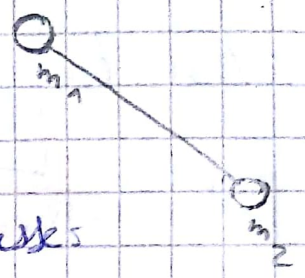
Théorie quantique de la Diffusion :

1) Notion de la section efficace :

a) Introduction :



L'étude du problème de deux corps en MC

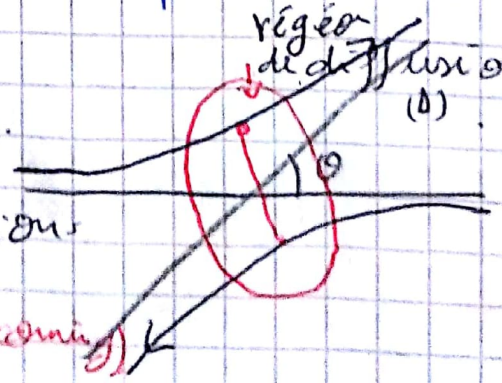
→ se réduit à l'étude du centre de masse :

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} \quad \left(\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right).$$

En generale on parle de la collision être deux particule (1, 2), qui donne (3) et (4), en plus il y a un réangement, c'est un reaction.

Si l'etat final est constitué de m particule de l'etat initial, seulement la direction qui change, on dira qu'on a la diffusion.

_ Généralement on utilise la notion du courant de particule, au lieu d'un seul particule.



θ : l'angle de diffusion.

(Δ) asymptote de diffusion.

avant → courant rentrant (incoming)

Après → courant sortant (out going).

les particule diffusé sont libre alors leurs energie est continue n'est pas quantifé. elle sont décrit par un onde plan.

* pour $r < d$, où d désinge la porté de l'interaction (region du diffusion). $V(\vec{r}) \neq 0$, la fonction d'onde s'écrit :

$$(\nabla^2 + k^2)\,\psi(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\,V(r)\,\psi(\vec{r}). \quad (1)$$

avec : $k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$. (2)

* pour $r \gg d$ c-à-d en d'hore de la région de diffusion $V(r) = 0$

$$(\nabla^2 + k_a^2)\,\varphi_a(r) = 0. \quad (3)$$

telq ~~$\varphi_a(\vec{r})$~~ $\varphi_a(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_a \cdot \vec{r}}$ (4)

le ~~flux de~~ particule $\varphi_a(\vec{r})$, on va le noté $\vec{J}_a$, tel que :

$$\vec{J}_a = \frac{\hbar}{2\mu i}\left(\varphi_a^* \vec{\nabla}\varphi_a - \varphi_a \vec{\nabla}\varphi_a^*\right). \quad (5)$$

remplaçant par $\varphi_a(\vec{r})$ on trouve :

$$\vec{J}_a = \cancel{\hbar k_a}\ \frac{\hbar \vec{k}_a}{\mu} = \vec{v}_a$$

$\vec{v}_a$ vitesse du group, ou vitesse de la masse fictive

$\varphi_0(\vec{r})$ caractérise le flux incident dans $\vec{J_a}$

Le problème c'est que de trouver la solution de l'equation (1). comme superposition des onde plan de l'equation (3)

b) diffimition de la section effecasses !

- fonction de green -

fonction de green (libre) 1 particul est difini par:

$$(\nabla^2 + k^2)\, G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(r - r') \qquad (6)$$

si on connu la solution de l'equation (6) on peut tjr la mètre sous la forme:

$$(\nabla^2 + k^2)\, \Phi(\vec{r}) = A(\vec{r}) \qquad (7)$$

tel que:

$$\Phi(\vec{r}) = \varphi(r) + \int G(r, r')\, A(\vec{r}')\, d\vec{r}' \qquad (8)$$

$\varphi(\vec{r})$ la solution homogène de l'eq (7)

la fonction de green $G(r, r')$ est connue:

$$G(r, r') = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|r - r'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \qquad (9)$$

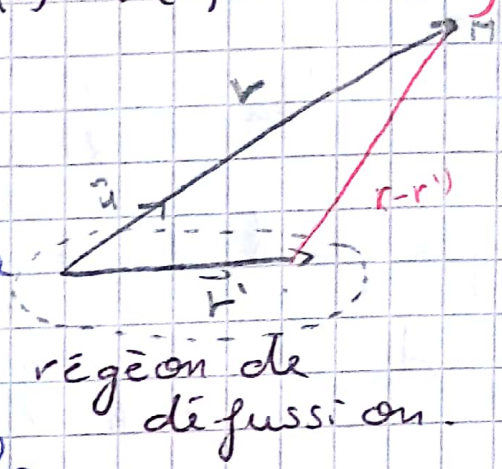
Donc la solution de l'eq (1)

