

Chapitre 3

Collisions à basse énergie

Sommaire

1	L'équation radiale à basse énergie	2
1-1	La portée d'un potentiel	2
1-2	Les différentes zones spatiales à considérer	2
1-3	Le raccord entre les zones	3
1-4	Validité du développement à basse énergie	4
2	La diffusion en onde s et en onde p	5
2-1	La longueur de diffusion	5
2-2	Longueur de diffusion et dernier état lié.	6
2-3	Comment calculer une longueur de diffusion	6
2-4	Diffusion en onde p	7
2-5	Exemples d'expériences de collisions froides	7
3	L'exemple du puits carré	9
3-1	La longueur de diffusion pour un puits carré	9
3-2	Le puits carré : états de diffusion	10
3-3	Le puits carré : états liés	11
4	Pseudo-potential et condition de Bethe–Peierls	13
4-1	Potential de contact en point de vue position	13
4-2	Potential de contact en point de vue impulsion	14
4-3	Le pseudo-potential	16
4-4	La condition aux limites de Bethe–Peierls	18

Le chapitre précédent a été consacré à la mise en place du formalisme général permettant de traiter une collision entre deux particules, puis à la prise en compte de l'invariance par rotation du potentiel d'interaction entre ces particules. Cela nous a permis de décrire la collision en termes de déphasages $\delta_\ell(k)$ associés aux différents moments cinétiques ℓ . Nous abordons maintenant le cas d'une collision à basse énergie, telle que $kb \ll 1$, où k est le vecteur d'onde relatif des deux partenaires de la collision et b la portée du potentiel d'interaction.

Ce problème est d'une grande importance pour la physique des atomes froids. Il va apporter une simplification considérable sur le plan mathématique : seules les ondes partielles les plus basses ($\ell = 0$ ou 1) contribuent de manière significative, et quand elles jouent un rôle, on peut les caractériser par seulement un ou deux paramètres physiques comme la longueur de diffusion ou la portée effective. Cette simplification permet en particulier de remplacer le potentiel réel entre atomes, qui peut être compliqué à déterminer comme nous l'avons vu au chapitre 1, par un potentiel beaucoup plus simple conduisant au même jeu de paramètres physiques. Nous discuterons ainsi les exemples du puits carré et du pseudo-potential.

L'origine de cette simplification est bien connue dans tous les domaines de la physique ondulatoire, l'optique ou l'acoustique par exemple : si on observe un objet de taille b avec une longueur d'onde $\lambda \sim 1/k \gg b$, on ne peut pas distinguer les détails de cet objet, qui apparaît donc comme quasi-punctuel. On peut alors modéliser la diffusion d'une onde par cet objet en le remplaçant par un système plus simple.

1 L'équation radiale à basse énergie

1-1 La portée d'un potentiel

La notion de développement à basse énergie est intimement liée à la portée b du potentiel diffusant, c'est-à-dire la plage de distance autour de $r = 0$ sur laquelle le potentiel $V(r)$ a un effet. Pour un potentiel comme un puits carré, que nous étudierons en détail en §3, la portée est bien sûr égale à la largeur du puits. Pour un potentiel se comportant comme une loi de puissance aux grands r :

$$V(r) \sim -\frac{C_n}{r^n}, \quad (1)$$

cette notion est plus subtile. En fait, elle ne prend un sens qu'en physique quantique : si on considère un paquet d'ondes localisé dans une zone d'extension σ , l'énergie potentielle $\sim -C_n/\sigma^n$ sera significative par rapport à l'énergie cinétique liée à la localisation $\hbar^2/m\sigma^2$ quand

$$\frac{C_n}{\sigma^n} \gtrsim \frac{\hbar^2}{m\sigma^2} \quad \Leftrightarrow \quad \sigma \lesssim \left(\frac{mC_n}{\hbar^2}\right)^{1/(n-2)}, \quad (2)$$

ce qui définit, à un coefficient multiplicatif arbitraire près, la portée du potentiel $-C_n/r^n$. Notons que ce raisonnement n'a de sens que pour $n > 2$. Le potentiel coulombien ($n = 1$) est de portée infinie en mécanique quantique comme en mécanique classique. Pour le potentiel de van der Waals $-C_6/r^6$, nous poserons dans tout ce cours¹

$$R_{\text{vdW}} = \frac{1}{2} \left(\frac{2m_r C_6}{\hbar^2}\right)^{1/4}. \quad (3)$$

À cette échelle de longueur est naturellement associée une échelle d'énergie définie par

$$E_{\text{vdW}} = \frac{\hbar^2}{2m_r R_{\text{vdW}}^2}. \quad (4)$$

1. Quand on définit des échelles de longueur, d'énergie, etc. à partir de considérations dimensionnelles, il est généralement préférable de ne pas y incorporer de facteurs numériques ($2, \pi, e, \dots$) car ces derniers ne peuvent pas être rétablis à la fin du calcul par de simples considérations d'homogénéité. Toutefois, pour la définition de l'échelle de longueur R_{vdW} , le poids des traditions est tel que nous avons préféré ne pas adopter une définition différente de celle la plus courante dans la littérature.

1-2 Les différentes zones spatiales à considérer

Au chapitre précédent, nous avons établi l'équation radiale vérifiée par la fonction d'onde réduite $u(r) = r \psi(r)$ pour une valeur donnée ℓ du moment cinétique :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_r r^2} + V(r)\right) u(r) = E u(r) \quad (5)$$

ou encore

$$u'' + \left(k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2m_r V(r)}{\hbar^2}\right) u = 0 \quad (6)$$

avec $E \equiv \hbar^2 k^2 / 2m_r$ et $u''(r) \equiv d^2 u / dr^2$.

Dans ce qui suit, nous allons chercher à caractériser les solutions de cette équation, en tirant parti de l'existence de deux échelles de longueur bien séparées pour le problème à basse énergie :

- L'échelle "courte distance" donnée par la portée du potentiel b (*i.e.* R_{vdW} pour le potentiel de van der Waals). Pour $r \gg b$, on peut négliger l'influence de $V(r)$ dans (6).
- L'échelle "longue distance" donnée par $1/k$, c'est-à-dire la longueur d'onde de de Broglie réduite associée à la particule incidente. Pour $r \ll 1/k$, on peut négliger l'influence de k^2 dans (6).

On distingue donc trois zones de l'espace, représentées sur la figure 1 :

- La zone intérieure où l'action de V est significative :

$$r < b : \quad u'' - \left(\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2m_r V(r)}{\hbar^2}\right) u = 0 \quad (7)$$

La résolution exacte de cette équation nécessite la connaissance précise du potentiel $V(r)$. La solution est indépendante de k , donc de l'énergie, dans cette limite basse énergie. Comme il s'agit d'une équation différentielle du second degré, il y a deux solutions indépendantes, mais on ne conserve que la solution physiquement acceptable s'annulant en $r = 0$, puisque $u(r) = r \psi(r)$.

- La zone intermédiaire où on peut négliger à la fois la contribution de $V(r)$ et de k^2 :

$$b \ll r \ll 1/k : \quad u'' - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u = 0. \quad (8)$$

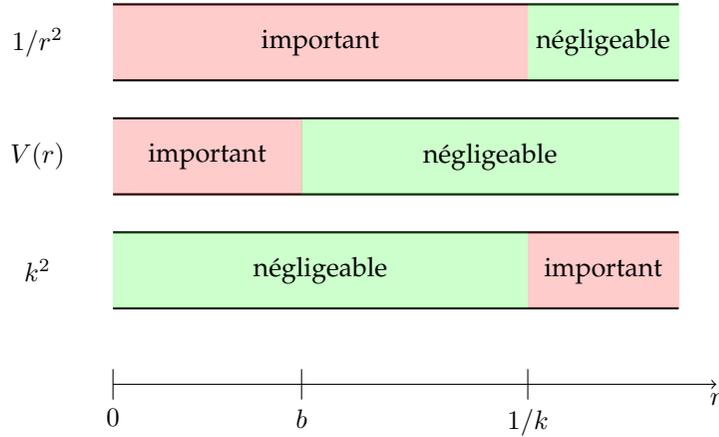


FIGURE 1. Les trois zones d'espace à considérer pour analyser le comportement des solutions de (6) pour $\ell \sim 1$. Pour $\ell = 0$, la première ligne n'est pas utile.

Deux solutions indépendantes de cette équation sont $r^{\ell+1}$ et $1/r^\ell$. La solution physiquement intéressante s'écrit donc dans cette zone :

$$u(r) \propto \alpha r^{\ell+1} + \frac{\beta}{r^\ell}. \quad (9)$$

ou encore $u(r) = \alpha r + \beta$ pour $\ell = 0$.

— La zone extérieure où k^2 domine devant $\ell(\ell+1)/r^2$ et $V(r)$, c'est-à-dire $r \gg 1/k$ pour ℓ de l'ordre de l'unité (ou $r \gg \ell k$ sinon) :

$$k \ll r : \quad u'' + k^2 u = 0. \quad (10)$$

Les solutions sont bien sûr $\sin kr$ et $\cos kr$, et nous avons vu au chapitre précédent qu'il est intéressant de mettre la combinaison linéaire physiquement pertinente sous la forme

$$\begin{aligned} u(r) &\propto \sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_\ell), \\ &\propto \sin(kr - \ell\pi/2) + \tan(\delta_\ell) \cos(kr - \ell\pi/2) \end{aligned} \quad (11)$$

L'action du potentiel diffusant $V(r)$ étant caractérisée par le déphasage $\delta_\ell(k)$.

1-3 Le raccord entre les zones

Le but de l'étude théorique d'un problème de diffusion est la détermination du déphasage $\delta_\ell(k)$ pour un potentiel $V(r)$ donné. Cette détermination revient à raccorder la solution dans la zone extérieure $r \gg 1/k$ à celle trouvée dans la zone intérieure $r < b$.

Le raccord au niveau de $r \sim b$ entre zone intérieure et zone intermédiaire se fait au cas par cas. Selon l'expression du potentiel $V(r)$, une résolution analytique ou numérique permet de déterminer le rapport α/β à prendre pour se raccorder à la solution vérifiant $u(0) = 0$.

Le raccord au niveau de $r \sim 1/k$ entre zone intermédiaire et zone externe se fait grâce aux solutions exactes de l'équation

$$u'' + \left(k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) u = 0. \quad (12)$$

Il s'agit des deux fonctions :

$$\sqrt{kr} J_{\ell+1/2}(kr) \quad \text{et} \quad \sqrt{kr} Y_{\ell+1/2}(kr) \quad (13)$$

où $J_\alpha(x)$ et $Y_\alpha(x)$ sont les fonctions de Bessel de première et deuxième espèce.

— Pour $kr \ll 1$, on a

$$\sqrt{kr} J_{\ell+1/2}(kr) \sim c_J (kr)^{\ell+1}, \quad (14)$$

$$\sqrt{kr} Y_{\ell+1/2}(kr) \sim -c_Y (kr)^{-\ell} \quad (15)$$

ce qui redonne bien le comportement attendu en (9). Nous ne précisons pas ici les coefficients de proportionnalité c_J et c_Y , qui sont de simples nombres faisant intervenir $\Gamma(\ell+1/2)$ et $\Gamma(\ell+3/2)$.

