ESPCI Deuxième année Année 2004-2005
Méthodes Mathématiques
Cyrille Barreteau
http ://www-drecam.cea.fr/Images/Pisp/cbarreteau/cbarreteau_fr.html
cbarreteau@cea.fr

Tutorat no 5
Diffusion par un milieu inhomogène

Résumé

Le terme diffusion couvre un vaste champ de phénomènes associés à l'interaction d'une onde avec un "milieu matériel". Dans ce tutorat nous nous restreindrons au cas où la "réponse" du milieu est linéaire et indépedante du temps. De plus dans toute la suite nous considérerons des ondes monochromatiques et par conséquent la dépendance en fréquence sera omise. D'autre part nous nous limiterons à une onde scalaire $\Psi(\mathbf{r})$ qui vérifie l'équation :

$$\Delta\Psi(\mathbf{r})+k^2n^2(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})=0$$

$k=\omega/c$ et $n(\mathbf{r})$ est l'indice du milieu. L'équation peut se mettre sous la forme :

$$\Delta\Psi(\mathbf{r})+k^2\Psi(\mathbf{r})=\mathcal{V}(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) \quad \text{où} \quad \mathcal{V}(\mathbf{r})=k^2(1-n^2(\mathbf{r})) \tag{1}$$

L'équation 1 est une équation de diffusion par un potentiel $\mathcal{V}(\mathbf{r})$ que l'on rencontre dans des situations très diverses. Il est aussi bon de noter que cette équation est exactement équivalente à l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour des particules non relativistes.

1 Equation de Helmholtz et Fonctions de Green

On appelle équation de Helmholtz le cas où le potentiel est nul c'est à dire l'équation :

$$(\Delta+k^2)\Psi(\mathbf{r})=0 \tag{2}$$

1.1 Solutions particulières

Vérifier que les ondes planes sont solution de l'équation de Helmholtz.

1.2 Fonctions de Green de l'équation de Laplace

On considère le cas $k=0$. On note G_0 la fonction de Green de l'équation de Laplace :

$$\Delta G_0(\mathbf{r})=\delta(\mathbf{r})$$

Avec pour condition à l'infini $G_0(\mathbf{r})\to 0$ quand $|\mathbf{r}|\to\infty$.
Soit S_R une sphère de rayon R centrée en $\mathbf{r}=0$. Utliser le théorème de la divergence pour montrer que :

$$\int_{S_R}\nabla G_0(\mathbf{r}).\mathbf{n}dS=1$$

Le problème étant à symétrie sphérique on cherche des solution sous la forme $G_0(|\mathbf{r}|) = G_0(r)$. En déduire que G_0 vérifie l'équation :

$$4\pi r^2 \frac{dG_0}{dr}\bigg|_{r=R} = 1$$

Par intégration on trouve ainsi :

$$G_0(r) = -\frac{1}{4\pi r}$$

1.3 Fonctions de Green de l'équation de Helmholtz

On cherche à présent à calculer la fonction de Green de l'équation de Helmholtz, c'est à dire les fonctions $G(\mathbf{r})$ vérifiant l'équation :

$$(\Delta + k^2)G(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) \tag{3}$$

Avec pour condition à l'infini $G(\mathbf{r}) \to 0$ quand $|\mathbf{r}| \to \infty$. On cherche les solutions à symétrie sphérique $G(r)$. On introduit les fonctions :

$$G_\pm(r) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ikr}}{r} \tag{4}$$

Montrez que les fonctions G_+ et G_- sont bien des fonctions de Green de l'équation de Helmholtz[1].
On pourra penser à décomposer e^{ikr}/r en deux termes $(e^{ikr} - 1)/r + 1/r$.

1.4 Ondes sortantes et ondes rentrantes

On a obtenu deux solutions linéairement indépendantes G_+ et G_-. Commenter leur forme. A quelle situation physique correspondent-elles respectivement ?
Démontrer que l'une des solutions appelée onde sortante vérifie la relation suivante (dite condition de rayonnement) :

$$\lim_{R\to\infty} R\left(\frac{\partial\Psi}{\partial r} - ik\Psi\right)_{r=R} = 0$$

2 solution générale de l'équation de diffusion

On considère le problème de la diffusion par un potentiel localisé dans un volume V. On suppose qu'une onde plane Ψ_0 arrive de l'infini sur le centre diffuseur.

[1]On rappelle l'expression du Laplacien en coordonnées spheriques pour des fonctions à symétriques sphériques :

$$\Delta\Psi = \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\Psi)$$

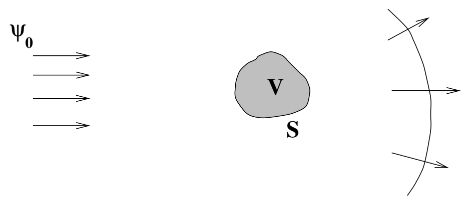

FIG. 1 – *Représentation schématique de la diffusion d'une onde plane par un centre diffuseur.*

On écrit la solution générale sous la forme :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathbf{r}) + \Psi_s(\mathbf{r})$$

Où Ψ_s est l'onde diffusée.

