)R(r) = 0$$

où $U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{pour } r < a \\ 0 & \text{pour } r \geq a \end{cases}$

2 posons $K^2 = U_0 + k^2$

alors d'après (1), pour $r < a$,

$H\psi = E\psi \iff$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \ell(\ell+1)\frac{1}{r^2} + K^2 \right) R = 0$$

on pose $\iff \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho} - \ell(\ell+1)\frac{1}{\rho^2} + 1 \right) R = 0$

avec $\rho = Kr$

c'est l'équation de Bessel dont la solution générale est :

$$R(r) = B \cdot j_\ell(Kr) + C \cdot n_\ell(Kr) .$$

Ici, il faut que $R(r)$ soit fini pour $r \to 0$, or $n_\ell(Kr)$ diverge, donc $C = 0$ et donc :

$$\boxed{R_{int}(r) = A \; j_\ell(Kr) \quad : \text{ pour } r < a \, , \; A \in \mathbb{C}}$$

de même pour $r \geq a$, on trouve :

$$\boxed{R_{ext}(r) = B \; j_\ell(kr) + C \; n_\ell(kr), \qquad B, C \in \mathbb{C}}$$

en $r = a$, il faut les conditions de raccordement :

$$\begin{cases} R_{int}(a) = R_{ext}(a) \\ \dfrac{dR_{int}}{dr}(a) = \dfrac{dR_{ext}}{dr}(a) \end{cases} \iff \left(\frac{R'_{int}}{R_{int}}\right)(a) = \left(\frac{R'_{ext}}{R_{ext}}\right)(a)$$

$$\iff \boxed{\frac{K j'_\ell(Ka)}{j_\ell(Ka)} = \left(\frac{B\, j'_\ell(ka) + C\, n'_\ell(ka)}{B\, j_\ell(ka) + C\, n_\ell(ka)}\right) k}$$

(3) Pour $r \longrightarrow \infty$,

$$R_{ext}(r) \simeq \frac{B}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{\pi \ell}{2}\right) - \frac{C}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{\pi \ell}{2}\right)$$

(avec $\rho = kr$)

$$= \frac{(B^2+C^2)^{1/2}}{\rho} \left[\sin\left(\rho - \frac{\pi \ell}{2}\right)\cos(\delta) + \cos\left(\rho - \frac{\pi\ell}{2}\right)\sin(\delta)\right]$$

avec $\cos(\delta) = \dfrac{B}{(B^2+C^2)^{1/2}}$, $\sin(\delta) = \dfrac{-C}{(B^2+C^2)^{1/2}}$

$$= \frac{A}{kr} \sin\left(kr - \frac{\pi \ell}{2} + \delta\right)$$

avec $A = (B^2+C^2)^{1/2}$, $\rho = kr$.

Dans le cas où il n'y a pas de potentiel, $U_0 = 0$, d'après les formules de raccordement, il faut $C=0$ donc $\delta = 0$.

Ainsi si la phase δ est non nulle, c'est à cause du potentiel non nul.

on peut aussi écrire :

$$R_{ext}(r) \simeq \frac{A}{kr\,(2i)} \left(e^{i(kr - \frac{\pi\ell}{2}) + i\delta} - e^{-i(kr-\frac{\pi\ell}{2}) - i\delta}\right)$$

$$= -\frac{A}{2ik} e^{-i\delta} \left(\frac{e^{-i(kr - \frac{\pi\ell}{2})}}{r} - S_\ell \cdot \frac{e^{i(kr-\frac{\pi\ell}{2})}}{r}\right)$$

avec $S = e^{2i\delta}$

onde sphérique entrante

onde sphérique sortante

Cette expression montre que l'onde entrante sphérique est diffusée vers l'onde sortante avec même valeur de ℓ, et S_ℓ est le coef de module 1 car proba conservée