— Pour $kr \gg 1$, on a

$$\sqrt{kr} J_{\ell+1/2}(kr) \sim \sqrt{2/\pi} \sin(kr - \ell\pi/2), \quad (16)$$

$$\sqrt{kr} Y_{\ell+1/2}(kr) \sim -\sqrt{2/\pi} \cos(kr - \ell\pi/2) \quad (17)$$

ce qui redonne bien le comportement attendu en (11). Plus précisément, $\tan \delta_\ell$ caractérise le poids relatif de $Y_{\ell+1/2}$ par rapport à $J_{\ell+1/2}$:

$$u(r) \propto \left[\sqrt{kr} J_{\ell+1/2}(kr) \right] - \tan \delta_\ell \left[\sqrt{kr} Y_{\ell+1/2}(kr) \right]. \quad (18)$$

Nous pouvons donc déduire de ce qui précède le comportement du déphasage δ_ℓ avec k . Le prolongement de (18) dans la zone intermédiaire donne :

$$u(r) \propto [c_J (kr)^{\ell+1}] + \tan \delta_\ell [c_Y (kr)^{-\ell}] \quad (19)$$

c'est-à-dire en comparant avec (9) :

$$\frac{\beta}{\alpha} = \frac{c_Y}{c_J} \frac{\tan \delta_\ell}{k^{2\ell+1}}. \quad (20)$$

Nous avons déjà mentionné que le rapport β/α , obtenu en raccordant la zone intermédiaire avec la zone intérieure, est indépendant de k . On en déduit donc la loi d'échelle à basse énergie :

$$\tan [\delta_\ell(k)] \propto k^{2\ell+1}. \quad (21)$$

Ce résultat est important pour tout ce qui va suivre. Il montre que pour une énergie et donc un k donnés, l'effet du potentiel $V(r)$ – caractérisé par une valeur non nulle de $\tan \delta_\ell$ – sera d'autant plus faible que ℓ sera grand. En pratique, ce sera donc la valeur la plus petite $\ell = 0$ qui jouera un rôle dominant ou, pour des fermions polarisés pour lesquels seules les valeurs impaires de ℓ sont autorisées, la valeur $\ell = 1$.

Le rôle central joué par la diffusion en onde s ($\ell = 0$) se comprend aisément quand on examine le potentiel effectif formé par le potentiel réel $V(r)$ et la barrière centrifuge $\hbar^2 \ell(\ell+1)/2m_r$. Ce potentiel, tracé sur la figure 2 pour $V(r)$ de la forme de Lennard-Jones, comporte :

- une aile à grande distance dominée par le terme centrifuge,
- un maximum local pour $r \sim R_{\text{vdW}}$ avec une hauteur de barrière $\sim E_{\text{vdW}}$.
- un comportement à courte distance dominé par $V(r)$.

Nous avons déjà montré au chapitre 2 que dans un gaz quantique, l'énergie thermique d'un atome est très inférieure à E_{vdW} . Par conséquent, dès que $\ell \neq 0$, la particule relative incidente depuis $r = +\infty$ possède une énergie E beaucoup plus faible que la hauteur de la barrière centrifuge ; elle va faire demi-tour au niveau du point de rebroussement $r_\ell(E)$, dont la position est quasiment la même qu'en absence de potentiel diffusant (figure 2). Les canaux de diffusion dans les ondes de moment cinétique non nul sont donc "inopérants", et tout se passe pour eux comme si les particules n'interagissaient pas. Seule subsiste la diffusion dans l'onde s ($\ell = 0$).

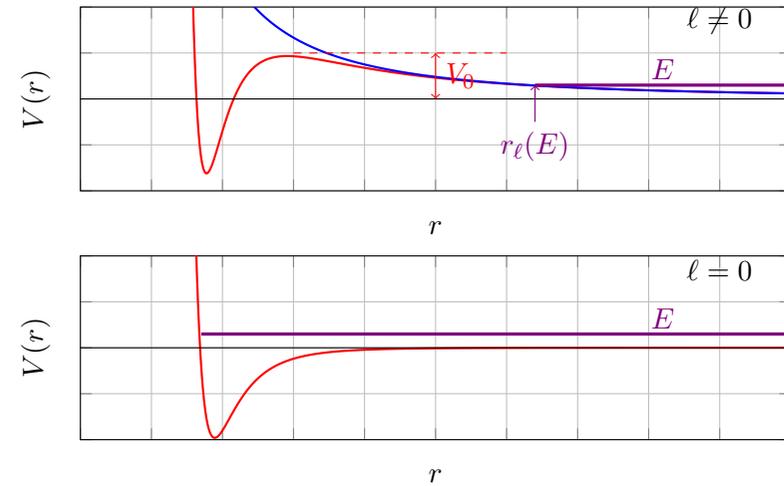


FIGURE 2. En haut, cas d'un moment cinétique $\ell \neq 0$. Rouge : potentiel de Lennard-Jones superposé au potentiel centrifuge ; bleu : potentiel centrifuge seul. Dans un gaz quantique, une collision atomique se fait généralement à une énergie $E \ll V_0$ de sorte que les atomes n'explorent que la région dominée par la barrière centrifuge. Les canaux correspondants à $\ell \neq 0$ donnent donc lieu à une diffusion beaucoup plus faible que celle du canal $\ell = 0$ (figure du bas), quand celle-ci est autorisée.

1-4 Validité du développement à basse énergie

Le traitement qui précède a consisté à négliger complètement l'effet de $V(r)$ dans la zone $r > b$. Quand $V(r)$ est un potentiel carré, rigoureusement nul au delà de b , cela est évidemment correct. En revanche, cette approximation peut être problématique pour un potentiel en loi de puissance $-C_n/r^n$. Pour évaluer la validité de ce traitement, nous allons comparer l'effet du terme centrifuge en $1/r^2$ à celui de $1/r^n$ sur la solution envisagée pour $b \ll r \ll 1/k$:

$$u(r) \propto \alpha r^{\ell+1} + \frac{\beta}{r^\ell}. \quad (22)$$

Plus précisément, il faut s'assurer que $V(r) \times (\alpha r^{\ell+1})$ reste toujours petit devant $(\hbar^2 \ell(\ell+1)/2m_r r^2) \times (\beta/r^\ell)$ sur toute cette zone. A priori, on s'at-

tend à ce que ces deux termes soient comparables à la frontière $r = b$, et il faut donc que le premier terme décroisse plus vite que le second quand on prend $r \gg b$. Cela impose

$$n - \ell - 1 > 2 + \ell \quad \Leftrightarrow \quad n > 2\ell + 3. \quad (23)$$

Il s'agit d'une condition très contraignante. Pour un potentiel de van der Waals $n = 6$, on voit que ce qui précède, en particulier la loi d'échelle (21), n'est valable que pour $\ell = 0$ (onde s) ou $\ell = 1$ (onde p). Pour les ondes partielles de moment cinétique plus élevé, le déphasage $\delta_\ell(k)$ décroît moins vite avec k que ne le laisserait supposer la loi (21) [LANDAU & LIFSHITZ (1975), § 132].

2 La diffusion en onde s et en onde p

Nous avons montré au paragraphe précédent qu'à basse énergie, la diffusion se produisait essentiellement dans les canaux de faible moment cinétique, à commencer par l'onde s , $\ell = 0$. Nous allons donc nous concentrer d'abord sur ce canal, puis nous dirons quelques mots sur le canal suivant $\ell = 1$.

Rappelons quelques résultats importants établis au chapitre précédent à partir du développement en ondes partielles. L'amplitude de diffusion $f(k, \theta)$ s'écrit sous la forme générale

$$f(k, \theta) = \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) f_{\ell}(k), \quad (24)$$

ce qui donne quand on se limite au canal $\ell = 0$:

$$f(k, \theta) = f_0(k), \quad (25)$$

c'est-à-dire une diffusion isotrope, comme il se doit pour un état de moment cinétique nul. Par ailleurs, nous avons relié chaque amplitude $f_{\ell}(k)$ au déphasage $\delta_{\ell}(k)$ par :

$$\frac{1}{f_{\ell}(k)} = \frac{k}{\tan \delta_{\ell}(k)} - ik. \quad (26)$$

où la partie imaginaire de $1/f(k)$, c'est-à-dire le terme $-ik$, provient du théorème optique, c'est-à-dire qu'il est essentiel pour assurer l'unitarité du processus de diffusion : le flux sortant doit être égal au flux entrant.

Dans cette limite, la section efficace différentielle est isotrope, ce qui conduit à une expression très simple pour la section efficace totale :

$$\text{Basse énergie :} \quad \frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega) = |f(k)|^2, \quad \sigma_{\text{tot}} = 4\pi |f(k)|^2. \quad (27)$$

2-1 La longueur de diffusion

Pour l'onde s , le résultat général (21) s'écrit sous la forme :

$$k \rightarrow 0 : \quad \tan[\delta_0(k)] \propto k. \quad (28)$$

Le coefficient de proportionnalité a la dimension d'une longueur et on définit ainsi la *longueur de diffusion* :

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan[\delta_0(k)]}{k}. \quad (29)$$

En prenant pour l'instant $\tan[\delta_0(k)] = -ak$ (le premier terme correctif sera discuté ci-dessous), on obtient l'amplitude de diffusion en onde s à basse énergie :

$$\frac{1}{f(k)} \approx -\frac{1}{a} - ik \quad \Leftrightarrow \quad f(k) \approx -\frac{a}{1 + ika}. \quad (30)$$

La longueur de diffusion peut être positive, négative, nulle ou infinie.

Ordre suivant du développement de $f(k)$: la portée effective. On peut montrer [cf. MESSIAH (2003) et LANDAU & LIFSHITZ (1975)] que le développement limité de la partie réelle de $1/f$ ne fait intervenir que des puissances paires de k , jusqu'à un ordre déterminé par la rapidité de la décroissance de $V(r)$ à l'infini. Pour le potentiel de van der Waals décroissant comme r^{-6} , on obtient à l'ordre 2 inclus en k :

$$\text{ordre 2 en } k : \quad \frac{1}{f(k)} \approx -\frac{1}{a} - ik + \frac{1}{2} r_e k^2, \quad (31)$$

où l'on a introduit la *portée effective* r_e , quantité réelle également homogène à une longueur. Pour le domaine d'énergie des gaz quantiques, la connaissance de la longueur de diffusion a et de la portée effective r_e est largement suffisante pour décrire correctement l'ensemble de la physique des collisions en onde s . En fait, dans ce cours, nous pourrions nous limiter à (30), c'est-à-dire une diffusion avec portée effective nulle ($r_e = 0$). Cette limite correspond en particulier au pseudo-potentiel que nous introduirons plus loin.

Régime "unitaire". Quand on se place dans une situation où $1/a = 0$, c'est-à-dire $a = \pm\infty$, l'amplitude de diffusion à basse énergie est égale à i/k et la section efficace à $4\pi/k^2$ (pour des particules discernables). Ces deux quantités atteignent donc (en module) leur valeur maximale autorisée par le théorème optique, c'est-à-dire par l'unitarité de la mécanique quantique. Nous reviendrons dans les chapitres ultérieurs sur les moyens d'atteindre ce régime et sur ses conséquences physiques.

Particules discernables vs. indiscernables. Les résultats établis ci-dessus l'ont été pour des particules discernables et ils conduisent la section efficace totale :

$$\text{Particules discernables, basse énergie : } \sigma_{\text{tot}} \approx \frac{4\pi a^2}{1 + k^2 a^2}. \quad (32)$$

Nous avons établi au chapitre précédent comment prendre en compte l'indiscernabilité des particules, bosons ou fermions. Pour des bosons polarisés, cette indiscernabilité vient doubler la contribution des ondes partielles paires et annuler la contribution des ondes impaires ; pour des fermions, les contributions sont inversées. On en déduit que dans le régime de l'onde s qui nous intéresse ici, on a :

$$\text{Bosons polarisés, basse énergie : } \sigma_{\text{tot}} \approx \frac{8\pi a^2}{1 + k^2 a^2}, \quad (33)$$

$$\text{Fermions polarisés, basse énergie : } \sigma_{\text{tot}} \approx 0. \quad (34)$$

Pour les fermions polarisés, le terme dominant est constitué par la diffusion en onde p , comme nous le verrons en § 2-4.

2-2 Longueur de diffusion et dernier état lié.