Scanned by CamScanner

$$\Psi(r) = \varphi(\vec{r}) + \int G(r,r')\, A(\vec{r})\, d\vec{r} \qquad (10)$$

où encore plus précisement

$$\Psi(\vec{r}) = \varphi_a(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\, V(\vec{r})\, \Psi(\vec{r})\, d\vec{r}' \qquad (11)$$



a grand distance c-à-d

$r \gg r'$ où r' est la porté de

l'interaction

dans ce cas la on va calcule

$$|r-r'|^2 = r^2 + r^2 - 2\vec{r}\cdot\vec{r}'$$

$$\simeq r^2 - 2\vec{r}\,\vec{r}' = r^2\left[1 - 2\frac{\vec{r}}{r}\cdot\frac{\vec{r}'}{r}\right]$$

$$\cancel{\simeq r^2\left[1 -\right.}$$

on obtient:

$$|r-r'| = r\left(1 - \frac{\vec{r}}{r}\cdot\frac{\vec{r}'}{r}\right) = r\left[1 - \vec{u}\,\frac{r'}{r}\right]$$

encore:

$$\cancel{|r-r'| = r} \quad |r-r'| = r - \vec{u}\,\vec{r}' \qquad (12)$$

qu'on peut ecrire aussi:

$$k\,|\vec{r}-\vec{r}'| = k\,r - k\,\vec{u}\,\vec{r}' = kr - \vec{k}_b\,\vec{r}' \qquad (13)$$

telque $\vec{k}_b = k\,\vec{u}$ (14)

La forme asymptotique de $\Psi_{diff}(\vec{r})$:

$$\Psi_{sc}(\vec{r}) = \Psi_a(\vec{r}) \qquad (15)$$

Scanned by CamScanner

donc φ

$$\Psi(\vec{r}) = \varphi_a(\vec{r}) + A_{ba}\frac{e^{ikr}}{r} \quad r \gg d \qquad (16)$$

avec $$A_{ba} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \underbrace{e^{-i\vec{k}_b\vec{r}'}}_{\varphi_b^*} V(\vec{r}')\Psi_a(\vec{r}')\,dr' \qquad (17)$$

qui peut s'écrire :

$$A_{ba} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \langle \varphi_b|\vec{r}'\rangle V(\vec{r}')\langle \vec{r}'|\Psi_a\rangle\, d\vec{r}' \qquad (18)$$

$$A_{ba} = \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2}\langle \varphi_b|V(\vec{r}')|\Psi_a\rangle$$

où A_{ba} = Amplitude de diffusion.

* A grand distance de centre de diffusion, A_{ba} est déterminer par :

$$\varphi_{diff} = \underbrace{A_{ba}}_{f(\theta)}\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (19)$$

le flux incident $\varphi_a(r) = e^{ikr} \Rightarrow J_{inc} = \frac{\hbar\vec{k}}{\mu} = \vec{v}$

~~donc $\varphi_a(\vec{r})$~~ le flux de particule diffusé

$$\varphi_{diff} = A_{ba}\frac{e^{ikr}}{r}$$

Calculons maintenant le flux diffusé.

$$\varphi_{diff} = A_{ba}\frac{e^{ikr}}{r}$$

Scanned by CamScanner

$$\vec{J}_{diff} = \frac{\hbar}{2\mu i}\left(\varphi_d^* \nabla \varphi_{di} - \varphi_d \nabla \varphi_d^*\right) \quad (20)$$

l'opérateur ∇ en coor sphérique à la form suivant

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\vec{e}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\vec{e}_\varphi \quad (21)$$

le vecteur courant de particule s'écrit :

$$\vec{J} = \vec{J}_r + \vec{J}_\theta + \vec{J}_\varphi \quad (22)$$

avec : $$|J| = \sqrt{J_r^2 + J_\theta^2 + J_\varphi^2} \simeq j_r \quad (23)$$

$$\left(J_\theta \sim \frac{1}{r} \text{ et } J_\varphi \sim \frac{1}{r} \text{ et } r \gg\gg\right)$$

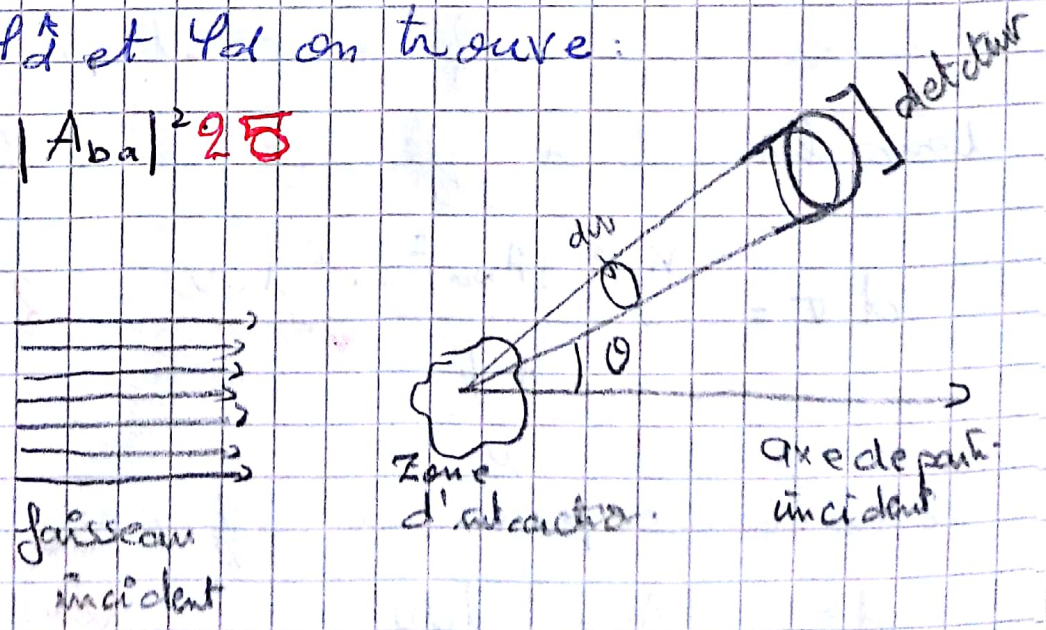
donc le flux de particule est essentiellement diffusé suivant la direction de $\vec{r}$

