Cours 2
Eléments de théorie de la diffusion

Jean Dalibard

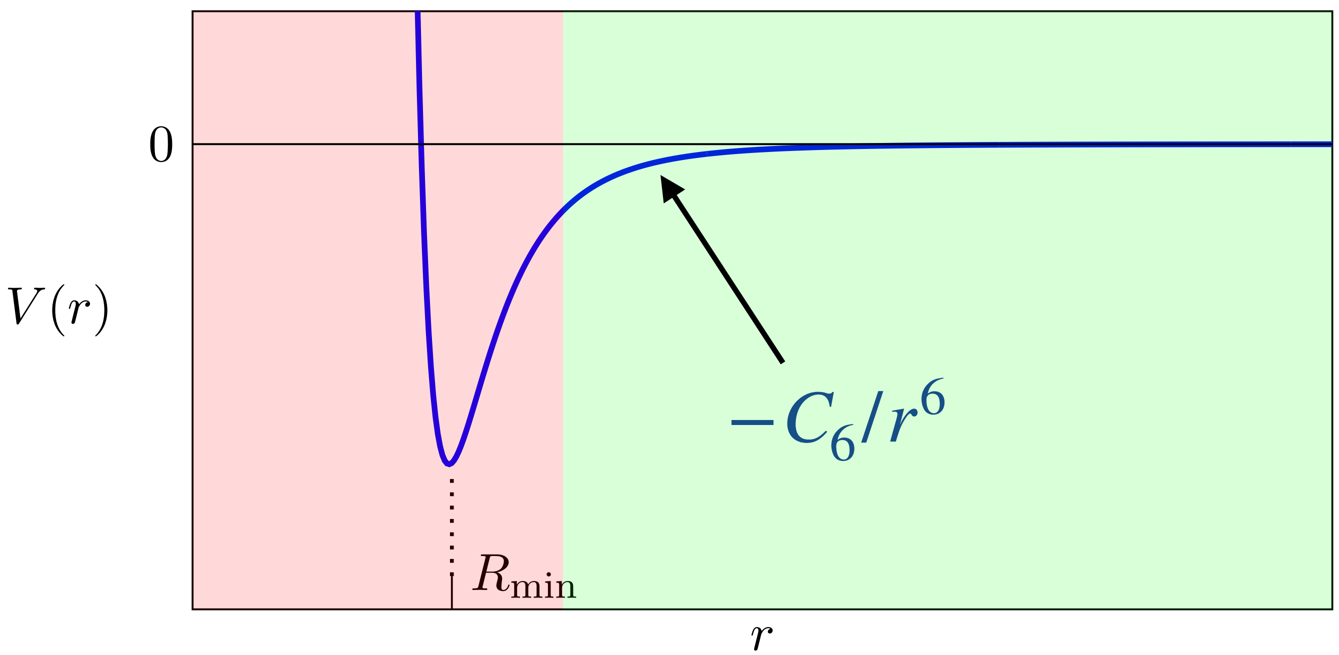
Chaire *Atomes et rayonnement*

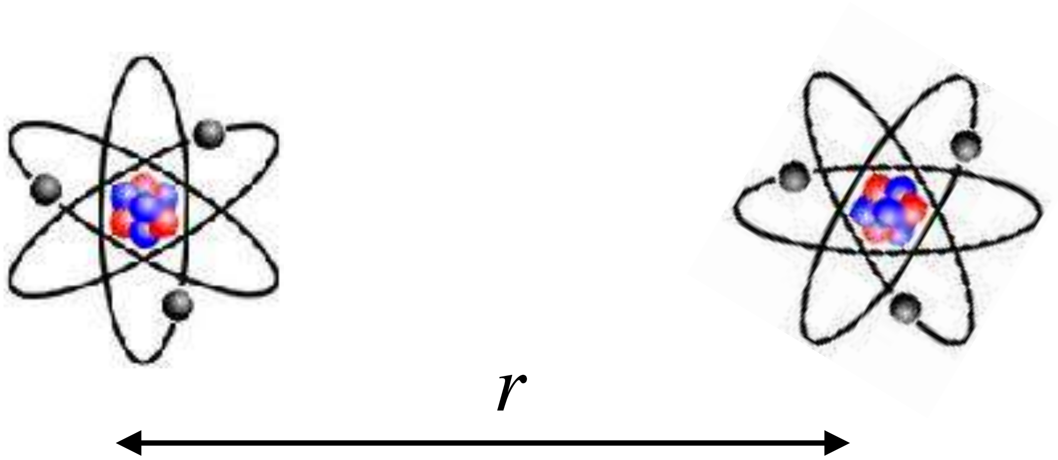
Année 2020-21

COLLÈGE DE FRANCE
1530

Le but de ce cours

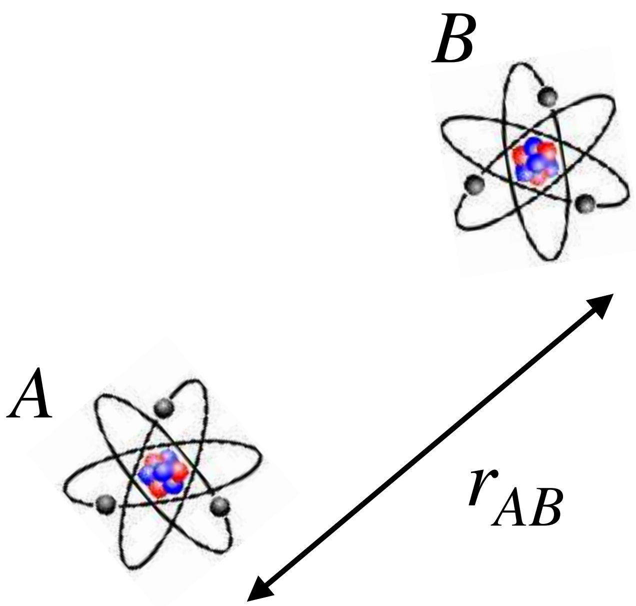
Potentiel d'interaction entre deux atomes neutres (état électronique fondamental)





Comment traiter une collision entre deux atomes interagissant via ce potentiel ?

- Formalisme général : aujourd'hui
- Simplifications émergeant à basse énergie : cours suivant



L'invariance par rotation

Si on néglige l'interaction dipôle-dipôle magnétique, le potentiel d'interaction vérifie :

$$V(\boldsymbol{r}_A, \boldsymbol{r}_B) = V(r_{AB})$$

Conservation du moment cinétique relatif, associé au nombre quantique ℓ

Traitement via un développement en ondes partielles :

Un canal de collision (découplé des autres) par valeur de ℓ

Caractérisation par le déphasage $\delta_\ell(k)$ *(*k *: nombre d'onde relatif)*

Simplifie la prise en compte de l'indiscernabilité

Bosons sans spin (ou polarisés) : ℓ **pair** **Fermions polarisés :** ℓ **impair**

1.