Nous avons mentionné au chapitre précédent que la matrice de transition \hat{T} et l'amplitude de diffusion f présentaient une divergence quand on les évaluait pour une énergie E égale à l'énergie d'un état lié de l'hamiltonien $\mathbf{p}^2/2m_{\text{r}} + V(r)$. Si on connaît de manière précise l'amplitude de diffusion $f(E)$, il est donc intéressant de regarder ses pôles pour en déduire sans calcul l'énergie des états liés. Nous en verrons un exemple pour le puits carré en §3-3.

Quand on dispose seulement d'une valeur approchée de $f(k)$, cette connexion entre amplitude de diffusion et états liés est d'un intérêt variable. Ainsi, quand on utilise l'expression de $f(k)$ donnée en (30), on trouve un seul pôle en $k = i/a$ correspondant à l'état lié :

$$\frac{e^{ikr}}{r} \rightarrow \frac{e^{-r/a}}{r} \quad \text{avec} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{r}}} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\text{r}} a^2}. \quad (35)$$

Cette expression n'est bien sûr acceptable que pour $a > 0$, pour que l'état trouvé soit normalisable. Nous verrons dans la suite du cours, en particulier en §3-3 pour le puits carré, qu'elle fournit une bonne estimation de l'énergie du dernier état lié quand $a \gg b$.

2-3 Comment calculer une longueur de diffusion

Nous avons donné en (11) l'expression générale de la fonction d'onde réduite $u(r)$ pour un état de moment cinétique ℓ . Pour l'onde s , cette expression se simplifie en

$$u(r) \propto \sin(kr) + \tan(\delta_0) \cos(kr). \quad (36)$$

Prenons la limite $k \rightarrow 0$ de cette expression en utilisant $\tan[\delta_0(k)] \approx -ka$. On a pour un r donné $\sin kr \approx kr$, $\cos kr \approx 1$, de sorte que

$$k \rightarrow 0 : \quad u(r) \propto k(r - a). \quad (37)$$

Pour déterminer a , il suffit donc de chercher la solution d'énergie nulle de l'équation radiale (6) pour $\ell = 0$:

$$u''(r) + \frac{2m_{\text{r}} V(r)}{\hbar^2} u(r) = 0. \quad (38)$$

Il faut retenir la solution physiquement acceptable, c'est-à-dire conduisant à $u(0) = 0$. Dans la zone extérieure où $V(r)$ est négligeable, l'équation radiale (38) s'écrit $u''(r) = 0$ et la solution retenue est donc de la forme $u(r) = \alpha r + \beta$. La comparaison de cette forme avec (37) permet d'en déduire la longueur de diffusion $a = -\beta/\alpha$.

2-4 Diffusion en onde p

Dans le cas de l'onde p ($\ell = 1$), le résultat général (21) s'écrit

$$k \rightarrow 0 : \quad \tan[\delta_1(k)] \propto k^3 \quad (39)$$

On est donc conduit à introduire le *volume de diffusion* :

$$v = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan[\delta_1(k)]}{k^3}. \quad (40)$$

Par ailleurs, le polynôme de Legendre $P_1(x) = x$ de sorte que l'amplitude de diffusion s'écrit

$$f(k, \theta) = 3 \cos \theta f_1(k) \quad (41)$$

avec

$$\frac{1}{f_1(k)} = \frac{k}{\tan[\delta_1(k)]} - ik \approx -\frac{1}{k^2 v} - ik. \quad (42)$$

À petit k , le terme dominant de l'amplitude de diffusion est donc la partie réelle $f_1(k) \propto k^2$, la section efficace différentielle varie comme

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k, \theta)|^2 \propto k^4 \cos^2 \theta \quad (43)$$

et la section efficace totale comme $\sigma \propto k^4$.

L'expression (42) ci-dessus donne le terme dominant de la partie réelle pour k petit ainsi que la valeur exacte de la partie imaginaire. Mais comme ces deux termes diffèrent par un facteur k^3 , il est important de préciser si d'autres termes (en k^{-1} ou en k^0) peuvent contribuer de manière significative à la partie réelle de $f(k)$, avec une amplitude qui pourrait dépasser celle de la partie imaginaire.

Dans un développement de type "portée effective", similaire à celui mené pour l'onde s en (31), on est effectivement conduit à introduire une correction d'ordre k^2 par rapport au terme dominant et poser :

$$\frac{k^3}{\tan[\delta_1(k)]} \approx -\frac{1}{v} + \frac{k_e}{2} k^2, \quad (44)$$

où k_e à la dimension d'un nombre d'onde. Ce terme additionnel vient corriger l'amplitude de diffusion donnée en (42) :

$$\frac{1}{f_1(k)} \approx -\frac{1}{k^2 v} + \frac{k_e}{2} - ik. \quad (45)$$

Cette correction est plus importante que son équivalent en onde s . En effet, en présence d'une résonance de type Feshbach qui assure $v = \infty$ et qui vient donc annuler le terme dominant, c'est le terme de portée effective qui devient prépondérant, et non le terme universel ik comme c'est le cas pour l'onde s quand $a = \infty$. C'est ainsi que la description d'une résonance en onde p en terme de contact de Tan conduit à introduire deux contacts, l'un associé au volume v et l'autre associé à k_e (YU, THYWISSEN et al. 2015).

Ce que nous venons de décrire s'applique bien pour des potentiels décroissant très vite à l'infini (plus vite que $1/r^7$), mais est en toute rigueur incorrect pour le potentiel de van der Waals en $1/r^6$ (MOTT & MASSEY 1949). Dans ce cas, on peut montrer qu'un terme additionnel, d'ordre $1/k$, contribue à l'amplitude de diffusion (GAO 1998). Ce terme peut toutefois être négligé dans le cas où la diffusion en onde p est induite par une résonance de Feshbach (YOSHIDA & UEDA 2015).

2-5 Exemples d'expériences de collisions froides

Nous allons maintenant illustrer les résultats qui précèdent avec deux expériences menées sur des gaz quantiques au cours des 20 dernières années.

Collisions en onde s pour des bosons. Le premier exemple porte sur l'observation de collisions en onde s , donc isotropes, avec des bosons tous préparés dans le même état de spin. L'expérience a été menée au Laboratoire Charles Fabry de l'Institut d'Optique par JASKULA, BONNEAU et al.

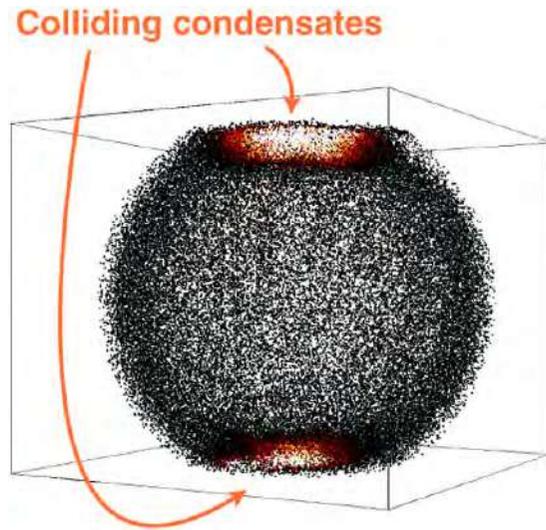


FIGURE 3. Collision entre deux condensats de Bose-Einstein d'hélium métastable. Le halo sphérique est en accord avec la prédiction pour une diffusion dans l'onde s . Chaque point correspond à la détection d'un atome. Figure extraite de JASKULA, BONNEAU et al. (2010).

(2010) (voir aussi PERRIN, CHANG et al. (2007) pour une expérience antérieure menée par le même groupe). On part d'un condensat de Bose-Einstein d'atomes d'hélium métastable, dans lequel les particules ont une vitesse négligeable. On utilise une impulsion lumineuse avec deux paires de faisceaux laser créant une transition Raman stimulée vers un autre état interne de l'atome. Cette impulsion crée deux groupes d'atomes se propageant en sens opposés avec une vitesse $v = \pm 2v_{\text{rec}}$, et un troisième groupe est constitué par les atomes restant à vitesse nulle. La vitesse v_{rec} est la vitesse de recul associée à l'absorption ou l'émission d'un photon résonnant avec l'atome, soit 9.2 cm/s pour l'hélium métastable. On laisse les collisions se produire et on prend ensuite une image du nuage d'atomes après temps de vol, ce qui permet de déterminer sa distribution en vitesse.

Un exemple de résultat est montré sur la figure 3. On a sélectionné ici le produit de la collision entre le groupe d'atomes à $v = 2v_{\text{rec}}$ et le groupe

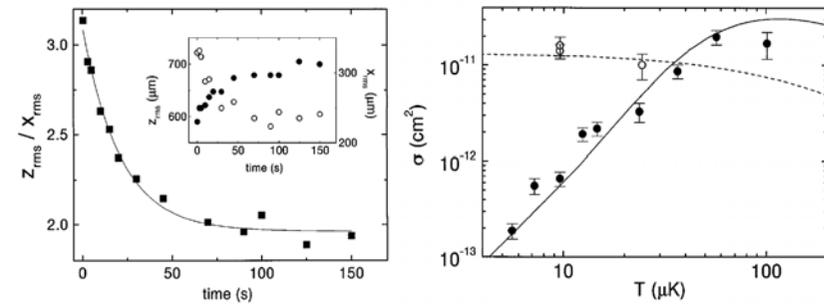


FIGURE 4. Gauche : mesure de la relaxation vers l'équilibre pour un nuage confiné dans un piège harmonique. Cette relaxation est le résultat de collisions élastiques, dans un nuage n'ayant initialement pas le bon rapport d'aspect dans un piège harmonique. Droite : variation de la section efficace σ avec la température du nuage, pour des fermions polarisés (symboles fermés) et pour un mélange de deux états de spin (symboles ouverts). Figures extraites de DEMARCO, BOHN et al. (1999)

d'atomes à $v = 0$, ce qui correspond à une vitesse du centre de masse égale à v_{rec} . On y voit ce qui reste des deux groupes d'atomes initiaux (taches brillantes en haut et en bas) et un halo sphérique correspondant au produit des collisions dans l'onde s . Puisque la collision est élastique, la vitesse finale des atomes est égale en module à la vitesse initiale. L'isotropie de l'amplitude de diffusion se traduit par une densité uniforme sur toute la sphère.

Inhibition des collisions pour des fermions polarisés. Pour des fermions polarisés, les seuls canaux de diffusion autorisés sont les ondes partielles de ℓ impair, en particulier $\ell = 1$ à basse température. Pour mettre en évidence ce phénomène, DEMARCO, BOHN et al. (1999) ont étudié la vitesse de thermalisation d'une assemblée de fermions (^{40}K) dans un piège harmonique. Ils sont partis d'un gaz de 10^7 atomes à l'équilibre dans un piège anisotrope, de sorte que les tailles du gaz selon les trois axes $\alpha = x, y, z$ du piège vérifient la loi d'équipartition de l'énergie $\frac{1}{2}m\omega_\alpha^2 r_\alpha^2 = \frac{1}{2}k_B T$. À un instant donné, on modifie une des trois fréquences propres du piège et on regarde le temps nécessaire pour que la forme du nuage s'adapte à cette nouvelle configuration sous l'effet des col-

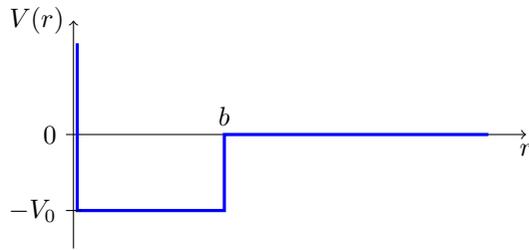


FIGURE 5. Puits de potentiel carré de profondeur V_0 et de largeur b .

lisions élastiques (GUÉRY-ODELIN, ZAMBELLI et al. 1999). Un exemple de relaxation vers l'équilibre est montré en figure 4 (gauche).