$$\vec{J}_{diff} = J_r = \frac{\hbar}{2\mu i}\left(\varphi_d^* \frac{d\varphi_b}{dr} - \varphi_d \frac{d\varphi^*}{dr}\right) \quad (24)$$

remplaçant φ_d^* et φ_d on trouve :

$$d\vec{J}_{diff} = \frac{\hbar k}{\mu r^2}|A_{ba}|^2 d\Omega$$

En pratique



En pratique loi de la Zone d'interaction on dispose d'un de tecteur D, mesurent le nombre dn de particule diffusée par unité de temps dans l'angle solide $d\Omega$ ($\boxed{d\Omega = \frac{ds}{r^2}}$ en Steradian) le coefficient de proportionnalité $\sigma(\theta, \varphi) =$ est appelé section efficace de diffusion dans la direction θ, φ.

La section efficace différentielle de diffusion $d\sigma$ est le raport de flux de particule diffusée par unité de temps dans un élément d'angle solide $d\Omega$, et flux incident Il y'aura donc

$J_r r^2 dr$ particule qui passera a travers une surface $r^2 d\Omega$ par second, donc la section effecace prend la forme

$$d\sigma = \frac{\frac{\hbar k}{\mu r^2} |A_{ba}|^2 r^2 d\Omega}{\frac{\hbar k}{\mu}} \qquad (26)$$

ce qui donne pour la diffusion elastique

$$d\sigma = |A_{ba}|^2 d\Omega \qquad (27)$$

Scanned by CamScanner

Remarque :

pour la diffusion inélastique, il y a un facteur $\frac{k_R}{k_i}$ qui apparaît

II/ Théorème de la diffusion par un potentiel

1) état stationnaire de diff et approximation de Bohr :

on s'intéresse à l'étude de la diff élastiq.

Un état stationnaire c-à-d la fonction d'onde peut s'écrire de la forme :

$$\Psi(r,t) = \Phi(\vec{r})\chi(t) = \cancel{\Phi(t)}\ \Phi(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

on cherche des solution stationnaire de l'equation de schrodinger $H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ 28

l'eq de schrodinger prend la forme

$$\left(\nabla^2 + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r})\right) \Phi(\vec{r}) = 0 \quad (29)$$

c'est l'equation de schrodinger avec

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} \quad (30)$$

on remplace $\Phi(\vec{r})$ pr $\Psi(\vec{r})$, pour

$$\left(\nabla^2 + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r})\right) \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (31)$$

Scanned by CamScanner

de l'equation (11) et leq(17)

$$A_{ba} = \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2}\int e^{-ik_b\vec{r}}\, V(\vec{r})\left[\varphi_a(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|}\, V(r')\, \Psi(r')\, dr'\right] dr \qquad 32.$$

qui peut s'écrire

$$A_{ba} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\langle \varphi_b | V(\vec{r}) | \varphi_a \rangle + \left(\frac{-\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \int e^{-ik_b\vec{r}}\, V(\vec{r}) \left[\int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|}\, V(\vec{r}')\, \Psi(r')\, dr'\right] d\vec{r} \qquad 33.$$

Aussi :

$$A_{ba} = \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2}\langle \varphi_b | V(\vec{r}) | \varphi_a \rangle + \left(\frac{-\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \int \varphi_b^* V(\vec{r}) \int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|}\, V(r')\, \Psi(r')\, dr'\, dr \qquad (34)$$

avec : $\Psi_b^+(r') = e^{-ik_b r'}$.

$$A_{ba} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\langle \varphi_b | V(r) | \varphi_a \rangle + \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \int \varphi_b^*(r')\, V(r) \int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|}\, V(r')\, \Psi(r')\, dr'\, dr + \left(-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^3 \int \ldots\ldots \qquad (35)$$

c'est l'approximation de Born

Si la convergence est obtenue à la $n^{ème}$ approximation, on dit que le résultat est à la $n^{ème}$ approximation de Born :

$$A^{B}_{ba} = \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \varphi_b | V(\vec{r}) | \varphi_a \rangle \quad (36)$$

c'est la 1ère approximation de Born ou l'approximation de Born.

la section efficace differentielle de diffusion $d\sigma$ d'après l'equation (27) due :

$$d\sigma^{B} = |A^{B}_{ba}|^2 \, d\Omega \quad (37)$$

remplaçant par l'expression de A^{B}_{ba}, on trouve :

$$d\sigma^{B} = \left(\frac{\mu^2}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\langle \varphi_b | V(\vec{r}) | \varphi_a \rangle|^2 \, d\Omega$$

cette expression est la section efficace differentielle d'un diffusion elastique dans l'approxi de Born.

