La longueur de diffusion pour un potentiel carré

Ce cas d'école permet de calculer explicitement la longueur de diffusion. On fait tendre k vers zéro ($k \ll 1/b$) et r vers l'infini ($r \gg b$). Dans les domaines de température considérés, on peut en fait avoir à la fois $r \gg b$ et $kr \ll 1$. On peut donc écrire :

$$\psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{u_k(r)}{r} \sim e^{i\vec{k}.\vec{r}} - a\frac{e^{ikr}}{r} \simeq 1 - \frac{a}{r}$$

$u_k(r)$ est donc proportionnel à $r - a$ dans la limite $r \gg b$.

On considère un potentiel carré attractif $V_0 = -\hbar^2 k_0^2/M$ de portée b, avec un mur répulsif en $r = 0$ de telle sorte que $u_k(0) = 0$. On cherche à calculer a en fonction de k_0 et b. Il faut résoudre l'équation de Schrödinger domaine par domaine et écrire la continuité de u_k/u_k' en b, dans la limite $k \ll k_0$ et $k \ll 1/b$.

$$\begin{cases} r < b & u_0'' = -k_0^2 u_0\,, \quad \text{soit } u_0 = A\,\sin(k_0 r) \\ r > b & u_0'' = 0\,, \quad \text{soit } u_0 = B(r-a) \end{cases}$$

La continuité de u_0/u_0' en b s'écrit

$$\frac{1}{k_0}\mathrm{tg}(k_0 b) = b - a \quad \text{et donc} \quad a = b\left(1 - \frac{\mathrm{tg}(k_0 b)}{k_0 b}\right).$$

Le signe de a dépend de $k_0 b$ et a peut même diverger lorsque $k_0 b = \pi/2 + q\pi$ où q est entier (voir figure 1). a est négatif pour $k_0 b < \pi/2$, puis est positif pour la plupart des valeurs de $k_0 b$, sauf au voisinage des divergences juste en-dessous de $\pi/2 + q\pi$.

Les divergences de a correspondent à l'apparition d'un nouvel état lié dans le potentiel carré. En effet, résolvons l'équation de Schrödinger pour $V(r)$ avec une énergie négative $-\hbar^2 k^2/M$ (état lié, $0 < k < k_0$) :

$$\begin{cases} r < b & -\varphi'' - k_0^2\varphi = -k^2\varphi\,, \quad \text{soit } \varphi(r) = A\,\sin(\sqrt{k_0^2 - k^2}\,r). \\ r > b & -\varphi'' = -k^2\varphi\,, \quad \text{soit } \varphi(r) = Be^{-kr}. \end{cases}$$

La continuité de φ/φ' en b s'écrit

$$\frac{1}{\sqrt{k_0^2 - k^2}}\,\mathrm{tg}(\sqrt{k_0^2 - k^2}\,b) = -\frac{1}{k} \quad \text{et donc} \quad k\,\mathrm{tg}(\sqrt{k_0^2 - k^2}\,b) = -\sqrt{k_0^2 - k^2} \qquad (1)$$

Imaginons que le puits a une largeur donnée et que sa profondeur varie à partir de $k_0 = 0$. Lorsque k_0 tend vers zéro avec $0 < k < k_0$, on peut linéariser la tangente et on devrait avoir $kb\sqrt{k_0^2 - k^2} = -\sqrt{k_0^2 - k^2}$ ce qui est impossible, k et b étant positifs. Il n'y a donc initialement pas d'état lié. Des états liés apparaissent lorsqu'il existe une solution avec une énergie arbitrairement proche de zéro (on prend $k \to 0$ dans l'équation (1) ci-dessus), c'est-à-dire si $\mathrm{tg}(k_0 b) \to \infty$. Il y a donc un état lié pour $\pi/2 < k_0 b < 3\pi/2$, deux états liés

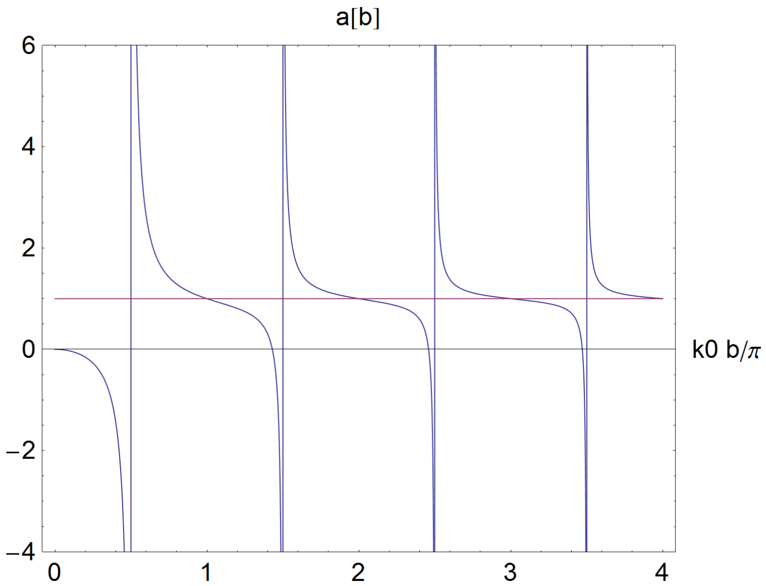

FIGURE 1 – Longueur de diffusion pour un potentiel carré attractif, en unités de b et en fonction de $k_0 b/\pi$. Une résonance apparaît chaque fois que $k_0 b = \pi/2 + q\pi, q \in \mathbb{N}$.

pour $3\pi/2 < k_0 b < 5\pi/2$, etc. Lorsqu'un état lié est près d'apparaître, a est très grande et négative ; lorsqu'un état lié vient d'apparaître, a est très grande et positive.

N.B. A la limite des faibles potentiels $k_0 b \to 0$, la longueur de diffusion devient $a \simeq -k_0^2 b^3/3$, soit comme dans l'approximation de Born à $k = 0$

$$a \simeq \frac{M}{4\pi\hbar^2} \int d^3 r V(r).$$