Quand on refait la même expérience pour des températures de plus en plus basses, on observe un allongement spectaculaire du temps de relaxation, qui s'explique par une décroissance de la section efficace pour des fermions polarisés (figure 4, droite, symboles fermés). Cette décroissance se fait selon la loi attendue pour l'onde p, $\sigma \propto k^4 \propto T^2$ entre 5 et 50 μK . Une expérience de contrôle instructive consiste à refaire la même expérience avec un mélange de deux états de spin (figure 4, droite, symboles ouverts). On trouve alors une section efficace à peu près indépendante de la température, comme attendu pour des collisions dans l'onde s.

3 L'exemple du puits carré

Un potentiel en puits carré constitue probablement le système le plus simple sur lequel on peut appliquer les concepts que nous venons d'exposer, pour tester et comprendre les prédictions principales. Nous considérons dans cette section le potentiel attractif représenté sur la figure 5, de profondeur $V_0 > 0$ et de portée b . Nous allons commencer par calculer la longueur de diffusion pour ce puits; nous étudierons ensuite les états stationnaires de diffusion (énergies positives), puis les états liés (énergies négatives).

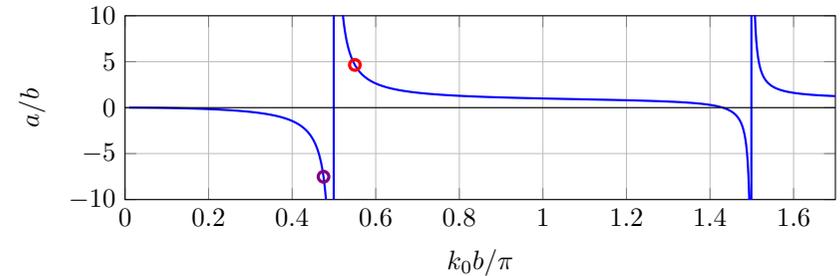


FIGURE 6. Variation de la longueur de diffusion d'un puits carré avec la profondeur V_0 .

3-1 La longueur de diffusion pour un puits carré

Comme nous l'avons écrit en §2-3, la méthode la plus simple pour déterminer la longueur de diffusion consiste à chercher l'état propre de l'équation de Schrödinger d'énergie nulle. La fonction d'onde réduite $u(r)$ de cet état vérifie

$$r < b : u''(r) + k_0^2 u(r) = 0 \quad (46)$$

$$r > b : u''(r) = 0 \quad (47)$$

avec $V_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2m_r$. La solution s'écrit

$$r < b : u(r) = A \sin(k_0 r) \quad (48)$$

$$r > b : u(r) = \alpha r + \beta \quad (49)$$

La continuité de u et de sa dérivée en $r = b$ impose :

$$\frac{k_0 \cos(k_0 b)}{\sin(k_0 b)} = \frac{\alpha}{\alpha b + \beta} \quad (50)$$

dont on déduit la longueur de diffusion via $a = -\beta/\alpha$:

$$a = b - \frac{\tan(k_0 b)}{k_0}. \quad (51)$$

Cette longueur de diffusion est tracée sur la figure 6 en fonction de la profondeur du puits de potentiel. Quand le puits est peu profond ($k_0 b \ll$

1), cette longueur de diffusion est petite et négative. Cela se comprend aisément par l'approximation de Born :

$$k \rightarrow 0 : \quad f(k) \approx -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}) d^3r = \frac{k_0^2 b^3}{3} \quad (52)$$

qui redonne le premier terme non nul du développement limité de (51). Quand k_0 augmente et devient de l'ordre de $1/b$, la longueur de diffusion (51) diverge² en tendant vers $-\infty$ quand $k_0 b \rightarrow \pi/2$ par valeurs négatives, puis bascule vers $+\infty$ pour décroître à nouveau, puis rencontre une seconde divergence en $k_0 b = 3\pi/2$, etc.

Pour comprendre ces divergences, nous nous intéresserons en §3-3 aux états liés dans ce puits carré. Nous y montrerons que chaque divergence est associée à l'apparition d'un nouvel état lié (*théorème de Levinson*). Au paravant, pour acquérir une intuition de la signification physique de la longueur de diffusion, nous allons étudier les états propres de l'équation de Schrödinger avec une énergie très légèrement positive.

3-2 Le puits carré : états de diffusion

La fonction d'onde réduite d'un état stationnaire de diffusion d'énergie positive $E = \hbar^2 k^2 / 2m_r$ vérifie

$$r < b : \quad u''(r) + k_1^2 u(r) = 0, \quad k_1^2 = k_0^2 + k^2, \quad (53)$$

$$r > b : \quad u''(r) + k^2 u(r) = 0, \quad (54)$$

dont la solution s'écrit :

$$r < b : \quad u(r) = A \sin(k_1 r) \quad (55)$$

$$r > b : \quad u(r) = B \sin(kr + \delta_0) \quad (56)$$

Le raccord de u et de sa dérivée au point $r = b$ donne la valeur du déphasage $\delta_0(k)$:

$$\frac{1}{k_1} \tan(k_1 b) = \frac{1}{k} \tan(kb + \delta_0) \quad (57)$$

2. Il est également possible de calculer analytiquement la portée effective pour ce modèle de puits carré (CASTIN 2007). On trouve que ce paramètre a lui aussi un comportement présentant une succession de divergences.

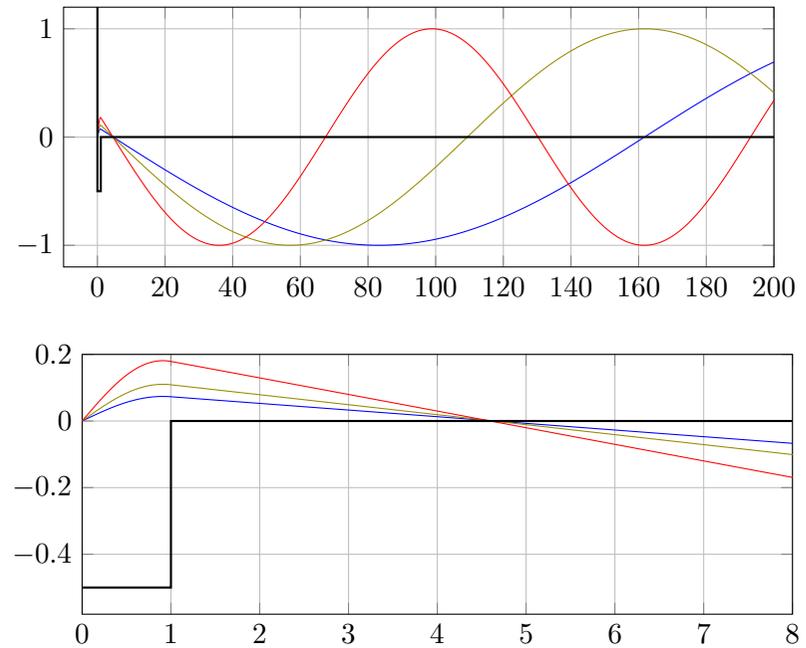


FIGURE 7. Etats stationnaires de diffusion du puits carré dans le cas $a > 0$ (point rouge sur la figure 6). Les nombres d'onde sont $k/k_0 = 0.02, 0.03, 0.05$ et la longueur de diffusion vaut $a = 4.7 b$.

ou encore

$$\delta_0(k) = -kb + \arctan \left[\frac{k}{k_1} \tan(k_1 b) \right] \quad \text{mod } [\pi]. \quad (58)$$

On vérifie sur cette expression que la longueur de diffusion trouvée plus haut [cf. (51)] s'obtient comme $-\lim_{k \rightarrow 0} \tan[\delta_0(k)]/k$.

Commençons par examiner le cas d'une longueur de diffusion positive en prenant par exemple le point marqué par un cercle rouge sur la figure 6, correspondant à $k_0 b = 0.55\pi$. Regardons le comportement de trois états propres de faible énergie : $k/k_0 = 0.02, 0.03, 0.05$ (figure 7). La variation à longue distance (figure 7, haut) est une sinusoïde de période $2\pi/k$, comme attendu. Quand on fait un zoom sur la partie centrale (figure 7, bas), on

voit que ces états partagent tous le même nœud, situé en très bonne approximation au niveau de la longueur de diffusion ; ils se comportent donc tous comme

$$u(r) \propto \sin[k(r - a)] \quad (59)$$

au delà de ce nœud, comme attendu à partir de (56) et de $\delta_0(k) \approx -ka$.

L'interprétation physique de la longueur de diffusion est donc simple dans le cas $a > 0$: le comportement des états de diffusion pour $r > a$ est identique à celui qu'on aurait si on travaillait avec un potentiel de cœur dur, de rayon égal à la longueur de diffusion a . Bien sûr, les fonctions $u(r)$ ne sont pas nulles pour $r < a$, contrairement au cas d'un potentiel de cœur dur ; cela joue un rôle quand on s'intéresse aux collisions inélastiques conduisant à la formation de dimères. Mais pour les processus élastiques, une longueur de diffusion positive est équivalente à un potentiel de cœur dur et tend donc à maintenir les particules loin les unes de autres en imposant à la fonction d'onde relative de s'annuler en $r = a$.

Passons maintenant au cas d'une longueur de diffusion négative, avec le point violet de la figure 6, correspondant à $k_0 b = 0.475\pi$. Nous considérons toujours les trois états de faible énergie : $k/k_0 = 0.02, 0.03, 0.05$ (figure 8). On voit maintenant que le comportement sinusoïdal à longue distance correspond à des courbes qui se croiseraient au point $r = a$ (négatif) si on les prolongeait dans la région non physique $r < 0$. Un tel comportement est également en accord avec la variation attendue en $\sin[k(r - a)]$ et il conduit à une probabilité *augmentée* de trouver les deux particules proches l'une de l'autre, par rapport à ce que l'on aurait si elles n'interagissaient pas.

3-3 Le puits carré : états liés

Nous allons maintenant relier les divergences trouvées pour la longueur de diffusion à l'apparition d'états liés dans le puits carré. Commençons par rappeler qu'à trois dimensions, un tel puits n'admet pas toujours d'état lié. Pour le prouver, partons de la forme de la fonction d'onde radiale réduite attendue pour un état lié. Puisque $E < 0$, introduisons κ et k_1 tels que

$$\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_r} = |E|, \quad k_1^2 = k_0^2 - \kappa^2. \quad (60)$$

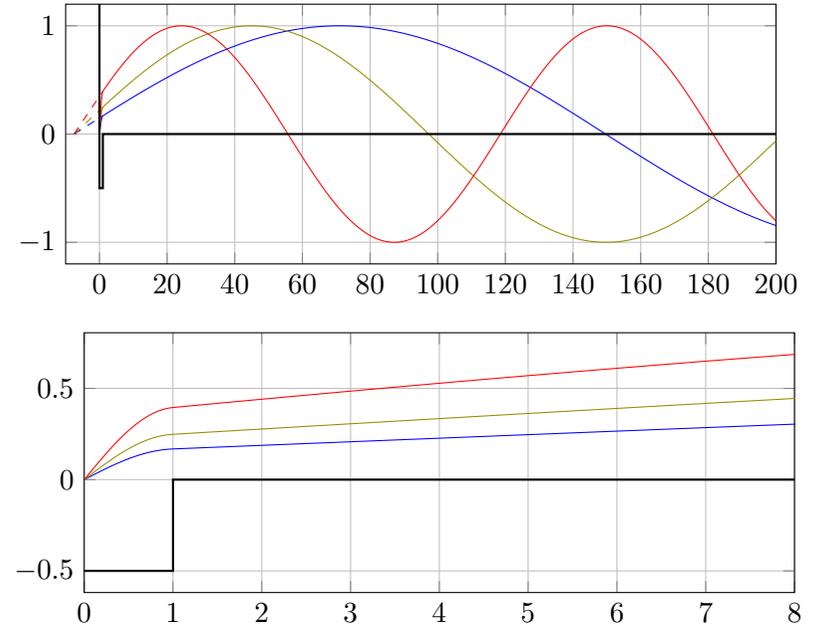


FIGURE 8. Etats stationnaires de diffusion du puits carré dans le cas $a < 0$ (point violet sur la figure 6). Les nombres d'onde sont $k/k_0 = 0.02, 0.03, 0.05$ et la longueur de diffusion vaut $a = -7.5b$.