Les états stationnaires de diffusion

$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$: *états propres particuliers de l'hamiltonien total associés à un vecteur d'onde incident* $\boldsymbol{k}$

Le problème à deux corps (classique ou quantique)

Hamiltonien : $$H_{\text{tot}} = \frac{\boldsymbol{p}_A^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{p}_B^2}{2m} + V(|\boldsymbol{r}_A - \boldsymbol{r}_B|)$$

Séparation “centre de masse - variable relative”

$$\boldsymbol{R} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_A + \boldsymbol{r}_B) \qquad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_A - \boldsymbol{r}_B$$

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p}_A + \boldsymbol{p}_B \qquad \boldsymbol{p} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{p}_A - \boldsymbol{p}_B)$$

respecte les crochets de Poisson ou les commutateurs $[\hat{r}_\alpha, \hat{p}_\beta] = \mathrm{i}\hbar\,\delta_{\alpha\beta}$

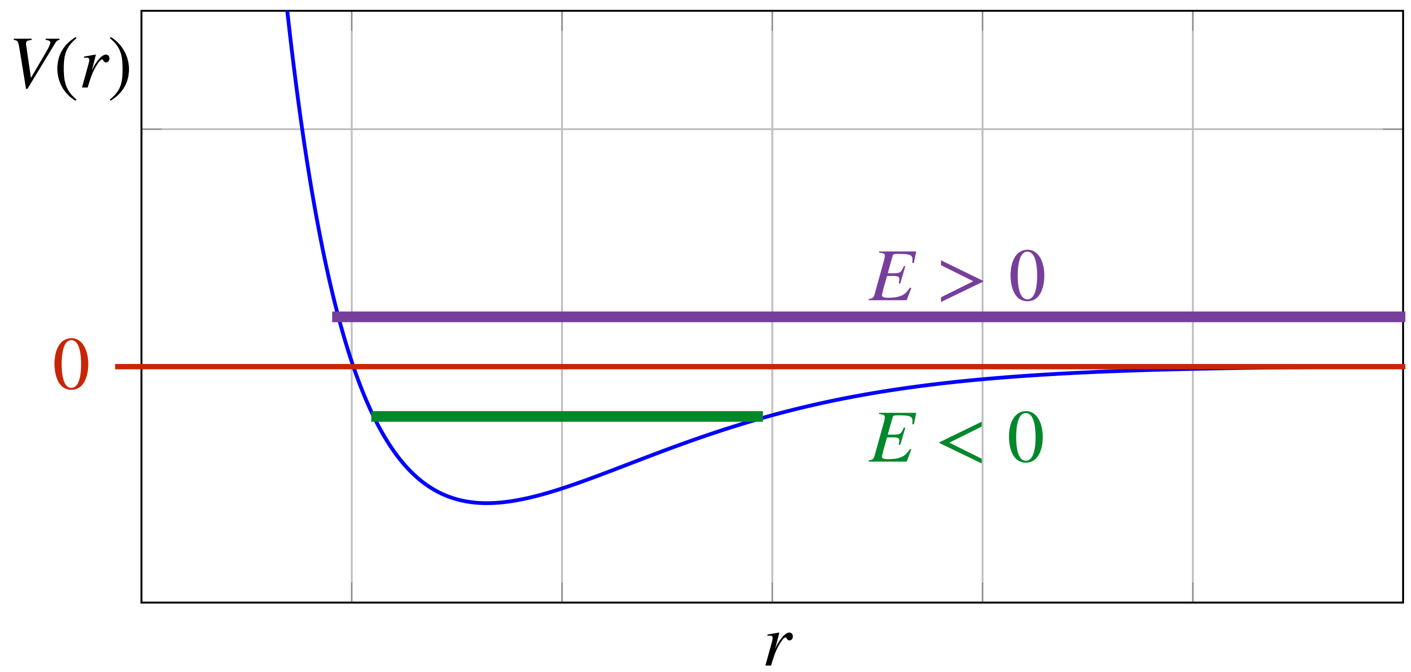
Réécriture de l’hamiltonien total : $H_{\text{tot}} = H_{\text{cdm}} + H_{\text{rel}}$

$$H_{\text{cdm}} = \frac{\boldsymbol{P}^2}{4m} \qquad H_{\text{rel}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_{\text{r}}} + V(r)$$

mouvement libre d’une particule de masse $2m$

mouvement à étudier d’une particule de masse $m_{\text{r}} = m/2$

Etats de diffusion vs. états liés



$E > 0$: états de diffusion, les deux atomes sont asymptotiquement libres

Spectre continu : on posera $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m_{\mathrm{r}}}$ *où* $k > 0$ *est un nombre d'onde*

$E < 0$: états liés, formation d'un dimère

Spectre discret, noté E_n *, où chaque* n *correspond à un état de vibration*

Etats d'énergie bien définie

On cherche les états propres de l'hamiltonien relatif d'énergie positive

$$\hat{H}\,\psi(\boldsymbol{r}) = E\,\psi(\boldsymbol{r}) \qquad \text{avec} \qquad \hat{H} \equiv \hat{H}_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\text{r}}}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})$$

En posant $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{r}}}$, on obtient

$$\frac{\hbar^2}{2m_{\text{r}}}\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi(\boldsymbol{r}) = V(\boldsymbol{r})\,\psi(\boldsymbol{r})$$

considérée comme une équation différentielle avec le second membre $V(\boldsymbol{r})\,\psi(\boldsymbol{r})$

On commence par s'intéresser d'abord à l'équation sans second membre ("libre") :

$$\frac{\hbar^2}{2m_{\text{r}}}\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi(\boldsymbol{r}) = 0$$

Solutions particulières : ondes planes $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$

Utilisation de la fonction de Green libre

On veut résoudre $\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{r}}\left(\nabla^2+k^2\right)\psi(\boldsymbol{r}) \;=\;$ terme source $S(\boldsymbol{r})$

On cherche d'abord la fonction de Green $\mathscr{G}_0(\boldsymbol{r})$ satisfaisant

$$\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{r}}\left(\nabla^2+k^2\right)\mathscr{G}_0(\boldsymbol{r}) = \delta(\boldsymbol{r})$$

Solutions : $\mathscr{G}_0^{(\pm)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{m_\mathrm{r}}{2\pi\hbar^2}\,\frac{\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}kr}}{r}$ et on va utiliser $\mathscr{G}_0^{(+)}$

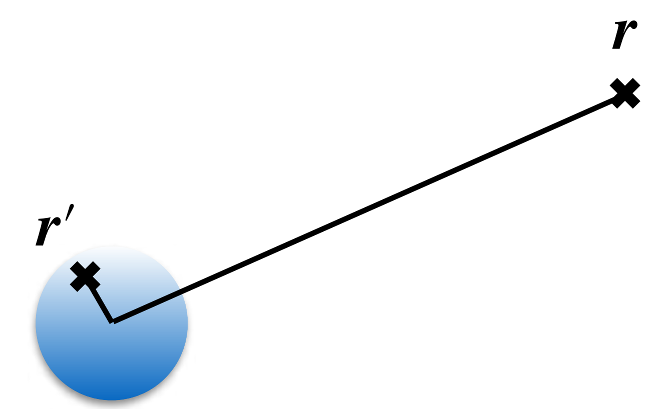
$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \int \mathscr{G}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\;S(\boldsymbol{r}')\;\mathrm{d}^3r'$$

solution de l'équation libre

solution particulière de l'équation avec second membre

Equation intégrale de la diffusion (Lippmann-Schwinger)

Le terme source est ici $S(\boldsymbol{r}) = V(\boldsymbol{r})\,\psi(\boldsymbol{r})$:



$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \int \mathscr{G}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\; V(\boldsymbol{r}')\; \psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}(\boldsymbol{r}')\; \mathrm{d}^3 r'$$

état stationnaire de diffusion

Equation implicite mais dont l'intérêt est bien réel dès que $V(\boldsymbol{r})$ a une portée limitée

Relie la valeur de ψ en un point $\boldsymbol{r}$ arbitraire aux valeurs de $\psi(\boldsymbol{r}')$ en des points $\boldsymbol{r}'$ où $V(\boldsymbol{r}')$ prend des valeurs significatives