4 A partir de (2) et (3),

$$\tan \delta_\ell = -\frac{C}{B},$$

et
$$K \frac{j_\ell'(Ka)}{j_\ell(Ka)} = \frac{\left(j_\ell'(ka) - \tan\delta \cdot n_\ell'(ka)\right) k}{j_\ell(ka) - \tan\delta \cdot n_\ell(ka)}$$

$$\Longleftrightarrow \quad \tan\delta_\ell = \frac{k\, j_\ell(Ka)\, j_\ell'(ka) - j_\ell'(Ka)\, j_\ell(ka)\, K}{k \cdot n_\ell'(ka)\, j_\ell(Ka) - n_\ell(ka)\, j_\ell'(Ka)\, K}$$

5 En mécanique classique une particule incidente avec un paramètre d'impact b, subit une collision sur un objet de rayon a si $b < a$:

or le moment angulaire est $L = p \cdot b$

il faut donc $L = p \cdot b < p \cdot a$

$$\Longleftrightarrow \quad \boxed{\ell < k \cdot a} \qquad \text{car } L = \hbar \cdot \ell \text{ et } p = \hbar k$$

6 On a

$$j_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho}, \qquad n_0(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho}$$

$$j_0'(\rho) = \frac{\rho\cos(\rho) - \sin\rho}{\rho^2} \qquad n_0'(\rho) = \frac{(\sin\rho)\rho + \cos\rho}{\rho^2}$$

donc avec (4) :

$$\tan\delta_0 = \frac{k \sin(Ka)\cos(ka) - K\cos(Ka)\sin(ka)}{k\sin(Ka)\sin(ka) + K\cos(Ka)\cos(ka)}$$