La fonction d'onde radiale réduite d'un état lié doit vérifier

$$r < b : u''(r) + k_1^2 u(r) = 0 \quad (61)$$

$$r > b : u''(r) - \kappa^2 u(r) = 0 \quad (62)$$

avec la condition aux limites $u(0) = 0$. La solution physiquement acceptable s'écrit donc, à un facteur multiplicatif près :

$$r < b : u(r) = A \sin(k_1 r) \quad (63)$$

$$r > b : u(r) = B e^{-\kappa r} \quad (64)$$

et il faut raccorder le $\sin(k_1 r)$ à l'intérieur du puits avec l'exponentielle décroissante à l'extérieur du puits, en égalant les valeurs gauche et droite de la fonction et de sa dérivée en $r = b$.

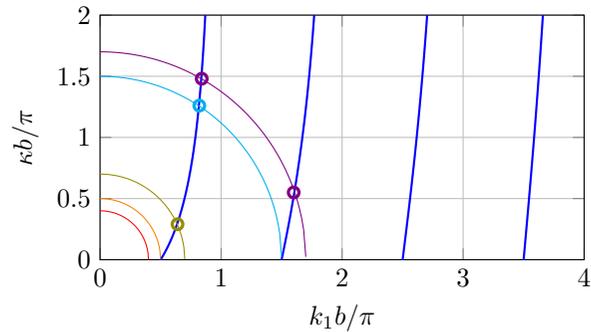


FIGURE 9. Principe de la résolution graphique permettant trouver les états liés dans un puits carré à trois dimensions [cf. (65) et (66)]. On doit trouver l'intersection entre la courbe $y = -x \cot(\pi x)$ (avec $x = k_1 b / \pi$ et $y = \kappa b / \pi$) et le cercle de rayon $k_0 b / \pi$. Le seuil d'apparition du premier (resp. deuxième) état lié correspond au cercle orange (resp. cyan) de rayon $k_0 b / \pi = 1/2$ (resp. $3/2$). Il n'y a pas d'état lié pour $k_0 b / \pi = 0.4$ (cercle rouge), un seul état lié pour $k_0 b / \pi = 0.7$ (cercle vert) et deux états liés pour $k_0 b / \pi = 1.7$ (cercle violet).

Si le puits est trop peu profond, le sinus sera une fonction strictement croissante à l'intérieur du puits, même pour la valeur maximale possible $k_1 = k_0$ (voir par exemple la figure 8). On ne peut alors pas le raccorder de manière continue et dérivable à l'exponentielle décroissante pour $r > b$. Plus précisément, la condition de raccordement de u et u' en $r = b$ impose

$$k_1 \cot(k_1 b) = -\kappa \quad (65)$$

que l'on couple à la relation

$$k_1^2 + \kappa^2 = k_0^2 \quad (66)$$

pour faire une résolution graphique (figure 9). Dans le quart de plan $k_1 > 0$, $\kappa > 0$, on doit trouver l'intersection entre la courbe définie par (65), tracée en bleu sur la figure 9 et le cercle (66). On constate que le premier état lié apparaît pour $k_0 b = \pi/2$, le deuxième état lié pour $k_0 b = 3\pi/2$, etc. Ces seuils d'apparition des états liés correspondent bien aux divergences de la longueur de diffusion trouvées plus haut.

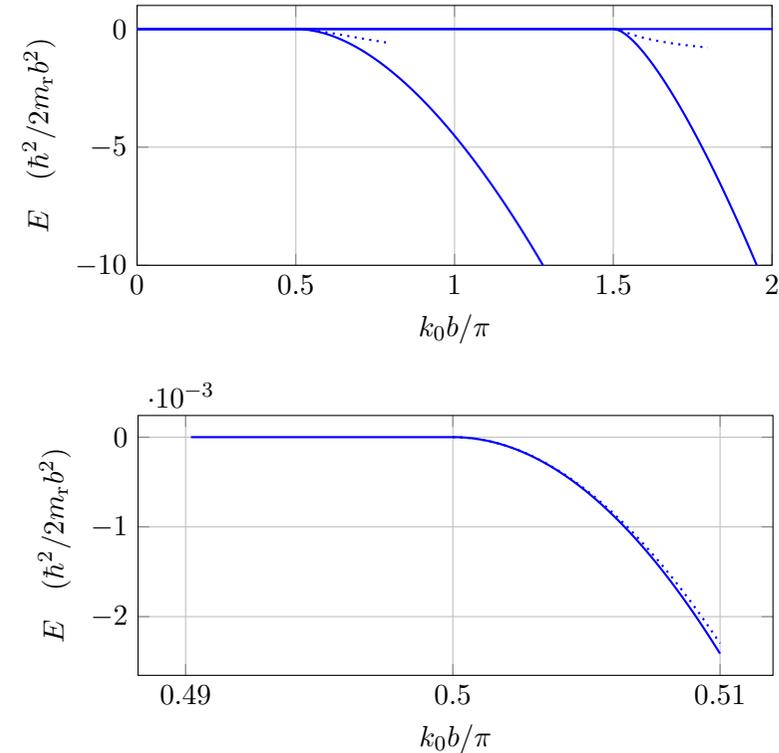


FIGURE 10. Énergies des états liés dans un puits de potentiel carré, obtenues par la résolution indiquée en figure 9. La courbe pointillée indique la prédiction approchée $-\hbar^2 / (2m_r a^2)$, valable proche du seuil de dissociation. La figure du bas est un agrandissement de celle du haut au voisinage du seuil d'apparition du premier état lié.

On pourra par ailleurs vérifier sur ce cas complètement soluble le lien entre positions des états liés et pôles de l’amplitude de diffusion, qui se calcule ici à partir du déphasage $\delta_0(k)$ donné en (58) et de la relation (26).

L’énergie des premiers états liés est tracée sur la figure 10, en fonction du paramètre k_0 contrôlant la profondeur du puits. Nous avons également indiqué la prédiction approchée $-\hbar^2/(2m_r a^2)$, donnant l’énergie du dernier état lié quand il est proche de la limite de dissociation. Cette prédiction est utile quand a est très grand, mais on constate qu’elle devient rapidement inexacte quand on s’éloigne du seuil de dissociation.

4 Pseudo-potentiel et condition de Bethe–Peierls

Dans ce qui précède, nous avons établi les lois qui régissent les interactions entre particules à basse énergie. Ce domaine de basse énergie correspond au régime où la longueur d’onde thermique des particules $\lambda = 2\pi/k$ est grande devant la portée b du potentiel. De manière équivalente, l’énergie cinétique des particules doit être petite devant \hbar^2/m_b^2 . Quand cette condition est remplie, les collisions se produisent majoritairement dans le régime de l’onde s , au moins quand celui-ci est autorisé.

L’amplitude de diffusion s’écrit alors :

$$\text{Basse énergie : } \frac{1}{f(k)} \approx -\frac{1}{a} - ik + \frac{1}{2}r_e k^2 + \dots \quad (67)$$

La partie imaginaire de $f(k)$ en ik est imposée par l’unitarité de la mécanique quantique. La longueur de diffusion a et la portée effective r_e sont des quantités réelles, homogènes à une longueur, caractérisant le potentiel. En général, quand on ne se place pas au voisinage d’une résonance, a et r_e sont de l’ordre de b , c’est-à-dire de l’ordre de R_{vdW} pour le potentiel de van der Waals. Ainsi, puisque les k pertinents sont tels que $kb \ll 1$, les trois contributions à $f(k)$ se classent selon :

$$\frac{1}{|a|} \gg |ik| \gg |r_e k^2|. \quad (68)$$

et il suffit alors de connaître a , la correction en $r_e k^2$ n’ayant qu’une influence mineure.

La longueur de diffusion joue donc un rôle central dans la description des gaz quantiques. Dans la plupart des cas, elle suffit à déterminer les propriétés collectives du fluide, que ce soit les caractéristiques statiques (équation d’état par exemple) ou dynamiques : excitations collectives comme les phonons, solitons, vortex, ou encore les phénomènes de démixtion dans les systèmes à plusieurs composantes. Dans la mesure où c’est le seul paramètre pertinent, il est légitime de remplacer le potentiel réel par un potentiel modèle conduisant à la même longueur de diffusion.

Le but de ce paragraphe³ est de proposer un potentiel modèle simple de portée nulle, conduisant à une diffusion purement isotrope $f(k, \theta) = f(k)$ et dont le développement limité (67) s’arrête dès l’ordre 1 :

$$\frac{1}{f(k)} = -\frac{1}{a} - ik, \quad (69)$$

de sorte que la portée effective sera nulle. On notera que ce type de potentiel modèle admet au plus un état lié, puisque nous savons que les énergies des états liés correspondent aux pôles de l’amplitude de diffusion. Plus précisément si (69) est exacte, il y a un seul pôle $k = i/a$ et la fonction d’onde $\propto e^{ikr} = e^{-r/a}$ correspond à un état lié si $a > 0$; l’énergie de cet état est $-\hbar^2/(2m_r a^2)$. Il n’y a pas d’état lié si $a < 0$.

Satisfaire ce cahier des charges n’est pas évident; nous allons partir d’un potentiel de contact, proportionnel à la distribution de Dirac $\delta(r)$, qui semble le choix le plus naturel, mais nous allons rencontrer presque immédiatement des difficultés mathématiques liées à l’action de $\delta(r)$ sur des fonctions d’onde qui se comportent comme $1/r$ au voisinage de l’origine. Nous passerons à un potentiel de contact régularisé, le pseudo-potentiel, et nous montrerons son équivalence avec la condition aux limites de Bethe–Peierls.

4-1 Potentiel de contact en point de vue position

Nous allons commencer notre analyse en expliquant pourquoi un potentiel de contact de type $\hat{V} = \bar{g} \delta(r)$ ne peut pas convenir *stricto sensu*,

³. Je remercie Félix Werner pour des discussions éclairantes sur différents points abordés ici.

alors que son équivalent à une dimension est tout à fait légitime. Le potentiel de contact est défini par son action sur une fonction d'onde par

$$\hat{V}[\psi(\mathbf{r})] = \bar{g} \psi(0) \delta(\mathbf{r}), \quad \bar{g} \text{ réel positif ou négatif.} \quad (70)$$

Une difficulté surgit quand on s'intéresse à la fonction d'onde $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ de l'état stationnaire de diffusion, par exemple quand on la calcule à partir du développement de Born.