~~limite validité~~

limite validité de l'approximation de Born

l'approximation de Born est une approximation faite en théorie de la diffusion en particulier en M.Q, pour des potentiel diffuseurs très pendense.

Scanned by CamScanner

elle est nommé d'après Max Born

- L'approximation de Born est valable lorsque la fonction d'onde $\Psi(\vec{r})$ est legèrement diffférent de l'onde plan incident c-à-d : lorsque le 2ème terme de l'equation (11) qui sera prendr la forme suivant :

$$\Psi(\vec{r}) \simeq \varphi_a(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}')\,\varphi_a(\vec{r}')\,dr' \quad -39-$$

est très petit par rapport au 1er terme donc

$$\left|\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(\vec{r}')\,\varphi_a(r')\,dr'\right| \ll |\varphi_a(\vec{r})| \quad (40)$$

$V(\vec{r})$ est très import si : $\vec{r} \to \vec{0}$.

$$\left|\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ikr'}}{r'} V(r')\, e^{i\vec{k}r'}\, d\vec{r}'\right| \ll 1 \quad (41)$$

$$\left|\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{V(r')}{r'}\, e^{i(kr' + \vec{k}r')}\, dr'\right| \ll 1 \quad (42)$$

C'est la condition pour utilisé l'approximation de Born

- Cas de faible energie $kr \ll 1$

$$\left|\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{V(r')}{r'}\, d\vec{r}\right| \ll 1 \quad (43)$$

Scanned by CamScanner

cas de potentiel à symetrie sphérique

$$\left| \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{V(r)}{r} e^{i(kr + kr\cos\theta)} r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi \right| \ll 1$$

encore :

$$\left| \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty r V(r) e^{ikr} \int_0^\pi e^{ikr\cos\theta} \sin\theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \right| \ll 1$$

donc

$$\frac{\mu}{\hbar^2 k} \left| \int_0^\infty V(r) \left(e^{2ikr} - 1 \right) dr \right| \ll 1 \quad (44)$$

exemple

$$V(r) = V_0 e^{-\frac{r}{r_0}}$$

$$I = \frac{\mu}{\hbar^2 k} \left| \int_0^\infty V_0 e^{-\frac{r}{r_0}} \left(e^{2ikr} - 1 \right) dr \right|$$

$$= \frac{\mu V_0}{\hbar^2 k} \left| \int_0^\infty \left(e^{-(1 - 2ikr_0)\frac{r}{r_0}} - e^{-\frac{r}{r_0}} \right) dr \right|$$

$$I = \frac{\mu V_0}{\hbar^2 k} \left| \frac{r_0}{1 - 2ikr_0} - r_0 \right| = \frac{\mu V_0}{\hbar^2 k} \left| \frac{2ikr_0^2}{1 - 2ikr_0} \right|$$

$$= \frac{\mu V_0}{\hbar^2 k^2} \cdot \frac{2kr_0^2}{\sqrt{1 - 4k^2 r_0^2}}$$

d'après l'approximation :

$$\frac{\mu V_0}{\hbar^2 k} \frac{2kr_0^2}{\sqrt{1 - 4k^2 r_0^2}} \Rightarrow 2\mu V_0 r_0^2 \ll \hbar^2 \sqrt{1 + 4k^2 r_0^2} \quad (45)$$

Scanned by CamScanner

à faible energie $kr_0 \ll 1$

$$2\mu V_0 r_0^2 \ll \hbar^2 \quad (46)$$

A haute energie: $k r_0 \gg 1$

$$2\mu V_0 r_0^2 \ll \hbar^2 2 k r_0$$

ou

$$\mu V_0 r_0 \ll \hbar^2 k \quad (47)$$

2) Théorie de la diffusion dans l'approximation de Born:

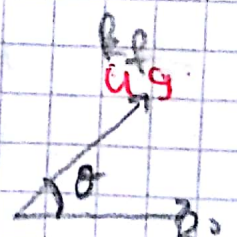
La section efficace differentielle de diffusion $d\sigma$, dans l'approximation de Born s'ecrit:

$$d\sigma^{(B)} = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar}\right)^2 |\langle \varphi_b | V(\vec{r}) | \varphi_a \rangle|^2 d\Omega \quad 47$$

$$= \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\langle \varphi_f | V(\vec{r}) | \varphi_i \rangle|^2 d\Omega \quad 48$$

avec:

$$\varphi_i(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \cdot r}, \quad \varphi_f(r) = e^{i\vec{k}_f r}.$$



la diffusion elastique: $|\vec{k}_i| = |\vec{k}_f|$.

remplaçant $\varphi_i(\vec{r})$ et $\varphi_f(\vec{r})$ dans l'expression suivant:

$$\langle \varphi_f | V(\vec{r}) | \varphi_i \rangle = \int V(\vec{r}) e^{-i(\vec{k}_f - \vec{k}_i)\vec{r}} d\vec{r}$$