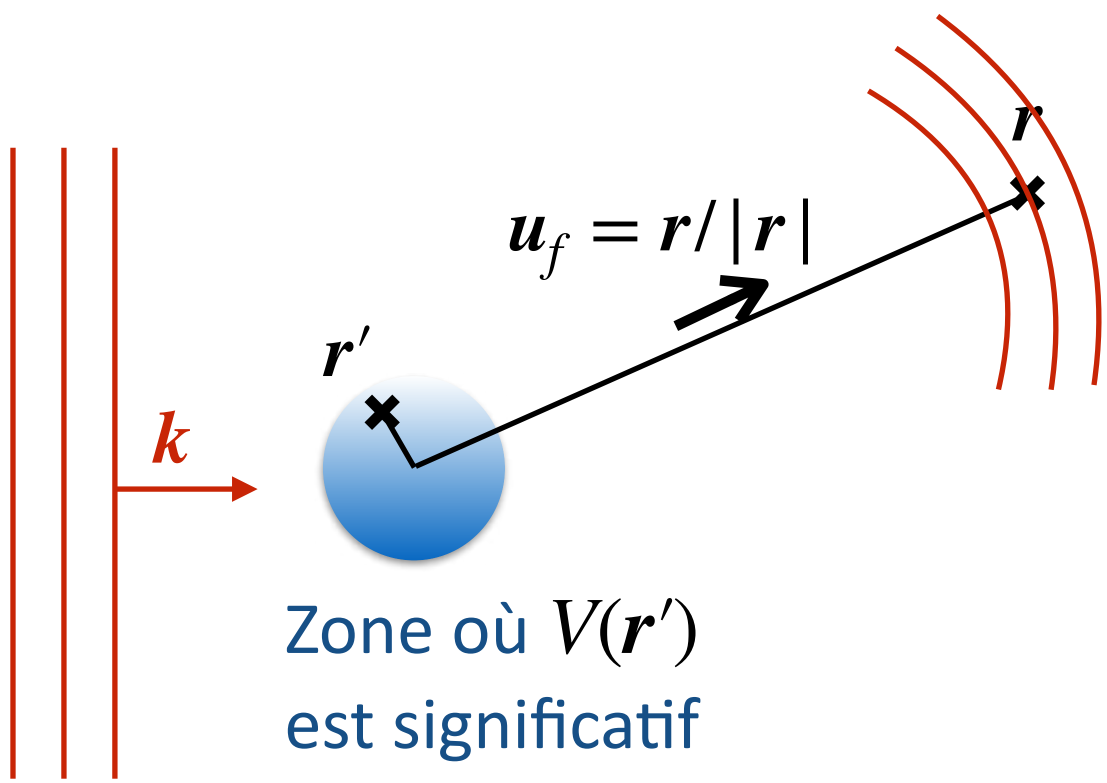
- Equation de Fredholm du second type : solution unique
- L'ensemble des $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}$ ainsi obtenu est orthonormé
- On peut faire la même chose avec $\mathscr{G}_0^{(-)}$ et définir l'ensemble des $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}$

Forme asymptotique d'un état stationnaire de diffusion

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \int \mathscr{G}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\; V(\boldsymbol{r}')\; \psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}')\; \mathrm{d}^3 r'$$

$$= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - \frac{m_\mathrm{r}}{2\pi\hbar^2}\int \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\; V(\boldsymbol{r}')\; \psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}')\; \mathrm{d}^3 r'$$

$$\mathscr{G}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{m_\mathrm{r}}{2\pi\hbar^2}\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$



Développement aux grands r

$$\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \sim \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\,\boldsymbol{u}_f\cdot\boldsymbol{r}'} \qquad \text{pour } r \to \infty$$

qui conduit à :

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{u}_f)\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$

onde plane incidente

onde sphérique sortante

amplitude de diffusion (facteur angulaire)

$$-\frac{m_\mathrm{r}}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\boldsymbol{u}_f\cdot\boldsymbol{r}'}\; V(r')\; \psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}')\; \mathrm{d}^3 r'$$

L'approximation de Born

Développement perturbatif en puissances du potentiel $V(\vec{r})$

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \underbrace{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}_{\text{ordre } 0} + \int \mathscr{G}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\, \underbrace{V(\boldsymbol{r}')\, \psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}')}_{\text{ordre } \geq 1}\, \mathrm{d}^3 r'$$

Si on se limite à l'ordre 1 inclus en V, on a:

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \int \mathscr{G}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\, V(\boldsymbol{r}')\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}\, \mathrm{d}^3 r'$$

que l'on peut itérer pour aller à des ordres arbitrairement élevés :

$$\begin{aligned}\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} &+ \int \mathscr{G}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\, V(\boldsymbol{r}')\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}\, \mathrm{d}^3 r' \\ &+ \iint \mathscr{G}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\, V(\boldsymbol{r}')\, \mathscr{G}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')\, V(\boldsymbol{r}'')\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}''}\, \mathrm{d}^3 r'\, \mathrm{d}^3 r'' \\ &+ \ldots\end{aligned}$$

Critères de convergence subtils… A basse énergie, une condition nécessaire est l'absence d'états liés dans le potentiel $V(\boldsymbol{r})$

2.

La formulation opératorielle

Formulation qui permet de traiter également des problèmes dépendant du spin, la diffusion de photons par des atomes ou de phonons par des défauts cristallins

L'opérateur de Green $\hat{G}_0$

Formulation opératorielle pour la résolution de $\left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$:

$$\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{r}}\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi(\boldsymbol{r}) = V(\boldsymbol{r})\,\psi(\boldsymbol{r}) \quad \longleftrightarrow \quad \left(E - \hat{H}_0\right)|\psi\rangle = \hat{V}|\psi\rangle$$

avec $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m_\mathrm{r}$

Etat stationnaire de diffusion :

$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \int \mathscr{G}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\;V(\boldsymbol{r}')\;\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}(\boldsymbol{r}')\;\mathrm{d}^3r' \quad \longleftrightarrow \quad |\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle + \hat{G}_0^{(+)}(E)\hat{V}|\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}\rangle$$

avec : $\langle \boldsymbol{r}|\,\hat{G}_0^{(+)}|\boldsymbol{r}'\rangle = \mathscr{G}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ $\qquad$ $\hat{G}_0^{(+)}(E) = \dfrac{1}{E - \hat{H}_0 + \mathrm{i}0_+}$

La limite 0_+ est à comprendre au sens des distributions :

$$\frac{1}{x - x_0 + \mathrm{i}0_+} = \mathscr{P}\mathscr{P}\left(\frac{1}{x - x_0}\right) - \mathrm{i}\pi\delta(x - x_0)$$

L'opérateur de Green $\hat{G}$

Passage de $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m_\mathrm{r}$ à $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$

$$\hat{G}_0^{(+)}(E) = \frac{1}{E - \hat{H}_0 + \mathrm{i}0_+} \qquad \hat{G}^{(+)}(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + \mathrm{i}0_+}$$

Algèbre très simple : $\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}\hat{V}\hat{G}_0 \quad = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}$ *relations implicites entre opérateurs*

Ces relations peuvent être itérées à l'infini:

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \hat{G}_0(\hat{V}\hat{G}_0)^2 + \ldots$$

à la base du développement de Born

$$|\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle + \hat{G}_0 \hat{V} |\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle$$

La matrice de transfert $\hat{T}(E)$

En terme opératoriel, le développement de Born s'écrit

$$|\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle \;=\; |\boldsymbol{k}\rangle \;+\; \hat{G}_0\hat{V}|\boldsymbol{k}\rangle \;+\; (\hat{G}_0\hat{V})^2|\boldsymbol{k}\rangle + (\hat{G}_0\hat{V})^3|\boldsymbol{k}\rangle \;+\; \dots$$

On introduit l'opérateur $\quad \hat{T}(E) \;=\; \hat{V} \;+\; \hat{V}\,\hat{G}_0(E)\,\hat{V} \;+\; \hat{V}\,(\hat{G}_0(E)\,\hat{V})^2 + \dots$

de sorte que : $\quad |\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle + \hat{G}_0\hat{T}|\boldsymbol{k}\rangle$

On a transféré le problème de la resommation de la série infinie de $|\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle$ *à* $\hat{T}$

La relation itérative entre $\hat{G}$ et $\hat{G}_0$

$$\hat{G} \;=\; \hat{G}_0 \;+\; \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 \;+\; \hat{G}_0(\hat{V}\hat{G}_0)^2 \;+\; \dots \qquad\qquad \hat{G}(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + \mathrm{i}0_+}$$

conduit à $\quad \hat{T}(E) \;=\; \hat{V} \;+\; \hat{V}\hat{G}(E)\hat{V}$

pôle de $\hat{G}(E)$ (*i.e.* état lié de $\hat{H}$) $\longrightarrow$ pôle de $\hat{T}(E)$ $\longrightarrow$ pôle de l'amplitude de diffusion