Rappelons le principe de ce développement. On part de l'équation intégrale de la diffusion

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int \mathcal{G}_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{V}[\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')] d^3r', \quad (71)$$

avec la fonction de Green associée à l'hamiltonien d'une particule libre :

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{r}) = -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (72)$$

On cherche la solution de cette équation en puissances du potentiel diffusant, donc ici du paramètre \bar{g} :

$$\psi_{\mathbf{k}} = \psi_{\mathbf{k}}^{(0)} + \psi_{\mathbf{k}}^{(1)} + \psi_{\mathbf{k}}^{(2)} + \dots \quad (73)$$

On a donc $\psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ et la relation de récurrence

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(n+1)}(\mathbf{r}) = \int \mathcal{G}_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{V}[\psi_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r}')] d^3r'. \quad (74)$$

Le calcul du terme d'ordre 1 ne pose pas de problème :

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) &= \int \mathcal{G}_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{V}[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}] d^3r' = \bar{g} \int \mathcal{G}_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}') d^3r' \\ &= \bar{g} \mathcal{G}_0(\mathbf{r}) = -\frac{\bar{g}m_r}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r}. \end{aligned} \quad (75)$$

Le problème survient quand on cherche à calculer le terme d'ordre 2 dans le développement de $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}^{(2)}(\mathbf{r}) &= \int \mathcal{G}_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{V}[\psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}')] d^3r' \\ &= -\frac{\bar{g}m_r}{2\pi\hbar^2} \int \mathcal{G}_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{V}\left[\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}}{r'}\right] d^3r' \end{aligned} \quad (76)$$

où nous avons utilisé le résultat (75) donnant $\psi_{\mathbf{k}}$ à l'ordre 1 en V . On voit que l'on est alors amené à faire agir le potentiel \hat{V} , donc la distribution de Dirac, sur une fonction qui diverge en $r' = 0$!

L'action de $\delta(\mathbf{r})$ sur la fonction $1/r$ n'a évidemment pas de sens mathématique bien défini et on ne peut donc pas utiliser cette distribution $\delta(\mathbf{r})$ telle quelle : il va falloir la régulariser et cela constituera l'objet des paragraphes 4-3 et 4-4. Auparavant, il est malgré tout utile de reprendre le problème de la "vraie" distribution de Dirac en point de vue impulsion, c'est-à-dire étudier le comportement des éléments de la matrice de diffusion $\hat{T}(E)$ entre deux ondes planes.

4-2 Potentiel de contact en point de vue impulsion

Dans le paragraphe qui précède, nous nous sommes concentrés sur les fonctions propres en point de vue position, et nous avons été bloqués à l'ordre 2 du développement de Born quand il a fallu faire agir $\delta(\mathbf{r})$ sur la fonction $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}/r$. Nous allons maintenant reprendre le même problème, mais en point de vue impulsion.

Nous utilisons de nouveau le développement de Born, que nous écrivons cette fois-ci en terme de la matrice $\hat{T}(E)$ introduite au chapitre 2 :

$$\hat{T}(E) = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0_+} \hat{V} + \dots, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}. \quad (77)$$

À l'ordre 1 en \bar{g} , le calcul de l'élément de matrice de \hat{T} entre deux états d'impulsion quelconques \mathbf{q}_1 et \mathbf{q}_2 ne pose aucun problème⁴ :

$$\text{Ordre 1 : } \langle \mathbf{q}_1 | \hat{T} | \mathbf{q}_2 \rangle = \langle \mathbf{q}_1 | \hat{V} | \mathbf{q}_2 \rangle = \bar{g} \int e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}} \delta(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}} d^3r = \bar{g}. \quad (80)$$

4. Rappelons que nous posons dans tout ce cours (cf. chapitre 2) :

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{q} \rangle = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad \langle \mathbf{q} | \mathbf{q}' \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'), \quad (78)$$

de sorte que les relations de fermeture en impulsion et en position s'écrivent :

$$\hat{1} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int |\mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{q}| d^3q = \int |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| d^3r. \quad (79)$$

À l'ordre 2 en revanche, des problèmes surgissent. On trouve en insérant la relation de fermeture (79) pour l'impulsion au niveau du propagateur libre $1/(E - \hat{H}_0 + i0_+)$:

$$\text{Ordre 2 : } \langle \mathbf{q}_1 | \hat{T} | \mathbf{q}_2 \rangle = \bar{g} + \frac{\bar{g}^2}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{E - \varepsilon(q) + i0_+} d^3q, \quad (81)$$

avec $\varepsilon(q) = \hbar^2 q^2 / 2m_r$. Or la quantité

$$\mathcal{I}(E) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{E - \varepsilon(q) + i0_+} d^3q \quad (82)$$

est divergente quand on effectue la somme sur q jusqu'à l'infini. Ce problème est bien sûr le même que celui rencontré en point de vue position, avec l'action de $\delta(\mathbf{r})$ sur la fonction $1/r$.

Néanmoins, oublions momentanément que $\mathcal{I}(E)$ est divergente. Tous les ordres de la série de Born peuvent être traités comme on l'a fait ci-dessus pour l'ordre 1 et on aboutit à une série géométrique que nous resomons :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q}_1 | \hat{T}(E) | \mathbf{q}_2 \rangle &= \bar{g} \left\{ 1 + \bar{g}\mathcal{I}(E) + [\bar{g}\mathcal{I}(E)]^2 + \dots \right\} \\ &= \frac{\bar{g}}{1 - \bar{g}\mathcal{I}(E)}. \end{aligned} \quad (83)$$

Nous allons maintenant voir comment donner un sens à cette resommation formelle en introduisant une coupure dans l'espace des impulsions. Nous supposons que l'intégrale sur les moments q ne s'étend pas jusqu'à l'infini, mais s'arrête à une valeur de coupure notée q_{\max} . L'intégrale se calcule alors aisément et on trouve (à un terme en $1/q_{\max}$ près) :

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(E) &= -\frac{m_r}{\pi^2 \hbar^2} \int_0^{q_{\max}} \frac{q^2}{q^2 - k^2 - i0_+} dq \\ &= -\frac{m_r}{\pi^2 \hbar^2} \left(q_{\max} + i \frac{\pi k}{2} \right). \end{aligned} \quad (84)$$

De manière générale, l'amplitude de diffusion du vecteur d'onde \mathbf{k} vers le vecteur d'onde \mathbf{k}' s'écrit en fonction des éléments de matrice de \hat{T} (cf. chapitre 2) :

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m_r}{2\pi \hbar^2} \langle \mathbf{k}' | \hat{T} | \mathbf{k} \rangle \quad (85)$$

ce qui donne en utilisant (83) et (84) :

$$\frac{1}{f(k)} = -\frac{2\pi \hbar^2}{m_r} \left[\frac{1}{\bar{g}} - \mathcal{I}(E) \right] = -\frac{2\pi \hbar^2}{m_r \bar{g}} - \frac{2q_{\max}}{\pi} - ik. \quad (86)$$

Remarquons tout d'abord que nous retrouvons la forme demandée en (69), en particulier la partie imaginaire imposée par l'unitarité. Ensuite, nous pouvons grâce à la coupure assigner une longueur de diffusion à ce problème :

$$\frac{1}{a} = \frac{2\pi \hbar^2}{m_r \bar{g}} + \frac{2q_{\max}}{\pi}. \quad (87)$$

Cette expression est à la base d'une approche du problème en terme de renormalisation, utilisée par exemple pour calculer l'énergie d'un gaz de Bose en interaction faible à partir de la méthode de Bogoliubov (énergie de Lee-Huang-Yang).

— On suppose connus la longueur de diffusion physique a et le couplage g associé :

$$g = \frac{2\pi \hbar^2 a}{m_r} = \frac{4\pi \hbar^2 a}{m}. \quad (88)$$

— On se donne un couplage nu \bar{g} et une coupure q_{\max} vérifiant (87), qui se réécrit :

$$\frac{1}{g} = \frac{1}{\bar{g}} + Q_{\max} \quad \text{avec} \quad Q_{\max} = \frac{m_r q_{\max}}{\pi^2 \hbar^2}. \quad (89)$$

ou encore

$$\bar{g} = \frac{g}{1 - gQ_{\max}} \approx g(1 + gQ_{\max} + \dots). \quad (90)$$

— On mène les calculs pour le potentiel de contact $\bar{g} \delta(\mathbf{r})$, écrit en point de vue impulsion sur la base des ondes planes :

$$\frac{\bar{g}}{2L^3} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}_2} \hat{a}_{\mathbf{q}_1}, \quad (91)$$

avec les paramètres \bar{g} et Q_{\max} , et on réexprime le résultat final en fonction de g . Si le résultat est d'ordre 1 en \bar{g} , on remplace simplement \bar{g} par g , en utilisant (90) à l'ordre 0 en Q_{\max} . Si le résultat contient des termes allant à un ordre supérieur en \bar{g} , comme pour la correction de Lee-Huang-Yang, on fait un développement systématique de chaque

terme en utilisant là encore (90). Le résultat final pour une quantité physique doit s'exprimer uniquement en terme de g , les termes en Q_{\max} s'étant éliminés.

Pour une mise en place plus complète et plus rigoureuse de la procédure de renormalisation, on pourra consulter BRAATEN, KUSUNOKI et al. (2008).

4-3 Le pseudo-potentiel

Nous passons maintenant à l'étude d'un potentiel d'interaction \hat{V} de portée nulle ne présentant pas les singularités de la distribution de Dirac. La leçon de l'étude qui précède est qu'il faut "effacer" la divergence en $r = 0$ de la fonction e^{ikr}/r . Nous souhaitons arriver à ce résultat sans modifier l'action de $\delta(r)$ quand elle agit sur une fonction régulière en $r = 0$. Il y a de multiples façons pour arriver à ce but [voir OLSHANII & PRICOUPENKO (2001)]; la plus simple est celle proposée par HUANG & YANG (1957) [voir aussi BREIT (1947)], qui consiste à prendre

$$\hat{V}_{\text{pp}}[\psi(\mathbf{r})] = g \delta(\mathbf{r}) \left. \frac{\partial}{\partial r} [r\psi(\mathbf{r})] \right|_{r=0}. \quad (92)$$

Avec cette définition, toute fonction $\psi(\mathbf{r})$ qui diverge en 0 comme

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\alpha}{r} + \psi_{\text{reg}}(\mathbf{r}) \quad (93)$$

avec ψ_{reg} régulière en 0, conduit à une valeur bien définie pour $\hat{V}_{\text{pp}}\psi(\mathbf{r})$:

$$\hat{V}_{\text{pp}}[\psi(\mathbf{r})] = g \psi_{\text{reg}}(0) \quad (94)$$

quelle que soit la valeur de α qui est purement et simplement "effacée". En particulier, pour la fonction e^{ikr}/r qui provient de l'ordre 1 du développement de Born, on pose

$$\frac{e^{ikr}}{r} = \frac{1}{r} + \psi_{\text{reg}}(\mathbf{r}) \quad \text{avec} \quad \psi_{\text{reg}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{ikr} - 1}{r} \rightarrow ik \text{ quand } r \rightarrow 0, \quad (95)$$

et on obtient

$$\hat{V}_{\text{pp}} \left[\frac{e^{ikr}}{r} \right] = igk \delta(\mathbf{r}). \quad (96)$$

Il est remarquable que cette simple prescription suffise à permettre le calcul de tous les termes du développement de Born donnant les états de diffusion de l'hamiltonien

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 + \hat{V}_{\text{pp}}. \quad (97)$$

On aurait pu craindre que les termes d'ordre 2, 3, 4, ..., ne fassent apparaître des divergences de plus en plus marquées comme r^{-2} , r^{-3} , r^{-4} ; cela aurait en effet nécessité des procédures de régularisation avec une complexité croissante. Heureusement, il n'en est rien, comme on peut s'en convaincre en examinant le terme d'ordre 2. En reprenant son expression là où nous l'avons laissée [cf. (76)] et en utilisant (96), nous obtenons :

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(2)}(\mathbf{r}) = \frac{-gm_r}{2\pi\hbar^2} (igk) \int \mathcal{G}_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}') d^3r' = ik \left(\frac{-gm_r}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (98)$$

L'ordre 2 a donc la même structure mathématique en e^{ikr}/r que l'ordre 1, et il n'en diffère que par son préfacteur indépendant de r .

