Tutorat 5

Diffusion quantique

Frédéric Chevy – chevy@lkb.ens.fr

Depuis le début du siècle, avec la découverte de la structure de l'atome par Rutherford, jusqu'aux grands accélérateurs en fonctionnement de nos jours, l'étude expérimentale des propriétés des particules élémentaires se fonde essentiellement sur l'étude de collisions à des énergies de plus en plus haute.
Dans ce qui suit, on présente quelques résultats de bases de la description quantique (mais non relativistes) de processus de diffusion entre deux particules.
Notation : Définition de la transformée de Fourier :

$$\widehat{F}(\mathbf{q}) = \int F(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}d^3r$$

$$F(\mathbf{r}) = \int \widehat{F}(\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\frac{d^3q}{(2\pi)^3}$$

1 Diffusion quantique

On considère une particule de masse m arrivant avec une énergie $E > 0$ sur un potentiel diffusant $V(\mathbf{r})$. On cherche à calculer la probabilité de diffusion de la particule par le potentiel.

1. Montrer que si l'on pose $E = \hbar^2k^2/2m$, alors la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$ de la particule est solution de l'équation de Schrödinger :

$$-\Delta\psi + u(\mathbf{r})\psi = k^2\psi, \tag{1}$$

   où Δ désigne l'opérateur laplacien et $u = 2mV/\hbar^2$.

2. *Fonction de Green de la particule libre*. On cherche dans un premier la fonction de Green du problème sans potentiel diffusant. Autrement dit, on cherche une fonction $\mathcal{G}$ solution de l'équation :

$$-(\Delta + k^2)\mathcal{G} = \delta(\mathbf{r}).$$

   (a) Soit $\widehat{\mathcal{G}}(\mathbf{q})$ la transformée de Fourier de $\mathcal{G}$. Montrer que celle-ci est solution de l'équation :

$$(q^2 - k^2)\widehat{\mathcal{G}} = 1.$$

(b) En déduire que :

$$\widehat{\mathcal{G}} = \mathcal{PP}\left(\frac{1}{q^2 - k^2}\right) + \lambda\delta(q-k),$$

où $\mathcal{PP}$ désigne la partie principale et λ est une constante numérique.

(c) En utilisant le théorème des résidus, montrer que :

$$\int \mathcal{PP}\left(\frac{1}{q^2 - k^2}\right) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{d^3q}{(2\pi)^3} = \frac{\cos(kr)}{4\pi r}.$$

(d) En déduire que par un choix convenable de λ, on peut prendre :

$$\mathcal{G}(r) = \frac{e^{ikr}}{4\pi r}.$$

3. Montrer que si $j(\mathbf{r})$ est un champ quelconque, la solution générale de l'équation

$$-(\Delta + k^2)\psi = j$$

s'écrit :

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \mathcal{G} * j,$$

où ψ_0 est une solution de l'équation $(\Delta + k^2)\psi_0 = 0$ et $*$ désigne le produit de convolution.

4. En déduire que la solution générale de l'équation de diffusion (1) se met sous la forme :

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) - \int \mathcal{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')u(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d^3r'. \tag{2}$$

5. *Approximation de Born.* Notons $\mathcal{L}$ l'opérateur linéaire défini par :

$$\mathcal{L}(\psi) = \mathcal{G} * (u\psi).$$

Montrer que

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \mathcal{L}^n \psi_0 \tag{3}$$

est solution de (2) sous réserve de convergence de la série. *L'approximation de Born* consiste ensuite à tronquer ce développement à l'ordre 1.

2 Notion de longueur de diffusion

1. On choisit $\psi_0 = e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}$. Quelle situation physique cela représente-t-il ?

2. Montrer que pour r grand devant la portée du potentiel, on peut écrire :

$$\mathcal{L}(\psi_0) \sim \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{q}),$$

avec $\mathbf{q} = k\mathbf{r}/r - \mathbf{k}_0$ et

$$f(\mathbf{q}) = \int u(\mathbf{r}')e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} d^3\mathbf{r}'.$$

3. Calculer f pour les potentiels suivants :

   (a) Marche de potentiel :

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & r > a \\ V_0 & r < a \end{cases}$$

   (b) Potentiel de Yukawa :

$$V(r) = g\frac{e^{-\kappa r}}{r}.$$