Une série d'expressions utiles

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\mathrm{r}}$$

Le point de départ pour un état stationnaire de diffusion

$$|\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle + \hat{G}_0 \hat{V} |\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle \qquad \hat{G}_0 \equiv \hat{G}_0(E) = \frac{1}{E - \hat{H}_0 + \mathrm{i}0_+}$$

peut être transformé en

$$|\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle + \hat{G}_0 \hat{T} |\boldsymbol{k}\rangle \qquad \hat{T} \equiv \hat{T}(E) = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}(E)\hat{V}$$

et

$$|\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle + \hat{G} \hat{V} |\boldsymbol{k}\rangle \qquad \hat{G} \equiv \hat{G}(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + \mathrm{i}0_+}$$

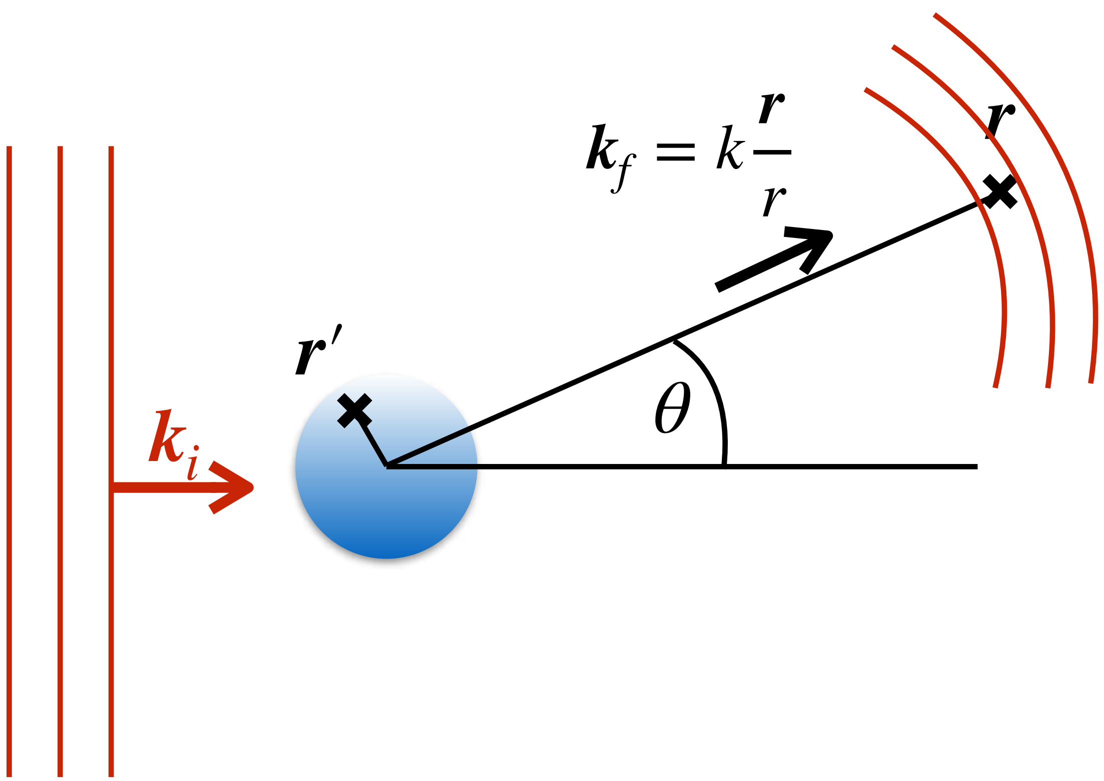
Pas de miracle ! Chacune de ces expressions contient un terme difficile à évaluer…

3.

L'amplitude de diffusion et le théorème optique

Retour sur la forme d'un état stationnaire de diffusion

On considère un potentiel diffusant V invariant par rotation : $V(r)$



$$\psi_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r}) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}} \; + \; f(k,\theta)\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$

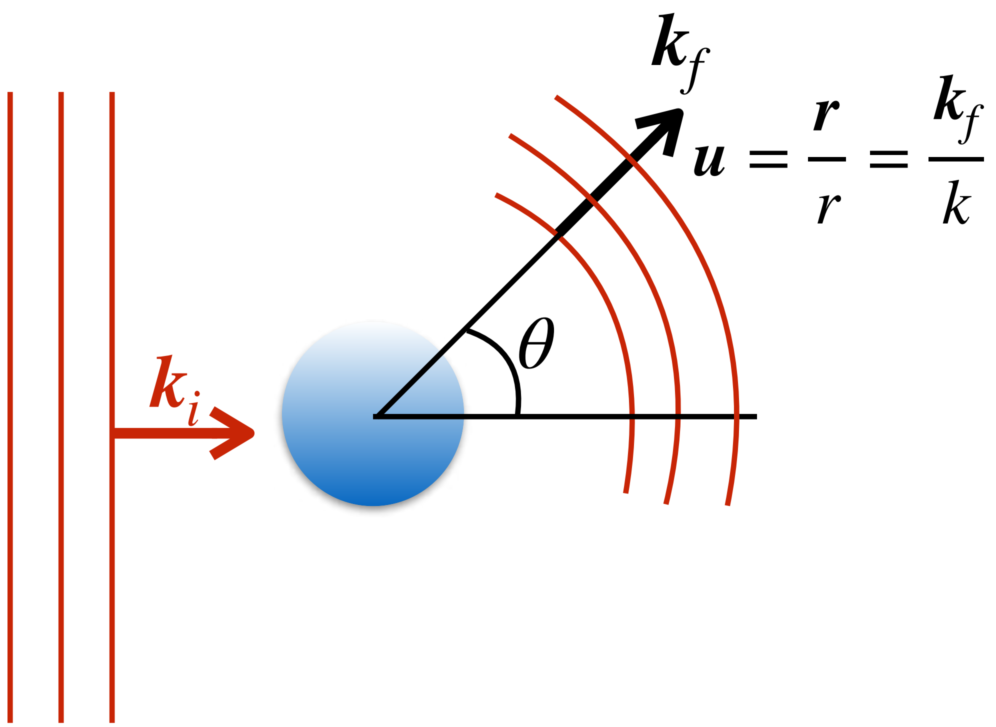
$$\sim \psi^{(\mathrm{inc})} + \psi^{(\mathrm{dif})}$$

amplitude de diffusion :

$$f(k,\theta) = -\frac{m_{\mathrm{r}}}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{r}'}\; V(r')\; \psi_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r}')\; \mathrm{d}^3r'$$

$$= -\frac{m_{\mathrm{r}}}{2\pi\hbar^2}\langle \boldsymbol{k}_f|\,\hat{T}\,|\boldsymbol{k}_i\rangle$$

Section efficace de diffusion



Flux incident dans la direction $\boldsymbol{k}_i$

particules/(m² x seconde)

Flux sortant autour d'un angle solide Ω donné

particules/seconde

Rapport des deux flux (surface): $\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}(\Omega)$

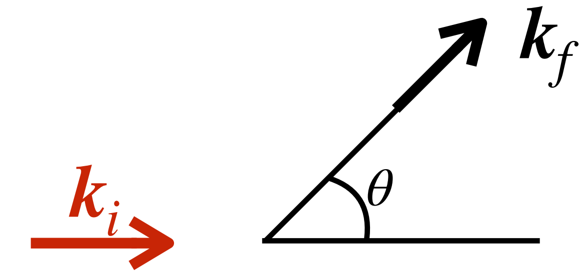
Flux évalués à partir du courant de probabilité pour l'état $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim \psi^{(\mathrm{inc})} + \psi^{(\mathrm{dif})}$

formule générale : $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left\{\psi^*(\boldsymbol{r})\,\nabla\left[\psi(\boldsymbol{r})\right]\right\}$

$$\boldsymbol{J}^{(\mathrm{inc})}(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar \boldsymbol{k}_i}{m_\mathrm{r}}$$

$$\boldsymbol{J}^{(\mathrm{dif})}(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar k}{m_\mathrm{r}}\,|f(k,\theta)|^2\,\frac{\boldsymbol{u}}{r^2} \longrightarrow \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}(\Omega) = |f(k,\theta)|^2$$

Le théorème optique



On a donné la forme asymptotique de l'état de diffusion

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + f(k,\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$

mais toute fonction complexe $f(k,\theta)$ n'est pas éligible !