La quantité $gm_r/2\pi\hbar^2$ a la dimension d'une longueur et (en anticipant un peu sur la suite) nous la noterons

$$a \equiv \frac{gm_r}{2\pi\hbar^2}. \quad (99)$$

Nous verrons en effet que a est égale à la longueur de diffusion pour ce pseudo-potentiel.

Etat stationnaire de diffusion pour le pseudo-potentiel. Le bilan du calcul à l'ordre 2 inclus de l'état stationnaire de diffusion est

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - a \frac{e^{ikr}}{r} + ia^2 k \frac{e^{ikr}}{r} + \dots \quad (100)$$

Le calcul des ordres suivants ne pose alors pas de problème. La relation de récurrence (74) permet d'exprimer l'ordre $n + 1$ en fonction de l'ordre n :

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(n+1)}(\mathbf{r}) = \int \mathcal{G}_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{V}_{\text{pp}} [\psi_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r}')] d^3r', \quad (101)$$

ce qui donne

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(n+1)}(\mathbf{r}) = -ika \psi_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r}) = (-ika)^n \psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}). \quad (102)$$

Grâce à cette relation de récurrence, l'état stationnaire de diffusion est obtenu en calculant la série géométrique

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-ika)^n = \frac{1}{1 + ika} \quad (103)$$

d'où l'expression recherchée :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{1}{1 + ika} \psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) \quad (104)$$

ou encore

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{a}{1 + ika} \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (105)$$

Cet état est associé à l'amplitude de diffusion

$$f(k) = -\frac{a}{1 + ika} \quad \text{ou encore} \quad \frac{1}{f(k)} = -\frac{1}{a} - ik. \quad (106)$$

À titre d'exercice, on peut vérifier directement que $\psi_{\mathbf{k}}$ est solution de l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + \hat{V}_{\text{pp}}[\psi(\mathbf{r})] = E \psi(\mathbf{r}) \quad \text{avec} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}. \quad (107)$$

On utilise pour cela

$$\nabla^2 \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) = \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) + \nabla^2 \left(\frac{e^{ikr} - 1}{r} \right) \quad \text{avec} \quad \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta(\mathbf{r}) \quad (108)$$

et pour la fonction régulière à symétrie radiale $f(r) = (e^{ikr} - 1)/r$:

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rf) = (ik)^2 \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (109)$$

Cette vérification permet de montrer que la validité de l'expression de $\psi_{\mathbf{k}}$ n'est pas liée à la convergence de la série géométrique (103).

Il y a plusieurs remarques importantes à faire sur ce résultat :

- L'amplitude de diffusion ne dépend pas de l'angle θ , alors que nous n'avons pas fait l'hypothèse que k était petit. Le pseudo-potentiel a la particularité de ne provoquer de la diffusion que dans l'onde s , quelle que soit l'énergie de collision.

— L'expression (105) de l'état stationnaire de diffusion n'est pas seulement asymptotique comme pour un potentiel de portée non nulle : elle est valable en tout point \mathbf{r} différent de l'origine.

— La quantité que nous avons noté a correspond bien à la longueur de diffusion, définie comme $-\lim_{k \rightarrow 0} f(k)$.

— La partie imaginaire de $1/f(k)$ est bien égale à $-ik$, comme requis pour assurer l'unitarité et la conservation du flux de probabilité (théorème optique).

— L'expression de droite de (106), qui est valable quel que soit k , montre que la portée effective r_e du pseudo-potentiel est nulle.

— Tous les états de diffusion ont un comportement identique au voisinage de $r = 0$:

$$r \rightarrow 0 : \quad \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \propto \frac{1}{r} - \frac{1}{a} + \mathcal{O}(r). \quad (110)$$

Ce point jouera un rôle central pour l'établissement de la condition aux limites de Bethe-Peierls.

Etat lié du pseudo-potentiel. Dans un potentiel de contact à une dimension, $V(x) = g \delta(x)$, on trouve un (et un seul) état lié si et seulement si le coefficient g est négatif. Il en va presque de même pour le cas 3D, à une différence majeure près : le potentiel $\hat{V}_{\text{pp}}[\psi(\mathbf{r})] = g \delta(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial r} [r\psi(\mathbf{r})]$ admet un (et un seul) état lié si et seulement si g est positif!

Pour montrer ce résultat, le plus rapide est d'utiliser le fait (déjà mentionné à plusieurs reprises) que les états liés, quand ils existent, correspondent aux pôles de l'amplitude de diffusion. Dans le cas présent, nous connaissons l'expression exacte de l'amplitude de diffusion [cf. (106)]. Elle possède un unique pôle

$$1 + ika = 0 \quad \Rightarrow \quad k = \frac{i}{a}, \quad E = -\frac{\hbar^2}{2m_r a^2} \quad (111)$$

et ce pôle correspond à un état lié physique acceptable si et seulement si l'état correspondant $\sim e^{ikr}/r = e^{-r/a}/r$ est normalisable. Il faut donc que a et par conséquent g soient positifs.

Plus précisément, on peut vérifier explicitement que l'état

$$\psi_{\text{lié}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{-r/a}}{r} \quad (112)$$

est solution de l'équation de Schrödinger (107) pour l'énergie $E = -\hbar^2/(2m_r a^2)$. On utilise pour cela [cf. (108) et (109)]

$$\nabla^2 \left[\frac{e^{-r/a}}{r} \right] = -4\pi\delta(\mathbf{r}) + \frac{1}{a^2} \frac{e^{-r/a}}{r} \quad (113)$$

et

$$\hat{V}_{\text{PP}} \left[\frac{e^{-r/a}}{r} \right] = g\delta(\mathbf{r}) \frac{d}{dr} \left(r \frac{e^{-r/a}}{r} \right) = -\frac{g}{a} \delta(\mathbf{r}), \quad (114)$$

d'où le résultat puisque $g = 2\pi\hbar^2 a/m_r$. On remarque que la variation autour de $r = 0$ de cet état lié est identique à celle des états de diffusion [cf. (110)] :

$$r \rightarrow 0 : \quad \psi_{\text{lié}}(\mathbf{r}) \propto \frac{1}{r} - \frac{1}{a} + \mathcal{O}(r). \quad (115)$$

4-4 La condition aux limites de Bethe-Peierls

En cherchant les états propres de l'hamiltonien en présence du pseudo-potentiel, nous avons vu apparaître des fonctions d'onde variant comme $1/r$ au voisinage de l'origine. Ce type de variation n'est pas habituel : on ne le trouve pas pour les états propres de l'hamiltonien dans un potentiel régulier⁵. Quand $V(\mathbf{r})$ est une fonction continue de r , éventuellement divergente en $r = 0$ comme le potentiel coulombien, les états propres au voisinage de $r = 0$ s'écrivent $\psi(\mathbf{r}) = \beta_0 + \mathcal{O}(r)$, où $\mathcal{O}(r)$ représente un terme tendant vers 0 au moins linéairement quand $r \rightarrow 0$. L'apparition d'un terme en $1/r$ dans les états propres appelle plusieurs remarques :

5. La raison pour laquelle un potentiel $V(\mathbf{r})$ régulier ne peut pas donner naissance à un état propre $\psi(\mathbf{r})$ de H variant comme $1/r$ au voisinage de l'origine est simple. Raisonnons par l'absurde et supposons que ψ contienne un tel terme : $\psi(\mathbf{r}) = \alpha_1/r + \psi_{\text{reg}}(\mathbf{r})$ où ψ_{reg} est non-divergente en $r = 0$. Quand on applique $H = -\frac{\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$ sur ψ , le laplacien de l'énergie cinétique agissant sur le terme en $1/r$ fait apparaître $\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta(\mathbf{r})$. Si le potentiel $V(\mathbf{r})$ ne contient pas lui-même des termes proportionnels à la distribution de Dirac pour compenser ce $\delta(\mathbf{r})$ provenant de l'énergie cinétique, la fonction ψ ne pourra pas satisfaire $\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$.

— La variation en $1/r$ au voisinage de l'origine reste compatible avec le fait que la fonction est de carré sommable. En effet, l'intégrale

$$\int \left(\frac{1}{r} \right)^2 d^3r = \int \left(\frac{1}{r} \right)^2 4\pi r^2 dr \quad (116)$$

est convergente en $r = 0$. Ce ne serait pas le cas si la divergence était plus violente (comme $1/r^2$ par exemple).

— En présence du pseudo-potentiel \hat{V}_{PP} , les états propres s'écrivent au voisinage de $r = 0$

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\beta_{-1}}{r} + \beta_0 + \mathcal{O}(r), \quad (117)$$

où le terme en $\mathcal{O}(r)$ peut se développer en série $\sum_{n \geq 1} \beta_n(\theta, \varphi) r^n$. Le fait de voir apparaître dans ce développement un terme supplémentaire en β_{-1}/r pourrait laisser penser que l'on a "élargi" l'ensemble des fonctions accessibles grâce au pseudo-potentiel : le coefficient β_{-1} semble procurer un degré de liberté supplémentaire par rapport aux coefficients $\{\beta_0, \beta_1, \beta_2, \dots\}$. Il n'en est rien ; en effet, pour un pseudo-potentiel de longueur de diffusion a fixée, nous avons trouvé que tous les états propres de H , qu'ils soient libres ou liés, se comportent comme

$$\psi(\mathbf{r}) \propto \frac{1}{r} - \frac{1}{a} + \mathcal{O}(r). \quad (118)$$

Les coefficients β_{-1} et β_0 ne sont donc pas indépendants, mais reliés par $\beta_{-1} = -a\beta_0$.

Cette discussion suggère l'équivalence entre les deux points de vue suivants :

— La stratégie adoptée en § 4-3 consiste à ajouter le pseudo-potentiel \hat{V}_{PP} au terme d'énergie cinétique. On calcule ensuite les états propres (liés ou libres) de l'hamiltonien

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 + \hat{V}_{\text{PP}}. \quad (119)$$

On en déduit que tous ces états propres se comportent comme (118) et il en va donc de même pour toute fonction d'onde physiquement acceptable du système, qui doit s'écrire comme une combinaison linéaire des états propres de \hat{H} .

— On "oublie" \hat{V}_{pp} et on travaille avec l'hamiltonien d'une particule relative libre

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_r} \nabla^2, \quad (120)$$

mais on impose à toute fonction d'onde physiquement acceptable du système de se comporter comme

$$\psi(\mathbf{r}) \propto \frac{1}{r} - \frac{1}{a} + \mathcal{O}(r) \quad (121)$$

au voisinage de $\mathbf{r} = 0$ ou encore

$$\left. \frac{d}{dr} [r\psi(r)] \right|_{r=0} = -\frac{1}{a} [r\psi(r)]_{r=0}. \quad (122)$$

Ce deuxième point de vue, introduit par BETHE & PEIERLS (1935) [voir aussi WIGNER (1933)], est souvent privilégié quand on souhaite traiter des systèmes à plus de deux particules; la prise en compte des interactions se fait alors en imposant à la fonction d'onde à N corps de vérifier pour toute paire (i, j) [voir par exemple WERNER & CASTIN (2012) pour des bosons] :

$$r_{ij} \rightarrow 0 : \quad \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \left(\frac{1}{r_{ij}} - \frac{1}{a} \right) A_{ij} [\mathbf{R}_{ij}, \{r_k\}_{k \neq i, j}] + \mathcal{O}(r_{ij}) \quad (123)$$

où A_{ij} est une fonction régulière des coordonnées des $N - 2$ autres particules et de $\mathbf{R}_{ij} = (\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j)/2$.