$$= \frac{k\, tg(Ka) - K\, tg(ka)}{k\, tg(Ka)\, tg(ka) + K}$$

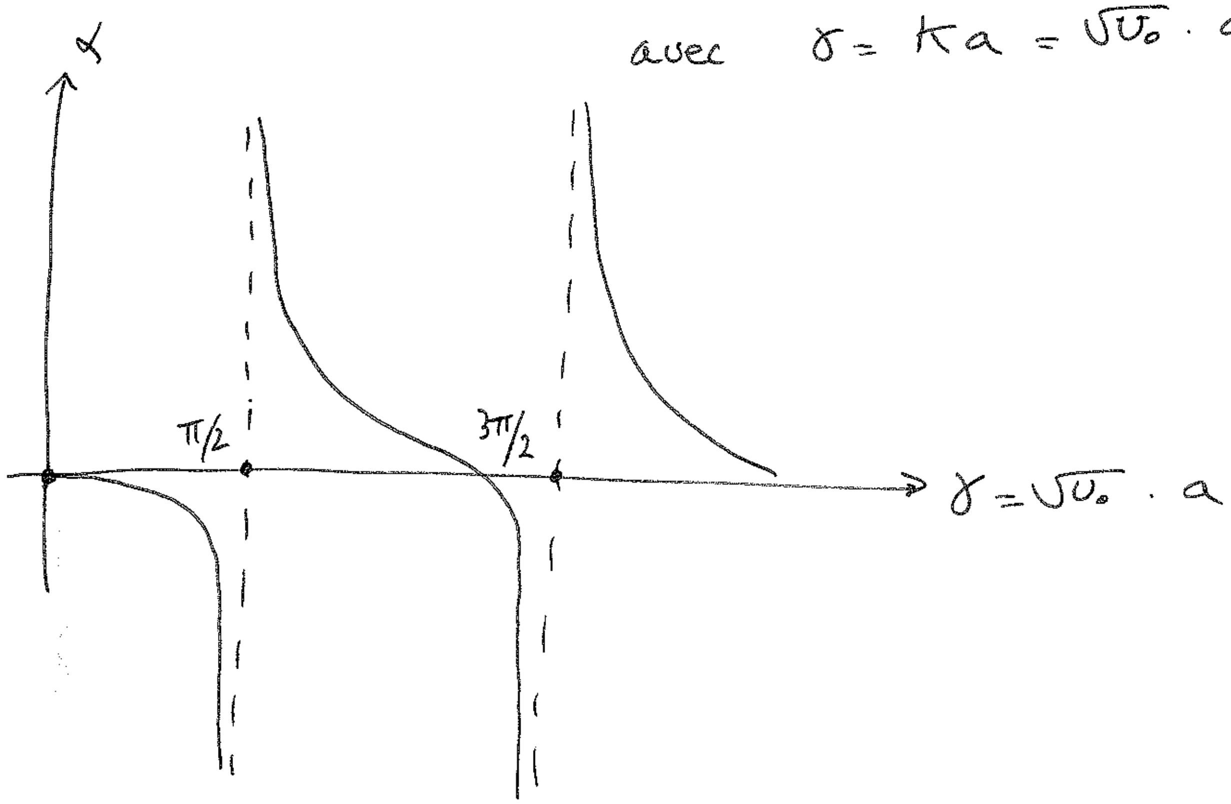
pour $k \to 0$, $\tan(ka) \sim ka$ donc

$$\tan \delta_0 \sim \frac{k\,(tg\,(Ka) - Ka)}{K}$$

donc

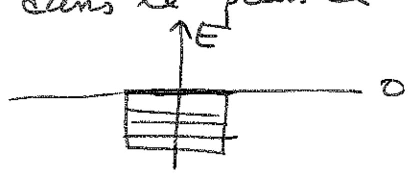
$$\alpha = - \lim_{k \to 0} \frac{\tan \delta_0}{k} = a \cdot \left(1 - \frac{\tan \gamma}{\gamma}\right)$$

avec $\gamma = Ka = \sqrt{U_0} \cdot a$



Les résonances sont en $\gamma = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}$ etc...
car α diverge donc la section efficace σ_{tot} diverge.
(La diffusion est importante).

Rem : on montre par ailleurs que pour ces valeurs, il y a un nouveau état lié dans le puits de potentiel, d'énergie 0 :



8. si $U_0 \to \infty$, à k fixé, alors $K^2 \sim U_0 \to \infty$.

et avec (4) :

$$\tan \delta_\ell \simeq \frac{j_\ell(ka)}{n_\ell(ka)}$$

Dans la limite basse énergie, $ka \to 0$, alors :

$$\tan \delta_\ell \simeq \frac{-(ka)^{2\ell+1}}{[3.5\ldots(2\ell+1)][3.5\ldots(2\ell-1)]}$$

qui décroît avec ℓ grand.

Donc σ_ℓ décroît avec ℓ, et donc $\sigma_{\ell=0}$ domine à basse énergie.

9. Pour $(ka) \ll 1$ (basse énergie),

$$\delta_{\ell=0} \simeq \tan \delta_0 \simeq -(ka)$$

$$\sigma_{tot} \simeq \sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \delta_\ell^2 \simeq 4\pi . a^2$$

$$= 4 . S_a$$

avec $S_a = \pi a^2$: surface d'un disque de rayon a.
qui est la section efficace classique
(que l'on trouverait à haute énergie plutôt)

Pour $(ka) \gg 1$ (haute énergie),

$$\tan \delta_\ell \simeq \frac{j_\ell(ka)}{n_\ell(ka)} \simeq -\tan\left(ka - \frac{\pi \ell}{2}\right)$$

donc $\delta_\ell \simeq \frac{\pi \ell}{2} - ka$.

$$\sigma_{tot} = \sum_{\ell=0}^{L} \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) \sin^2\left(\frac{\pi \ell}{2} - ka\right)$$, avec $L = k.a$: coupure obtenue en (5)

$$= \frac{4\pi}{k^2} \left(\sum_{\ell \text{ pair}} (2\ell+1) \sin^2(ka) + \sum_{\ell \text{ impair}} (2\ell+1) \cos^2(ka) \right)$$

$$\simeq$$

donc pour $L = ka \gg 1$,

$$\sigma_{tot} \approx \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka} (l) \approx 2\pi a^2$$

$$= 2 \cdot S_a$$

Le facteur 2, par rapport au résultat classique S_a, vient du fait que le potentiel est abrupt, et il y a des phénomènes de diffraction qui persistent même dans la limite des petites longueurs d'ondes.