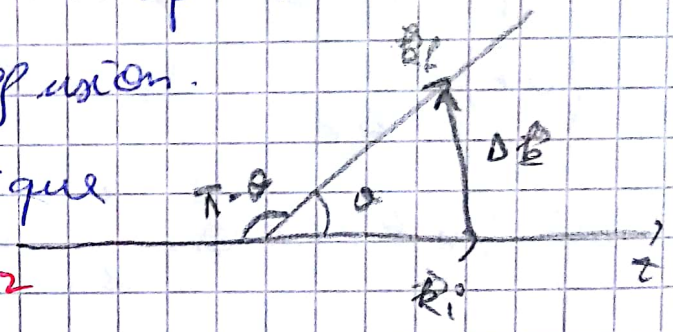
$$= V(\vec{k}_f - \vec{k}_i) \quad (50)$$

Scanned by CamScanner

$\langle \varphi_f | V(\vec{r}) | \varphi_i \rangle = V(\Delta \vec{k})$. (r1) (51)

où $\Delta \vec{k} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$ s'appelle le moment sphérique.

on peut dire que l'élément de matrice déterminé qui la section efficace est donné transformation de Fourier du potentiel correspondant au moment transféré pendant la diffusion.



Si la diffusion est elastique

alors $|k_f| = |k_i| = |k|$ r2

ce qui donne $|k_f - k_i| = 2k \sin\frac{\theta}{2}$. r3

pour le cas d'un potentiel symétrique

$$V(\vec{k}_f - \vec{k}_i) = V(\Delta \vec{k}) = \int v(r)\, e^{-i \Delta \vec{k} \vec{r}}\, d\vec{r} \quad \text{r4.}$$

$$= \int_0^\infty V(r) \int_0^\pi e^{-i \Delta k r \cos\theta'} r^2 \sin\theta' \, d\theta' \int d\varphi \, dr.$$

finalement:

$$V(\Delta \vec{k}) = \frac{4\pi}{\Delta k} \int_0^\infty r V(r) \sin(\Delta k r)\, dr.$$

$$\Delta k = 2k \sin\frac{\theta}{2}. \quad \text{r5}$$

Scanned by CamScanner

La section efficace differentielle

$$d\sigma^B = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left|V\left(2k\sin\frac{\theta}{2}\right)\right|^2 d\Omega \quad (56)$$

Exemples

champ coulombien masqué

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} e^{-\frac{r}{r_0}} \quad , \quad e^{-\frac{r}{r_0}} \to \text{ecran} \quad (57)$$

Remplaçant dans l'eq (55)

$$V(\Delta k) = \frac{4\pi}{\Delta k} \int_0^\infty Z_1 Z_2 e^2 e^{-\frac{r}{r_0}} \sin(\Delta k r)\, dr$$

$$\sin(\Delta k r) = \frac{e^{i\Delta k r} - e^{-i\Delta k r}}{2i}$$

on aura donc

$$V(\Delta k) = \frac{4\pi}{\Delta k} \int Z_1 Z_2 e^2 e^{-\frac{r}{r_0}} \left(\frac{e^{i\Delta k r} - e^{-i\Delta k r}}{2i}\right) dr$$

finalement:

$$V(\Delta k) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2 r_0}{1 + (\Delta k r_0)^2} \quad (58)$$

donc la section efficace differentielle:

$$\frac{d\sigma^B}{d\Omega} = \left(\frac{2\mu Z_1 Z_2 e^2}{\hbar^2}\right)^2 \left(\frac{r_0}{1 + (\Delta k r_0)^2}\right)^2 \quad (59)$$

maintenant si on elemine l'effet de l'ecran c-à-d $e^{-\frac{r}{r_0}} \to 1 \Rightarrow r_0 \to \infty$.

Scanned by CamScanner

$$\lim_{r_0 \to \infty} \left(\frac{r_0^2}{1 + (\Delta k r_0)^2} \right) = \frac{1}{\Delta k^4} . \qquad (60)$$

$$\frac{d\sigma^B}{d\Omega} = \left(\frac{2\mu Z_1 Z_2 e^2}{\hbar^2 (\Delta k)^2} \right)^2 \qquad 61$$

on sait que $\Delta k = 2k \sin \frac{\theta}{2}$.

$$\frac{d\sigma^B}{d\Omega} = \left(\frac{2\mu Z_1 Z_2 e^2}{\hbar^2 4 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right)^2 \qquad 62.$$

et $E = \frac{p^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \Rightarrow k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$. 63.

Dans l'eq 62.

$$\frac{d\sigma^B}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E \sin \frac{\theta}{2}} \right)^2 \qquad (64)$$

finalement on obtient l'expression:

$$\frac{d\sigma^B}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \sin^{-4}\left(\frac{\theta}{2}\right).$$

cette relation est connu sous le nom de la formule de Rutherford ou la section efficace de coulomb.

Scanned by CamScanner

III Diffusion par un potentiel centrale:

(Méthode des ondes partielle, Méthod de déphasage)

1)- Calcule de la section efficace σ

Lorsque le potentiel est central, le moment cinétique est conservé.

