Mécanique quantique – L2

Chayma Bouazza - Antoine Bourget - Sébastien Laurent

Séance du 22 janvier 2016 - `www.phys.ens.fr/~bourget`

TD 13 : Pertes d'énergie dans la matière

On cherche à décrire les pertes d'énergie d'une particule chargée de masse m et de charge q pénétrant avec une énergie E dans un milieu matériel.
On considère l'interaction de la particule avec un atome unique. On supposera la vitesse v de la particule incidente suffisamment rapide pour que sa trajectoire soit peu modifiée par l'interaction avec un seul atome. Pour simplifier, on considère un atome infiniment lourd.
Dans la suite on choisira l'origine des coordonnées au centre de l'atome et la particule chargée sera repérée par $\mathbf{r}(t)$.

1. (a) Écrire le potentiel de perturbation $\widehat{V}(t)$ auquel est soumis l'atome lors du passage de la particule chargée.

   (b) On suppose que le paramètre d'impact b est beaucoup plus grand que la taille de l'atome. En déduire que $\widehat{V}$ se met sous la forme :

   $$\widehat{V}(t) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r(t)^3}\mathbf{r(t)} \cdot \widehat{\mathbf{D}},$$

   où $\widehat{\mathbf{D}}$ est l'opérateur moment dipolaire de l'atome.

2. On suppose qu'à $t = -\infty$, l'atome est dans son état fondamental $|\mathrm{i}\rangle$, d'énergie E_i.

   (a) Soient $|\mathrm{f}\rangle$ les états excités de H_0. On note c_f la projection de l'état de l'atome sur $|\mathrm{f}\rangle$. Quelle équation différentielle régit $b_\mathrm{f}(t) = e^{i\frac{E_\mathrm{f} t}{\hbar}} c_\mathrm{f}(t)$ au premier ordre ? En donner la solution sous la forme d'une intégrale sur le temps.

   (b) Quelle est l'expression de l'énergie δE_a gagnée par l'atome aux temps longs ? Donner une définition du temps d'interaction τ. Que vaut δE_a dans le cas où τ est grand ? Interpréter.

   (c) On se place dans le cas d'un temps d'interaction court. Montrer qu'alors δE_a s'écrit :

   $$\delta E_\mathrm{a} = \frac{4q^2}{(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2 b^2 v^2}\sum_\mathrm{f}(E_\mathrm{f} - E_\mathrm{i})|\langle \mathrm{i}|\widehat{\mathrm{D}}_\mathrm{x}|\mathrm{f}\rangle|^2.$$

   On rappelle :

   $$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(1+x^2)^{3/2}}dx = 2.$$

3. *Règle de Thomas-Reiche-Kuhn.*

   On suppose que le hamiltonien non perturbé se met sous la forme :

$$\widehat{H}_0 = \sum_k \widehat{p}_k^2/2m_e + \widehat{U}(\widehat{\mathbf{r}}_k),$$

où $\widehat{\mathbf{p}}_k$ et $\widehat{\mathbf{r}}_k$ sont les impulsions et les positions des électrons de l'atome diffuseur. m_e est la masse d'un électron, $-e$ sa charge. On va alors montrer que la somme obtenue dans la question 2.d) prend une forme très simple.

(a) Montrer que $\widehat{\mathbf{\Pi}}$ défini par :

$$\widehat{\mathbf{\Pi}} = \frac{1}{-Ze} \sum_k \widehat{\mathbf{p}}_k$$

est le moment conjugué de $\widehat{\mathbf{D}}$. Dans cette expression, Z est le numéro atomique du diffuseur.

(b) Calculer $[\widehat{\mathbf{D}}, \widehat{H}_0]$. En déduire que :

$$i\hbar \frac{Ze^2}{m_e} \langle \mathrm{e}|\widehat{\mathbf{\Pi}}|\mathrm{f}\rangle = (\mathrm{E_f} - \mathrm{E_e}) \langle \mathrm{e}|\widehat{\mathbf{D}}|\mathrm{f}\rangle,$$

$|\mathrm{e}\rangle$ et $|\mathrm{f}\rangle$ étant deux états stationnaires quelconques.

(c) En introduisant la relation de fermeture dans 3.a) et en utilisant 3.b), montrer pour finir que :

$$\frac{2m_e}{Ze^2\hbar^2} \sum_{\mathrm{e}} (E_{\mathrm{e}} - E_{\mathrm{f}}) |\langle \mathrm{e}|\widehat{\mathrm{D}}_{\mathrm{x}}|\mathrm{f}\rangle|^2 = 1.$$

4. En utilisant les questions précédentes, donner l'expression de la perte d'énergie δE de la particule incidente.