Une contrainte forte provient de l'unitarité de toute évolution quantique

Conservation de la probabilité : $\nabla\cdot\boldsymbol{J} + \dfrac{\partial\rho}{\partial t} = 0 \qquad \rho = |\psi|^2$

Pour un état propre de l'hamiltonien (état stationnaire): $\nabla\cdot\boldsymbol{J} = 0$

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim \psi^{(\mathrm{inc})} + \psi^{(\mathrm{dif})}$$

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left\{\psi^*(\boldsymbol{r})\,\nabla\left[\psi(\boldsymbol{r})\right]\right\} \longrightarrow \boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}^{(\mathrm{inc})} + \boldsymbol{J}^{(\mathrm{dif})} + \boldsymbol{J}^{(\mathrm{interf})}$$

Après un calcul relativement long : $0 \;+\; \dfrac{k}{4\pi}\sigma_{\mathrm{tot}} \;-\; \mathrm{Im}\left[f(k,\theta=0)\right] = 0$

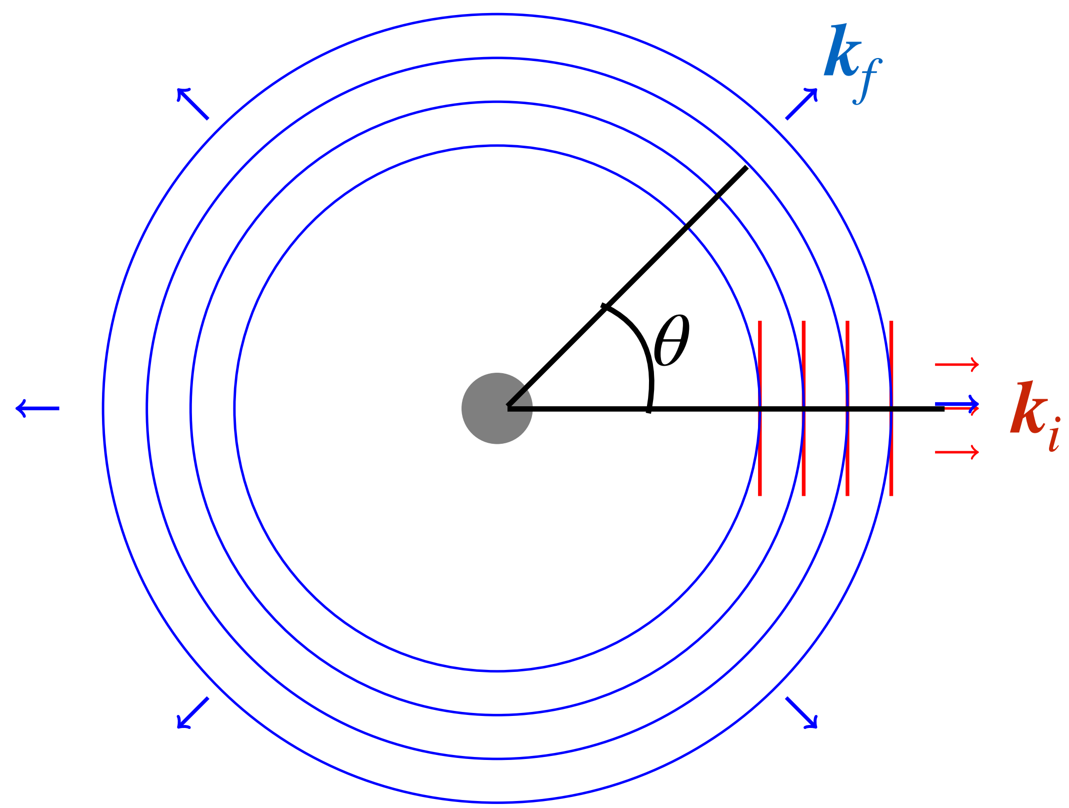
$$\sigma_{\mathrm{tot}} = \int \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\,\mathrm{d}^2\Omega = 2\pi\int_0^{\pi} |f(k,\theta)|^2\,\sin\theta\,\mathrm{d}\theta$$

section efficace totale

Signification du théorème optique

$$\frac{k}{4\pi}\sigma_{\text{tot}} = \text{Im}\left[f(k, \theta = 0)\right]$$

Rien ne se perd, rien ne se crée...



$$\psi_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r}) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}} \;+\; f(k,\theta)\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$

Les particules diffusées dans des directions $\boldsymbol{k}_f \neq \boldsymbol{k}_i$ sont prélevées sur le faisceau incident, qui est donc atténué

Cette atténuation semble absente de l'expression de $\psi_{\boldsymbol{k}}$, mais elle se cache dans l'interférence (destructive) "vers l'avant", c'est-à-dire pour $\theta = 0$

$$\text{Im}\left[f(k,\theta=0)\right] = \frac{k}{4\pi}\sigma_{\text{tot}}$$

Le théorème optique dans le cas isotrope

On suppose que $f(k,\theta) = f(k)$, ce qui est bien vérifié à basse énergie [cf. cours 3]

$$\sigma_{\text{tot}} = 2\pi\int_0^{\pi} |f(k)|^2 \ \sin\theta \ \mathrm{d}\theta = 4\pi|f(k)|^2$$

Le théorème optique s'écrit alors : $\text{Im}\left[f(k)\right] = k\,|f(k)|^2$

ou encore : $\text{Im}\left[\dfrac{1}{f(k)}\right] = -k \longrightarrow \dfrac{1}{f(k)} = \text{fonction reelle}(k) \ - \ \mathrm{i}k$

Impose une borne supérieure à la section efficace :

$$\frac{1}{|f(k)|} \geq k \qquad \Rightarrow \qquad \sigma_{\text{tot}} = 4\pi|f(k)|^2 \leq \frac{4\pi}{k^2}$$

limite unitaire

4.

La symétrie de rotation

La conservation du moment cinétique

Si $V(\boldsymbol{r}) = V(|\boldsymbol{r}|)$, alors $\hat{H}$ et $\hat{L}_i$ (avec $i = x, y, z$) commutent

on peut diagonaliser simultanément $\hat{H},\ \hat{L}^2,\ \hat{L}_z$

Imposer à $\psi(r, \theta, \varphi)$ d'être état propre de $\hat{L}^2,\ \hat{L}_z$ détermine sa partie angulaire :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r)\, Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$$

partie radiale quelconque

harmonique sphérique

Deux nombres quantiques : $\ell \geq 0,\quad m \in \{-\ell, -\ell + 1, \ldots, \ell\}$

$$\hat{L}^2\psi = \hbar^2 \ell(\ell + 1)\, \psi \qquad\qquad \hat{L}_z\psi = \hbar m\, \psi$$

Un cas particulier important : les états "s" tels que $\ell = m = 0$
correspondent à $Y_{0,0}$ constante, donc un état $\psi(\boldsymbol{r})$ isotrope

L'équation radiale

On injecte $\psi(r,\theta,\varphi) = \chi(r)\, Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ dans l'équation de Schrödinger

$$\left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m_\mathrm{r}} + V(r)\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\,\psi(\boldsymbol{r})$$

en utilisant $$\hat{\boldsymbol{p}}^2\psi = -\frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{1}{r^2}\hat{\boldsymbol{L}}^2\psi$$

On obtient une équation pour la fonction d'onde radiale réduite $u(r) = r\,\chi(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{r}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u(r) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2m_\mathrm{r}r^2}\right]u(r) = E\,u(r)$$

Equation de Schrödinger effective sur la demi-droite $[0,+\infty[$ avec $u(0) = 0$