L'equation de schrodinger s'écrit:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) - E\right)\Psi(\vec{r}) = 0. \quad (66) \quad V(\vec{r}) = V(r)$$

$$\left[\nabla^2 + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar}V(r)\right]\Psi(\vec{r}) = 0. \quad 67.$$

où $\nabla^2 = \left(\frac{1}{r}\frac{d^2 r}{dr^2} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}\right)$ 68.

les solutions de la diffusion sont cherchée toujour pour r très grand ($r \gg$). c-à-d. $V(r) = 0$

L'eq 67 peut s'écrire:

$$\left[\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} + k^2\right]\Psi(r) = 0. \quad 69$$

qui a pour solution: $\Psi(\vec{r}) = \sum_{l,n} R_l(r)\, Y_l^m(\theta, \varphi)$.

avec $R_l(r) = A_l\, j_l(kr) + B_l\, \eta_l(kr)$ 71 (70)

$j_l(kr)$: fonction de Bessel sphérique.

$\eta_l(kr)$ fonction de Neumann

avec et pour les grandes distances :

$$j_\ell(kr) = \frac{\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{kr} \quad (r \to \infty) \quad (72)$$

$$\eta(kr) = -\frac{\cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{kr} \quad (r \to \infty)$$

posant :

$$* \quad \underline{tg\, \delta_\ell = -\frac{B_\ell}{A_\ell} = \frac{\sin\delta_\ell}{\cos\delta_\ell}} \quad (73)$$

l'expression de $R_\ell(r)$ devient

$$R_\ell(r) = \frac{A_\ell}{kr\cos\delta_\ell}\left[\cos\delta_\ell \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) + \sin\delta_\ell \cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)\right] \quad 74.$$

$$R_\ell(r) = C \cdot \frac{\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right)}{kr} \quad (75)$$

avec : δ_ℓ : le déphasage et $C = \frac{A_\ell}{\cos\delta_\ell}$ (76)

encore :

$$R_\ell(r) = \frac{C}{2ikr}\left[e^{i\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right)}\right] \quad (77)$$

La solution mathématique de l'eq 69 :

$$\psi_{math}(\vec{r}) = \sum_\ell \sum_m \frac{a_{\ell m}}{2ikr}\left[e^{i\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right)}\right] Y_\ell^m(\theta,\varphi) \quad 78$$

la solution physique de l'eq 69, peut prendre la forme :

Scanned by CamScanner

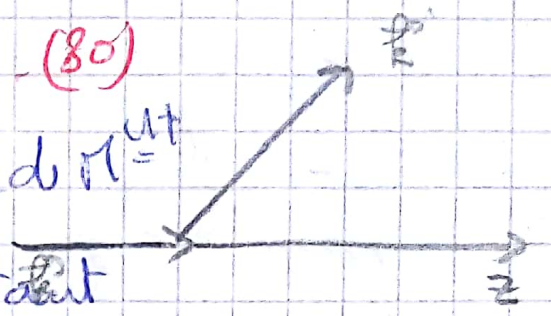
$$\Psi_{phy}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r} \quad (79)$$

$f(\Omega) = A_{bd}$

Si on choisit $\vec{k}$ suivant l'axe (oz), alors :

$$\Psi_{phy}(\vec{r}) = e^{ik_3} + f(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r} \quad (80)$$

le moment cinétique étant cte du mvt



les différents états correspondant à différent valeur de l prendront export indépendament dans la diffusion, il convient alors d'écrire l'onde incidente comme supperposition d'onde partielle, chaque une correspondant à une valeur différents de l, on écrit e^{ik_3} comme

$$e^{ik_3} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, i^l j_l(kr)\, P_l(\cos\theta) \quad (81)$$

encores

$$e^{ik_3} = \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)}\; i^l j_l(kr)\, Y_l^0(\Omega) \quad 82$$

on sait que :

$$j_l(kr) \longrightarrow \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr} \qquad (r \to \infty)$$

$$\Psi_{phy}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\, 2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \left[e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)} \right] Y_l^0(\Omega) + f(\Omega)\frac{e^{ikr}}{(2\pi)^{3/2} r} \quad 83$$

Scanned by CamScanner

Identifiant la solution ψ_{phy} avec la solution ψ_{math} on trouve :

Identification des termes en e^{-ikr} :

$$\sum_{l}\sum_{m} \frac{a_{lm}}{2ikr}\left[e^{i\left(\frac{l\pi}{2}-\delta_l\right)}\right] Y_l^m$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\,2ikr}\sum_{l=0}^{\infty} i^l\sqrt{4\pi(2l+1)}\left[e^{i\frac{l\pi}{2}}\right] Y_l^0(\Omega) \quad (84)$$

pour $m=0$ $\quad a_{l0} = \dfrac{i^l\sqrt{4\pi(2l+1)}}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{i\delta_l}$ $\quad$ (85)

identification des terme en e^{+ikr}.

$$\sum_{l=0}^{\infty}\frac{a_{l0}}{2ikr}\left[e^{i\left(-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)}\right] Y_l^0(\Omega) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\,2ikr}\sum_{l=0}^{\infty} i^l\sqrt{4\pi(2l+1)}$$

$$\left[e^{i\left(-\frac{l\pi}{2}\right)}\right] Y_l^0(\Omega) + \frac{f(\Omega)}{(2\pi)^{3/2}\,r} \quad 86$$

encore

$$\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{(2\pi)^{3/2}\,2ikr}\, i^l\, e^{-i\frac{l\pi}{2}}\, Y_l^0(\Omega)\left[e^{2i\delta_l}-1\right] = \frac{f(\Omega)}{(2\pi)^{3/2}\,r} \quad 88$$