2.1 Une relation importante

Démontrer la relation suivante :

$$G_+(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\Delta\Psi_s(\mathbf{r}) - \Psi_s(\mathbf{r})\Delta G_+(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = G_+(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathcal{V}(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) - \Psi_s(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

2.2 Théorème de Green

Soient deux fonctions f et g et un volume Ω limité par une surface Σ, démontrer le théorème de Green :

$$\int_\Omega (f\Delta g - g\Delta f) d^3r = \oint_\Sigma (f\nabla g - g\nabla f).d\Sigma$$

2.3 La solution générale

Soit S_R une sphère de rayon R entourant le volume V.

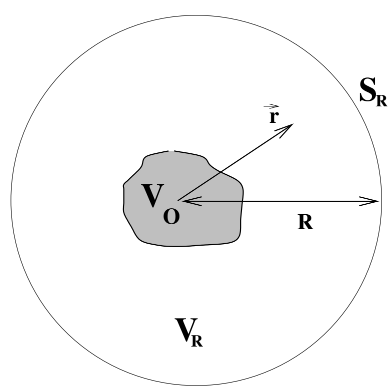

FIG. 2 – *Sphère S_R enmtourant le volume V diffusant*

Démontrer la formule :

$$\Psi_s(\mathbf{r}) = \int_V G_+(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathcal{V}(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}')d^3r' + \int_{S_R}\Big(\Psi_s(\mathbf{r}')\nabla G_+(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - G_+(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\nabla\Psi_s(\mathbf{r}')\Big).\mathbf{n}.dS'$$

Où $\mathbf{r}$ est un point intérieur au volume V_R enfermé par la sphère S_R.

2.4 Condition de rayonnement et formule intégrale de la diffusion

Démontrer que si Ψ vérifie la condition de rayonnement alors l'intégrale de surface tend vers zéro quand le rayon de la sphère tend vers l'infini. En déduire la formule intégrale de la diffusion :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathbf{r}) + \int_V G_+(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathcal{V}(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}')d^3r' \tag{5}$$

3 Comportement asymptotique

On considère le cas où le point M de position $\mathbf{r}$ est très éloigné des points P (position $\mathbf{r}'$) intérieurs à la zone d'action du potentiel dont les dimensions linéaires sont de l'ordre de L. Soit $r \gg L$ et $r' \leq L$.

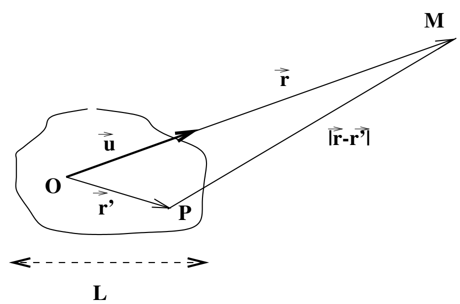

FIG. 3 – *Point M éloigné du centre diffuseur.*

Soit $\mathbf{u}$ le vecteur unitaire dans la direction de $\mathbf{r}$. Montrer que l'on a :

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \simeq r - \mathbf{u}.\mathbf{r}'$$

Montrer que l'onde $\Psi(\mathbf{r})$ peut se mettre sous la forme :

$$\Psi(\mathbf{r}) \underset{r\to\infty}{\simeq} \Psi_0(\mathbf{r}) + f_d(\mathbf{u})\frac{e^{ikr}}{r}$$

Avec :

$$f_d(\mathbf{u}) = -\frac{1}{4\pi}\int_V e^{-ik\mathbf{u}.\mathbf{r}'}\mathcal{V}(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}')d^3r'$$

f_d s'appelle l'amplitude de diffusion et le vecteur $\mathbf{k}_d = k\mathbf{u}$ est le vecteur d'onde diffusé.

4 Première approximations de Born

Comme vous avez pu le constater l'équation (5) est une équation intégrale qui ne résoud pas notre problème car la fonction Ψ se trouve dans les deux membres de l'équation. Par contre la formule (5) est un bon point de départ pour le développement de solutions approchées.

Montrer qu'au premier ordre en $\mathcal{V}$ (première approximation de Born) on a :

$$\Psi(\mathbf{r}) \simeq \Psi_0(\mathbf{r}) + \int_V G_+(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathcal{V}(\mathbf{r}')\Psi_0(\mathbf{r}')d^3r' \tag{6}$$

On suppose que l'onde incidente est une onde plane $\Psi_0(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_i.\mathbf{r})$. Montrer que l'amplitude de diffusion f_d peut s'écrire comme la transformée de Fourier $\mathcal{F}[\mathcal{V}]$ du potentiel $\mathcal{V}$.

$$f_d = f(\mathbf{K}) = -\frac{1}{4\pi}\mathcal{F}[\mathcal{V}](\mathbf{K})$$

Où $\mathbf{K}$ est le vecteur $\mathbf{k}_d - \mathbf{k}_i$, appelé vecteur d'onde transféré, les vecteurs $\mathbf{k}_i$ et $\mathbf{k}_d$ étant de même norme. La sphère de centre l'orgine du vecteur $\mathbf{k}_i$ et de rayon $|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_d| = k$ est appelée sphère d'Ewald.

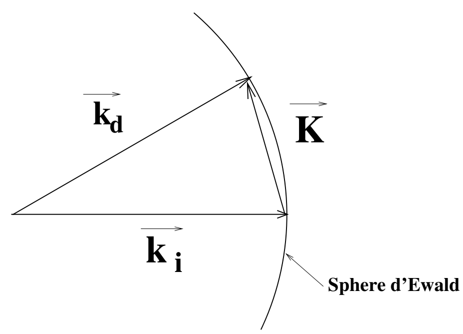

FIG. 4 – *Sphère d'Ewald*