Canaux de diffusion

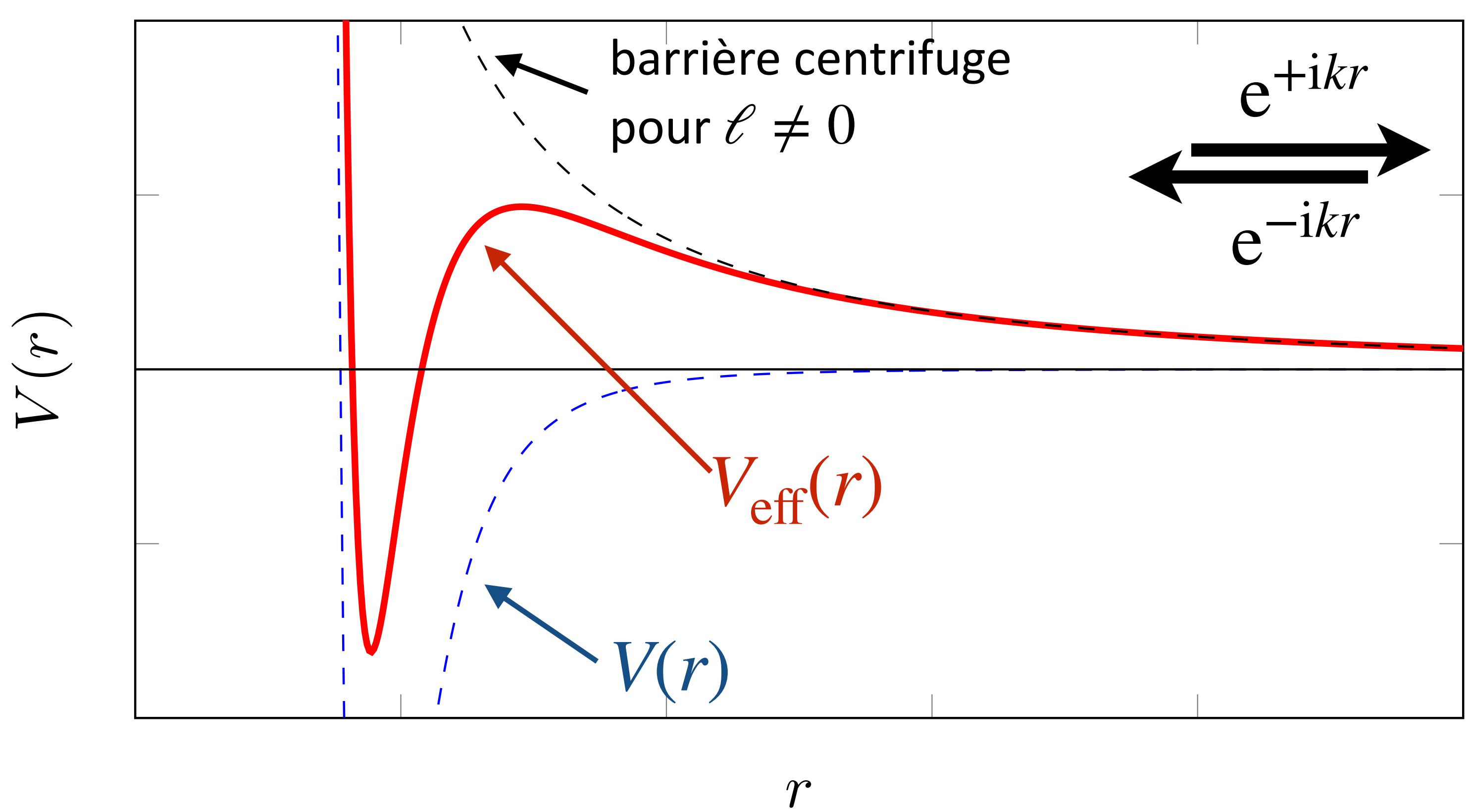
$$-\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{r}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u(r) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2m_\mathrm{r}r^2}\right] u(r) = E\, u(r)$$

Pour chaque valeur de ℓ, on a un problème de diffusion 1D dans le potentiel effectif

$$V_\mathrm{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2m_\mathrm{r}r^2}$$

"vrai" potentiel

barrière centrifuge, toujours répulsive, sauf pour le canal $\ell = 0$



Recherche des fonctions propres sous la forme [à un $(-1)^\ell$ près]

$$u_\ell(r) \sim \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr} \mp \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_\ell}\, \mathrm{e}^{+\mathrm{i}kr}$$

Toute la physique est contenue dans les déphasages $\delta_\ell(k)$

Lien entre déphasages et amplitude de diffusion

$$\xrightarrow{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr+2\delta_\ell)}}$$
$$\xleftarrow[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}]{}$$

On décompose $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + f(k,\theta)\dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$ sur les harmoniques sphériques

et on pose $$f(k,\theta) = \sum_\ell (2\ell+1)\, \underbrace{P_\ell(\cos\theta)}_{\text{polynôme de Legendre}}\, \underbrace{f_\ell(k)}_{\text{amplitude de diffusion du canal } \ell}$$

Après identification terme à terme : $\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_\ell} = 1 + 2\mathrm{i}kf_\ell \quad \longleftrightarrow \quad \dfrac{1}{f_\ell(k)} = \dfrac{k}{\tan\delta_\ell(k)} - \mathrm{i}k$

Section efficace totale : $\sigma_{\text{tot}} = \sum_\ell \sigma_\ell \quad$ avec $\quad \sigma_\ell = \dfrac{4\pi}{k^2}(2\ell+1)\sin^2\left[\delta_\ell(k)\right]$

Le théorème optique $\dfrac{k}{4\pi}\sigma_{\text{tot}} = \mathrm{Im}\left[f(k,\theta=0)\right]$ est bien satisfait !

5.

Collision de particules indiscernables

Prise en compte du principe de Pauli

On suppose que les deux partenaires de collision sont dans le même état de spin

pour la partie orbitale : $\Psi(\boldsymbol{r}_A, \boldsymbol{r}_B) = \pm\, \Psi(\boldsymbol{r}_B, \boldsymbol{r}_A)$ + : bosons, - : fermions

Pour les variables "centre de masse - coordonnée relative"

$$\boldsymbol{R} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_A + \boldsymbol{r}_B)$$

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_A - \boldsymbol{r}_B$$

Dans l'échange $\boldsymbol{r}_A \leftrightarrow \boldsymbol{r}_B$, on a $\boldsymbol{R}$ inchangé et $\boldsymbol{r} \leftrightarrow -\boldsymbol{r}$

La fonction d'onde de la variable relative doit donc satisfaire : $\psi(-\boldsymbol{r}) = \pm\, \psi(\boldsymbol{r})$

Particules indiscernables et moment cinétique relatif

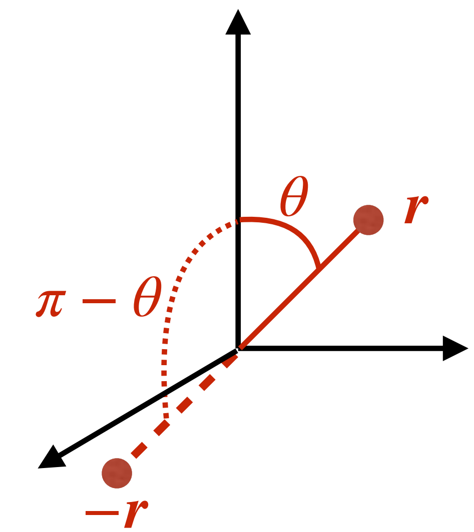
$$\psi(-\boldsymbol{r}) = \pm\,\psi(\boldsymbol{r})$$

Pour un potentiel invariant par rotation, on peut chercher ψ sous la forme

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \chi(r)\,Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$$

La passage de $\boldsymbol{r}$ à $-\boldsymbol{r}$ se décrit en coordonnées sphériques par :

$$r \to r, \quad \theta \to \pi - \theta, \quad \varphi \to \varphi + \pi$$



et les harmoniques sphériques vérifient la propriété :

$$Y_{\ell,m}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^{\ell}\,Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$$

Bilan pour des particules indiscernables polarisées en spin :