Le terme $= i^l e^{-i\frac{l\pi}{2}} = 1$ alors :

$$f(\Omega) = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{2ik}\, Y_l^0(\Omega)\left[e^{2i\delta_l}-1\right] \Rightarrow 89$$

comme $m=0$ $\quad Y_l^0(\Omega) = Y_l^0(\theta) \Rightarrow f(\Omega) = f(\theta)$ 90

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\, e^{i\delta_l}\, Y_l^0(\theta)\sin\delta_l \quad 91.$$

Scanned by CamScanner

remplaçant par $Y_\ell^0(\theta)$

$$Y_\ell^0(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\, P_\ell \cos\theta \quad (92)$$

Donc

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\, e^{i\delta_\ell} P_\ell(\cos\theta)\sin\delta_\ell \quad (93)$$

Maintenant, calculon la section efficace, en utilisant l'eq (91)

$$\cancel{d\sigma} \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = f(\theta)\, f^*(\theta) \quad (94)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2}\sum_{\ell}\sum_{\ell'} 4\pi\sqrt{(2\ell+1)(2\ell'+1)}\, e^{i(\delta_\ell-\delta_{\ell'})}$$

$$\sin\delta_\ell \sin\delta_{\ell'}\, Y_\ell^0(\theta)\, Y_{\ell'}^0(\theta) \quad (95)$$

D'après les propriété des harmonique sphérique on aura :

$$\sigma = \iint \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2}\sum_{\ell}\sum_{\ell'} 4\pi\sqrt{(2\ell+1)(2\ell'+1)}\,\sin\delta_\ell \sin\delta_{\ell'}\,\delta_{\ell\ell'}$$

Finalement la section effecace :

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell \quad (96)$$

δ_ℓ : est le déphasage entre les onde qui participent à la diffusion pour un potentiel central (Méthode de déphasage)

Scanned by CamScanner

Théorème optique :

c'est le cas où, $\theta = 0$, l'eq (93) devient devie

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l \quad (97)$$

la partie imaginaire de $f(0)$ donc :

$$\mathrm{Im} f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l . \quad 98.$$

la section efficace prend une autre forme :

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \mathrm{Im} f(0). \quad (99)$$

$f(0)$: l'amplitude de diffusion vers l'avant.

1) Calcule de déphasage δ_l :

Si on pose :

$$R_{nl}(r) = \frac{U_l(r)}{r} \quad (100)$$

l'equation de schrodinger se simplifie

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] U_l(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) U_l(r) \quad (101)$$

on va considérer deux solution différents :

- pour une particule libre, $V(r) = 0$

on pose $U_l(r) = g_l(r)$ avec $g_l(0) = 0$ 102.

Scanned by CamScanner

l'eq de schrodinger devient :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] g_l(r) = 0 \quad (103)$$

leur solution est donné sous la forme :

$$g_l(r) = \left[A j_l(kr) + B \eta(kr)\right] \cdot kr \quad 104.$$

on a $g(0) = 0$ dans ce cas $B\eta(kr) = 0$.

n'est pas de sens ($r \to 0$), $\eta_l(kr)$ se diverge :

$$g_l(r) = A \cdot k \cdot r\, j_l(kr) \quad 105.$$

pour une particule non libre, $V(r) \neq 0$, et pour r très grande.

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] U_l(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) U_l(r) \quad 106$$

cherchant les solution asymptotique de cette dernière equation, i.e ($r \gg$).

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] \psi = 0 \quad 107.$$

leur solution est donné par :

$$U_l(r) = \left[A j_l(kr) + B \eta(kr)\right] \cdot kr \qquad r \gg \quad 108.$$

et pour les grand distances

(... ne pas ...ge)

$$j_\ell(kr) \longrightarrow \frac{\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{k}$$

$r \to \infty$. 109

$$\eta(kr) \longrightarrow -\frac{\cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{k}$$

posant : $\operatorname{tg} \delta_\ell = -\frac{B}{A}$ 110

l'expression de $U_\ell(r)$

$$U_\ell(r) = A\left[\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) + \frac{B}{A}\cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)\right]$$ 111

finalement on peut écrire :

$$U_\ell(r) \simeq \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right)$$ 112.

et la solution $g_\ell(r)$ peut s'écrire aussi :

$$g_\ell(r) \simeq \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)$$ 113.

on multiple les fonction $g_\ell(r)$ et $U_\ell(r)$ par les equation (106) et (103) successivement, ensuit on intègre de 0 à d, comme montre l'eq suivat

$$\int_0^d \left\{ g_\ell(r)(106)_G - U_\ell(r)(103)_G \right\} dr = \int_0^d \left\{ g_\ell(r)(106)_D - U_\ell(r)(103)_D \right\} dr$$

114

$$\int_0^d \left\{ g_\ell(r)\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + k^2\right] U_\ell(r) - U_\ell\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + k^2\right] g_\ell(r) \right\}$$

$$= \int_0^d g_\ell(r) \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) U_\ell(r)\, dr$$ 115