L'action de \hat{H}_0 sur les états propres de \hat{H} trouvés en (105) et (112) se calcule simplement. On trouve pour l'état stationnaire de diffusion $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

$$\hat{H}_0 \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \frac{a}{1 + ika} \frac{2\pi\hbar^2}{m_r} \delta(\mathbf{r}) \quad (124)$$

et pour l'état lié $\psi_{\text{lié}}(\mathbf{r})$:

$$\hat{H}_0 \psi_{\text{lié}}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_r a^2} \psi_{\text{lié}}(\mathbf{r}) + \frac{2\pi\hbar^2}{m_r} \delta(\mathbf{r}). \quad (125)$$

Dans ce point de vue, le point $\mathbf{r} = 0$ est singulier puisque toutes les fonctions d'onde y sont infinies et il est plus simple d'écrire

$$\text{En tout point } \mathbf{r} \neq 0 : \quad \hat{H}_0 \psi_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} \psi_{\mathbf{k}}, \quad (126)$$

et pour $a > 0$:

$$\text{En tout point } \mathbf{r} \neq 0 : \quad \hat{H}_0 \psi_{\text{lié}} = -\frac{\hbar^2}{2m_r a^2} \psi_{\text{lié}}, \quad (127)$$

puis de modifier très légèrement la définition du produit scalaire de deux fonctions

$$\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = \int' \psi_2^*(\mathbf{r}) \psi_1(\mathbf{r}) d^3r \quad (128)$$

où le symbole \int' signifie qu'on prend l'intégrale sur tout l'espace sauf une boule centrée en 0, dont on fait tendre le rayon vers 0. Avec cette définition, on a $\int' \delta(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) = 0$ pour toute fonction f . Cette redéfinition du produit scalaire permet d'affirmer que les $\psi_{\mathbf{k}}$ (complétés par $\psi_{\text{lié}}$ quand $a > 0$) forment une base orthogonale de l'espace des fonctions d'onde d'un système de longueur de diffusion a , cette base étant une base propre de l'hamiltonien d'énergie cinétique au sens de (126) et (127).

Domaine de l'hamiltonien La condition aux limites (121), qui doit être vérifiée pour toute fonction d'onde physiquement acceptable, définit le *domaine de l'hamiltonien*. On peut la rapprocher du traitement que l'on fait du puits carré infini 1D dans les cours d'introduction à la physique quantique : pour décrire le mouvement d'une particule sur le segment $x \in [0, L]$, on prend un hamiltonien purement cinétique, $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ et on impose à toute fonction d'onde physiquement acceptable de s'annuler en $x = 0$ et $x = L$, ce qui constitue le domaine de l'hamiltonien dans ce cas.

Il est essentiel de ne travailler qu'avec des fonctions de ce domaine sous peine d'incohérences dans les résultats. Dans le cas du puits carré infini 1D, CASTIN & WERNER (2012) fournissent l'exemple très simple de la fonction constante $1/\sqrt{L}$, qui a une énergie cinétique nulle alors que les énergies des états propres, satisfaisant les conditions aux limites $\psi(0) = \psi(L) = 0$, sont strictement positives : $E_n = n^2 E_1$ avec n entier strictement positif et l'énergie de l'état fondamental $E_{\text{fond}} \equiv E_1 = \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$. Cette apparente violation du théorème

$$\forall \psi : \quad \langle \psi | \hat{H}_0 | \psi \rangle \geq E_{\text{fond}} \quad (129)$$

est simplement due au fait que l'on a choisi $\psi(x) = 1/\sqrt{L}$ en dehors du domaine de \hat{H}_0 , donc non autorisée.

Dans le cas 3D qui nous intéresse ici, un exemple simple de l'importance de respecter le domaine de l'hamiltonien est obtenu pour le cas $g < 0$. On sait qu'il n'y a pas d'état lié dans ce cas, et qu'une base de fonctions propres est fournie par les états de diffusion, qui sont tous d'énergie positive. On en déduit que pour tout état physique du système, l'énergie moyenne $E(\psi) = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$ doit également être positive. Néanmoins, si on considère une fonction gaussienne $\psi(\mathbf{r}) \propto \exp(-r^2/4\sigma^2)$, on peut trouver des valeurs de σ conduisant à $E(\psi) < 0$. La raison en est simple : cette fonction gaussienne ne vérifie pas la condition aux limites (121) et n'est donc pas éligible comme état possible du système. On pourra consulter CASTIN (2007) pour une discussion plus approfondie de ce point.

Que vaut l'énergie cinétique ? La réponse à cette question est délicate pour les potentiels de portée nulle, que l'on utilise \hat{V}_{pp} ou la condition aux limites de Bethe–Peierls. Commençons par rappeler que pour des fonctions d'onde suffisamment régulières en $r = 0$, le terme d'énergie cinétique se calcule indifféremment par les deux membres de l'égalité suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} \int \psi^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) d^3r = +\frac{\hbar^2}{2m_r} \int \nabla(\psi^*(\mathbf{r})) \cdot \nabla(\psi(\mathbf{r})) d^3r. \quad (130)$$

On relie ces deux expressions par une intégration par parties, en supposant que la fonction d'onde décroît suffisamment vite à l'infini.

Le problème se complique quand on manipule des fonctions qui varient comme $1/r$ au voisinage de $r = 0$. Dans le membre de gauche, $\nabla^2 \psi(\mathbf{r})$ fait apparaître un $\delta(\mathbf{r})$ et la quantité $\int \psi^*(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}) d^3r$ n'est pas définie. Dans le membre de droite, $\nabla \psi$ et $\nabla \psi^*$ varient chacun comme $1/r^2$, de sorte que l'on se retrouve avec une intégrale de type $\int_0 r^{-2} dr$ qui est divergente.

Quand on prend l'option d'utiliser la condition aux limites de Bethe–Peierls, on peut donner un sens au membre de gauche, pourvu que l'on remplace \int par \int' comme nous l'avons vu plus haut. Mais le résultat est alors l'énergie totale, par exemple $-\hbar^2/2m_r a^2$ pour l'état lié. Ce n'est manifestement pas l'énergie cinétique qui doit être toujours positive.

On arrive donc à la conclusion suivante pour les états propres dans un potentiel de portée nulle : que l'on utilise \hat{V}_{pp} ou la condition aux limites de Bethe–Peierls, l'énergie cinétique moyenne, calculée grâce au membre

de droite de (130), est infinie (et positive) et l'énergie d'interaction est infinie (et négative); seule la somme des deux est une quantité finie, égale à $+\hbar^2 k^2/2m_r$ pour un état de diffusion et $-\hbar^2/2m_r a^2$ pour l'état lié. Pour donner un sens précis à chacune des deux composantes de l'énergie, il faut revenir à un potentiel de portée non nulle b .

Le fait que l'énergie cinétique soit infinie dans le cas étudié ici peut se comprendre simplement en regardant le comportement de la distribution en impulsion des états pour les grandes valeurs de \mathbf{q} . Pour une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$, la distribution en impulsion est donnée par $n(\mathbf{q}) = |\tilde{\psi}(\mathbf{q})|^2$, où $\tilde{\psi}(\mathbf{q})$ est la transformée de Fourier de $\psi(\mathbf{r})$. Or, on sait que la transformée de Fourier de $1/r$ est, à un coefficient numérique près, $1/q^2$:

$$2\pi^2 \frac{1}{r} = \int \frac{1}{q^2} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3q. \quad (131)$$

Comme une fonction $\psi(\mathbf{r})$ satisfaisant la condition aux limites de Bethe–Peierls diverge comme $1/r$ en l'origine (sauf si $a = 0$), le terme dominant de la distribution en impulsion de cette fonction pour les grands moments est $n(\mathbf{q}) \propto |1/q^2|^2 = 1/q^4$. On comprend alors immédiatement que l'intégrale à 3D donnant l'énergie cinétique

$$E_{\text{cin}} = \int \frac{\hbar^2 q^2}{2m_r} n(\mathbf{q}) d^3q \quad (132)$$

est divergente. Cette divergence joue un rôle central dans le formalisme du *contact de Tan*.

Références

- BETHE, Hans & Rudolf PEIERLS (1935), « Quantum theory of the dipton », in *Proceedings of the Royal Society of London. Series A-Mathematical and Physical Sciences* **148**, p. 146-156.
- BRAATEN, Eric, Masaoki KUSUNOKI & Dongqing ZHANG (2008), « Scattering Models for Ultracold Atoms », in *Annals of Physics* **323**, p. 1770-1815.
- BREIT, G (1947), « The scattering of slow neutrons by bound protons. I. Methods of calculation », in *Physical Review* **71**, p. 215.
- CASTIN, Y & F WERNER (2012), « The Unitary Gas and its Symmetry Properties », in *The BCS–BEC Crossover and the Unitary Fermi Gas*, sous la dir. de W. ZWERGER, Springer.
- CASTIN, Yvan (2007), « Basic theory tools for degenerate Fermi gases », in *Ultra-cold Fermi Gases*, sous la dir. de M. INGUSCIO, W. KETTERLE & C. SALOMON, Proceedings of the Enrico Fermi Varenna School (2006).
- DEMARCO, B., J. L. BOHN, J. P. BURKE, M. HOLLAND & D. S. JIN (1999), « Measurement of p -Wave Threshold Law Using Evaporatively Cooled Fermionic Atoms », in *Phys. Rev. Lett.* **82**, p. 4208-4211.
- GAO, Bo (1998), « Quantum-defect theory of atomic collisions and molecular vibration spectra », in *Phys. Rev. A* **58**, p. 4222-4225.
- GUÉRY-ODELIN, David, Francesca ZAMBELLI, Jean DALIBARD & Sandro STRINGARI (1999), « Collective oscillations of a classical gas confined in harmonic traps », in *Phys. Rev. A* **60**, p. 4851-4856.
- HUANG, Kerson & Chen Ning YANG (1957), « Quantum-mechanical many-body problem with hard-sphere interaction », in *Physical review* **105**, p. 767.
- JASKULA, J.-C., M. BONNEAU, G. B. PARTRIDGE, V. KRACHMALNICOFF, P. DEUAR, K. V. KHERUNTSYAN, A. ASPECT, D. BOIRON & C. I. WESTBROOK (2010), « Sub-Poissonian Number Differences in Four-Wave Mixing of Matter Waves », in *Phys. Rev. Lett.* **105**, p. 190402.
- LANDAU, L. D. & E. M. LIFSHITZ (1975), *Mécanique quantique*, Editions Mir.
- MESSIAH, A. (2003), *Mécanique Quantique*, Dunod.
- MOTT, Nevill Francis & Harrie Stewart Wilson MASSEY (1949), *The theory of atomic collisions*, Clarendon Press.
- OLSHANII, Maxim & Ludovic PRICOUPENKO (2001), « Rigorous Approach to the Problem of Ultraviolet Divergencies in Dilute Bose Gases », in *Phys. Rev. Lett.* **88**, p. 010402.
- PERRIN, A., H. CHANG, V. KRACHMALNICOFF, M. SCHELLEKENS, D. BOIRON, A. ASPECT & C. I. WESTBROOK (2007), « Observation of Atom Pairs in Spontaneous Four-Wave Mixing of Two Colliding Bose-Einstein Condensates », in *Phys. Rev. Lett.* **99**, p. 150405.
- WERNER, Félix & Yvan CASTIN (2012), « General relations for quantum gases in two and three dimensions. II. Bosons and mixtures », in *Physical Review A* **86**, p. 053633.
- WIGNER, E (1933), « Über die streuung von Neutronen an Protonen », in *Zeitschrift für Physik* **83**, p. 253-258.
- YOSHIDA, Shuhei M. & Masahito UEDA (2015), « Universal High-Momentum Asymptote and Thermodynamic Relations in a Spinless Fermi Gas with a Resonant p -Wave Interaction », in *Phys. Rev. Lett.* **115**, p. 135303.
- YU, Zhenhua, Joseph H. THYWISEN & Shizhong ZHANG (2015), « Universal Relations for a Fermi Gas Close to a p -Wave Interaction Resonance », in *Phys. Rev. Lett.* **115**, p. 135304.