- Pour des bosons, seules les valeurs paires de ℓ sont autorisées : $\ell = 0,2,4,\ldots$
- Pour des fermions, seules les valeurs impaires de ℓ sont autorisées : $\ell = 1,3,\ldots$

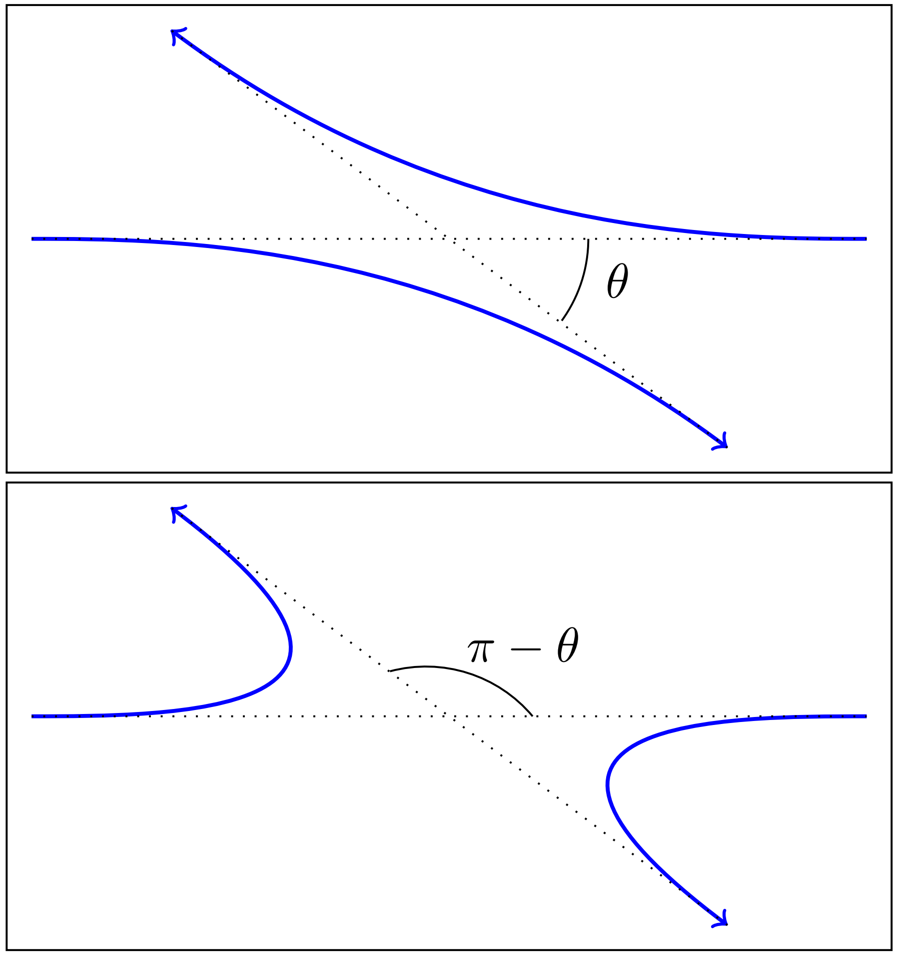
Etat de diffusion pour des particules indiscernables

La forme “standard” utilisée jusqu’ici

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \;+\; f(k,\theta)\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$

devient après symétrisation

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \pm \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right] \;+\; \frac{1}{\sqrt{2}}\left[f(k,\theta) \pm f(k,\pi-\theta)\right]\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$

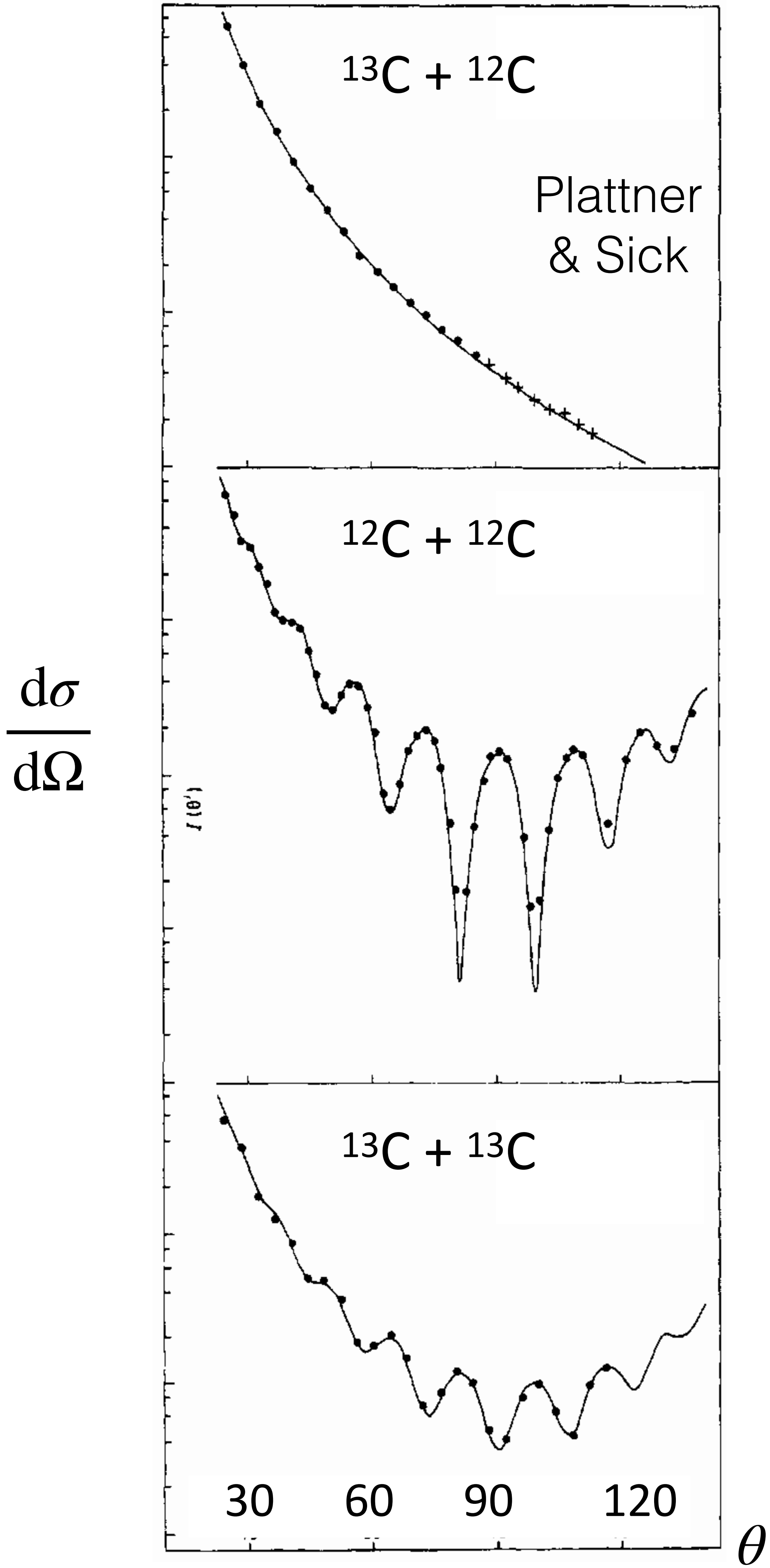


Section efficace différentielle :

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{1}{2}\left|f(k,\theta) \;\pm\; f(k,\pi-\theta)\right|^2$$

possibilité d’interférences !