Scanned by CamScanner

peut être simplifier

$$\int_0^d \left\{ g_\ell(r) \frac{d^2 U_r(r)}{dr^2} - U_\ell(r) \frac{d^2 g_r}{dr^2} dr = \int_0^d \frac{2\mu}{\hbar^2} g_\ell(r) V(r) U_\ell(r) dr \right. \quad 116$$

on intègre par partie cette dernière eqs

$$g_\ell(r) U'_\ell(r) \Big]_0^d - \int_0^d g'_\ell(r) U'_\ell(r)\, dr - U_\ell(r) g'_r(\ell) + \int_0^d g'_\ell(r) U'_\ell(r) dr$$

$$= \int_0^d \frac{2\mu}{\hbar^2} g_\ell(r) V(r) U_\ell(r)\, dr. \quad (117)$$

$$\left[g_\ell(r) U'_\ell(r) - U_\ell(r) g'_r(\ell) \right]_0^d = \int_0^d \frac{2\mu}{\hbar^2} g_\ell(r) V(r) U(r) dr. \quad (118)$$

Remplaçant par les expressions

$$k \left[\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) \cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right) - \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right) \cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) \right]_0^d$$

$$= \int_0^d \frac{2\mu}{\hbar^2} g_\ell(r) V(r) U_\ell(r)\, dr \quad 119.$$

on utilise les fonction trigonometrique

$$\cancel{k \sin} \; k \sin(-\delta_\ell) = -k \sin \delta_\ell = \frac{2\mu}{\hbar^2} \int g_\ell(r) V(r) U_\ell(r) dr \quad 120$$

$$\Rightarrow \sin \delta_\ell = -\frac{2\mu}{\hbar^2 k} \int_0^d g_\ell(r) V(r) U_\ell(r)\, dr \quad 121$$

en 1ère approximation $U_\ell(r) = g_\ell(r)$.

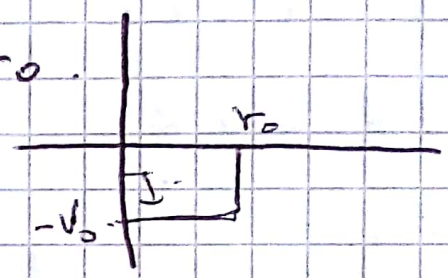
$$\sin \delta_\ell = -\frac{2\mu k}{\hbar^2} \int_0^d r^2 V(r) j_\ell^2(kr)\, dr \quad 122$$

Scanned by CamScanner

Exemple

determiner par la méthode de déphasage la section efficace de diffusion de particule lente par un point de potentiel de la forme:

$$v(r) = \begin{cases} -V_0 & r < r_0 \\ 0 & r \geq r_0 \end{cases}$$



Solution:

d'une manière général l'eq de schrodingers

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) U(r).$$

pour le particule lente; seule les onde S qui participe à la diffusion:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right] U_e(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) U_e(r).$$

Région 1 $\Rightarrow$ $k'^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}(E + V_0)$.

$$U^{I}(r) = A \sin k'r + B \cos k'r$$

La condition au limite: $U_e(0) = 0$.

$$\boxed{U^{I}(r) = A \sin k'r}$$

région 2 $\Rightarrow$ $k^2 = \frac{2\mu}{\hbar} E$.

$$U^{II}(r) = A \sin kr + B \cos kr \propto \sin(kr + \delta_l)$$

Scanned by CamScanner

des deux solution

$U^{I}(r) = A \sin k' r$, $U^{II}(r) = \sin(kr + \delta_0)$.

des condition au limite :

$U^{I}(r_0) = U^{II}(r_0)$, $U^{I\prime}(r_0) = U^{II\prime}(r_0)$.

$A \sin k' r_0 = \sin(k r_0 + \delta_0)$. (1)

$A k' \cos k' r_0 = k \cos(k r_0 + \delta)$ (2)

$\boxed{\frac{1}{2}}$ $\tan(k r_0 + \delta_0) = \frac{k}{k'} \tan(k' r_0)$. (3)

finalements

$$\delta_0 = \mathrm{Arctang}\left[\frac{k}{k'} \tan k' r_0\right] - k r_0.$$

calcule la section effecace:

la relation. $\tan(\alpha + \beta) = \frac{\tan\alpha + \tan\beta}{1 - \mathrm{tg}\alpha\, \mathrm{tg}\beta}$.

$$\mathrm{tg}(k r_0 + \delta_0) = \frac{\mathrm{tg} k r_0 + \mathrm{tg}\,\delta_0}{1 - \mathrm{tg} k r_0\, \mathrm{tg}\,\delta_0}$$

on sait que. $\sin^2 \delta_0 = \frac{\mathrm{tg}^2 \delta_0}{1 + \mathrm{tg}^2 \delta_0}$.

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k^2} \frac{\mathrm{tg}^2 \delta_0}{1 + \mathrm{tg}^2 \delta_0}$$

finalement

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \frac{(a - \mathrm{tg}\, k r_0)^2}{(1 + a\, \mathrm{tg}\, k r_0)^2 + (a - \mathrm{tg}\, k r_0)^2}$$

Scanned by CamScanner