Exemple : pour des fermions polarisés et $\theta = \dfrac{\pi}{2}$, il ne peut pas y avoir de diffusion



Diffusion coulombienne d'ions carbone C^{++}

^{12}C : noyau de spin nul (boson)

^{13}C : noyau de spin 1/2 (fermion)

Section efficace différentielle pour la diffusion coulombienne :

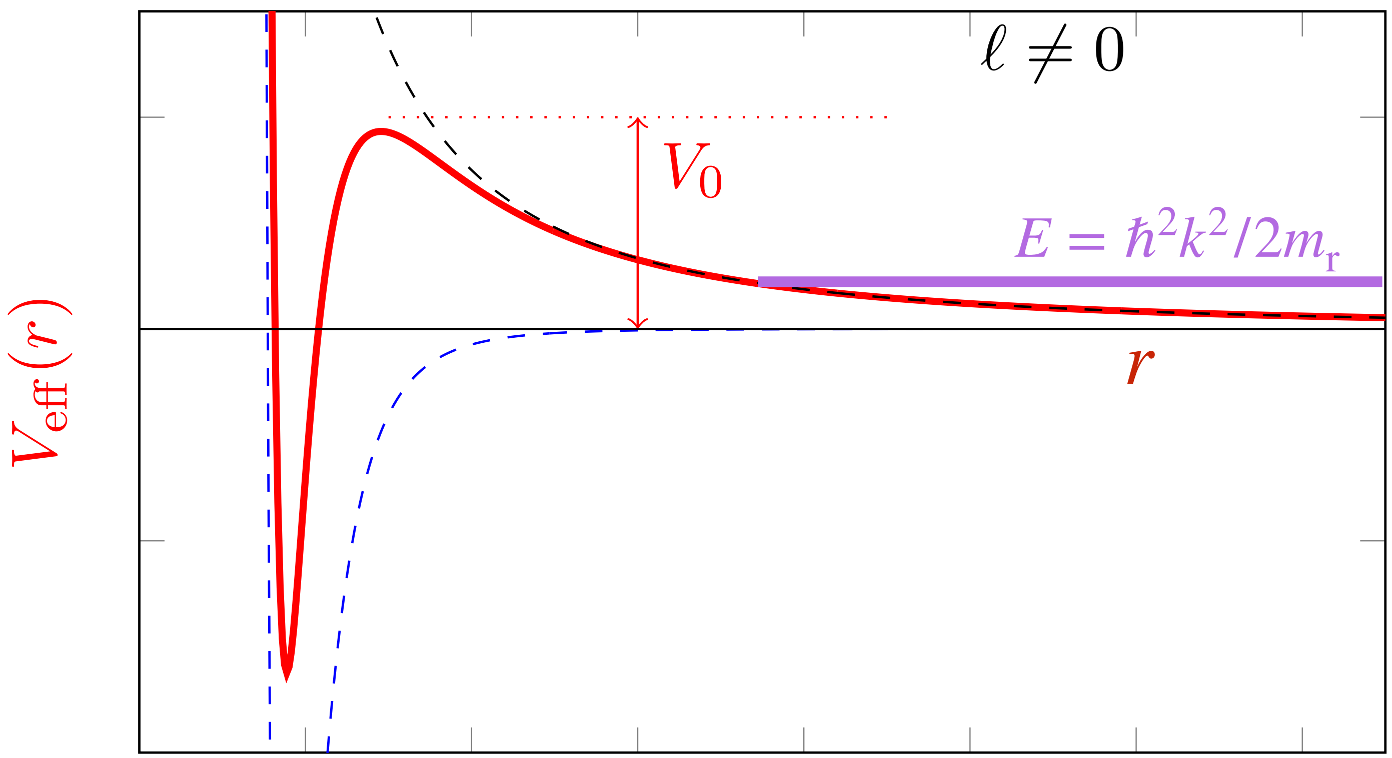
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$$

Barrière centrifuge et atomes froids

On modélise le potentiel obtenu dans le cadre de Born-Oppenheimer par

$$V(r) = -\frac{C_6}{r^6} + \frac{C_{12}}{r^{12}}$$ Lennard-Jones

et on ajoute pour $\ell \neq 0$ le potentiel centrifuge $\dfrac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_\mathrm{r} r^2}$



Hauteur de la barrière pour $\ell = 1$:

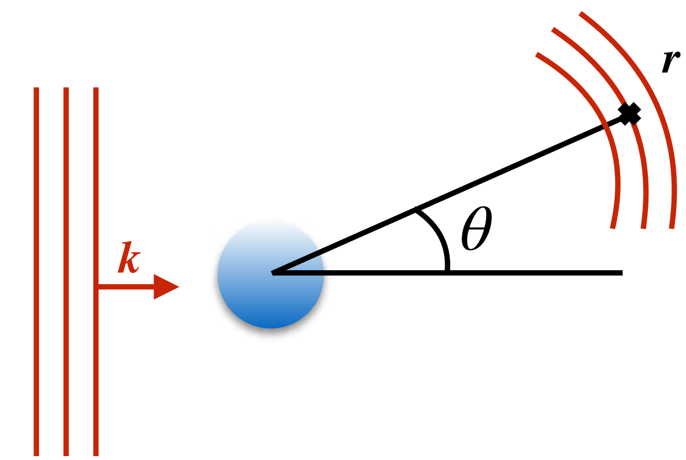
$$V_0 \sim \frac{\hbar^3}{\sqrt{m_\mathrm{r}^3 C_6}} \sim 30\ \mu\mathrm{K}$$ pour Rb

Si $E \sim k_\mathrm{B} T \ll V_0$, les atomes en collision "ne voient pas" le potentiel $V(r)$

Seules les collisions en onde s ($\ell = 0$) jouent un rôle important, sauf cas très particulier

→ ***un gaz de fermions polarisés est généralement un gaz parfait***

En résumé (1)



- Description d'une collision en termes d'état stationnaire de diffusion $|\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle$

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \; + \; f(k,\theta)\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$

- L'amplitude de diffusion $f(k,\theta)$ contient toute l'information sur la collision

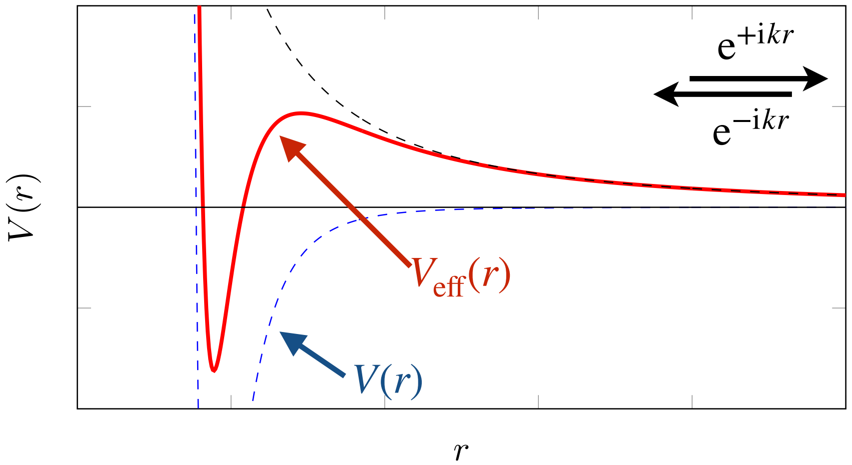
$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}(\Omega) = |f(k,\theta)|^2$$

- L'amplitude de diffusion se calcule à partir de la matrice de transition $\hat{T}(E)$

$$f(k,\theta) = -\frac{m_\mathrm{r}}{2\pi\hbar^2}\langle \boldsymbol{k}_f|\,\hat{T}\,|\boldsymbol{k}_i\rangle \qquad \theta = (\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}_f) \qquad k = |\boldsymbol{k}_i| = |\boldsymbol{k}_f|$$

avec $\hat{T}(E) = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}(E)\hat{V}$ $\qquad \hat{G}(E) = \dfrac{1}{E - \hat{H} + \mathrm{i}0_+}$

En résumé (2)



Pour un potentiel invariant par rotation $V(r)$

- Canaux indépendants associés aux ondes partielles de moment cinétique donné

- Pour des particules indiscernables

  ℓ pair pour des bosons sans spin ou polarisés

  ℓ impair pour des fermions polarisés

- Pour une énergie suffisamment basse, seul le canal $\ell = 0$ contribue

  diffusion isotrope

Le théorème optique impose dans ce cas :

$$\frac{1}{f(k)} = \text{fonction reelle}(k) \; - \; \mathrm{i}k$$