

# Chapitre 2

## Éléments de théorie de la diffusion

### Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Les états stationnaires de diffusion . . . . .</b>	<b>2</b>
1-1	Le problème à deux corps . . . . .	2
1-2	L'équation intégrale de la diffusion . . . . .	3
1-3	L'approximation de Born . . . . .	4
<b>2</b>	<b>La formulation opératorielle . . . . .</b>	<b>4</b>
2-1	Les opérateurs de Green $\hat{G}_0$ et $\hat{G}$ . . . . .	4
2-2	La matrice de transition $\hat{T}$ . . . . .	5
2-3	La matrice de diffusion ( <i>scattering</i> ) $\hat{S}$ . . . . .	6
<b>3</b>	<b>L'amplitude de diffusion . . . . .</b>	<b>8</b>
3-1	Définition . . . . .	8
3-2	Section efficace . . . . .	9
3-3	Le théorème optique . . . . .	10
3-4	Le théorème optique dans le cas isotrope . . . . .	12
<b>4</b>	<b>La symétrie de rotation . . . . .</b>	<b>12</b>
4-1	Prise en compte de la symétrie . . . . .	12
4-2	Les déphasages $\delta_\ell$ . . . . .	13
4-3	Collision de particules indiscernables . . . . .	15
4-4	Barrière centrifuge et atomes froids . . . . .	16
4-5	Potentiel en $r^{-n}$ et critères de convergence . . . . .	17

---

Au chapitre précédent, nous avons expliqué l'origine physique du potentiel d'interaction entre deux atomes neutres et nous avons donné les ordres de grandeur en énergie et en distance qui le caractérise. Nous allons maintenant passer à la mise en place des outils qui vont permettre de traiter quantitativement la collision entre deux atomes sous l'effet de ce potentiel. Dans ce chapitre, nous allons présenter le formalisme général appelé *théorie de la diffusion*, pour nous concentrer dans le chapitre suivant sur le cas des collisions à basse énergie qui régissent la physique des gaz quantiques.

Nous avons également souligné au chapitre précédent que le potentiel d'interaction entre deux atomes neutres est en très bonne approximation isotrope. Cette invariance par rotation permet de simplifier considérablement la description de la collision, en tirant parti de la conservation du moment cinétique relatif des deux particules, conséquence directe de cette invariance. Nous expliquerons en particulier comment la prise en compte de cette symétrie permet de décrire la collision en termes de canaux indépendants uni-dimensionnels, chacun associé à un moment cinétique  $\ell$  particulier. Plus précisément, nous verrons que l'on peut associer à chaque canal un déphasage  $\delta_\ell(k)$  entre l'onde incidente et l'onde diffusée,  $k$  étant ici le vecteur d'onde relatif entre les deux partenaires de la collision.

Dans tout le cours de cette année, nous nous intéresserons à la physique à deux corps résultant de l'interaction entre une paire d'atomes. Toutefois, les quantités qui vont apparaître dans ce qui suit, en particulier les déphasages  $\delta_\ell(k)$ , sont directement utilisables pour aborder le problème

à  $N$  corps, au moins dans certaines limites. Une illustration simple de ce point réside dans la formule de BETH & UHLENBECK (1937), qui relie le deuxième coefficient du viriel  $b_2$  d'un gaz de bosons ou de fermions aux déphasages  $\delta_\ell(k)$  (voir par exemple HUANG (1987)) :

$$b_2(T) = \pm \frac{1}{2^{5/2}} + \frac{2^{3/2}}{\pi} \int_0^{+\infty} \sum_\ell (2\ell + 1) \frac{d\delta_\ell}{dk} e^{-\hbar^2 k^2 / m k_B T} dk. \quad (1)$$

Rappelons que le coefficient  $b_2$  donne la première correction au gaz parfait de Boltzmann dans le développement de l'équation d'état du fluide en puissances de la fugacité  $z = e^{\mu/k_B T}$  :

$$\frac{P\lambda^3}{k_B T} = z + b_2 z^2 + \mathcal{O}(z^3), \quad (2)$$

où  $\mu$  est le potentiel chimique,  $T$  la température,  $P$  la pression et  $\lambda = \hbar\sqrt{2\pi/mk_B T}$  la longueur d'onde thermique. Le gaz est supposé ici polarisé, c'est-à-dire qu'il n'occupe qu'un seul état de spin. Dans (1), le premier terme correspond à la correction due aux statistiques quantiques pour le gaz parfait et le second terme à la correction due aux interactions (pour simplifier l'écriture, nous avons supposé ici qu'il n'y avait pas de contribution d'éventuels états liés de dimères). Pour une raison qui apparaîtra plus clairement dans la suite de ce chapitre, la somme sur les moments cinétiques porte sur les valeurs paires de  $\ell$  pour les bosons et les valeurs impaires pour les fermions.

## 1 Les états stationnaires de diffusion

### 1-1 Le problème à deux corps

Nous avons expliqué au cours précédent comment aborder le problème de l'interaction à deux corps, en séparant le mouvement du centre de masse et celui de la particule relative. Partant de l'hamiltonien décrivant le mouvement de deux atomes  $A$  et  $B$  de masse  $m$  interagissant avec le potentiel  $V(r)$ ,

$$H_{\text{tot}} = \frac{\mathbf{p}_A^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_B^2}{2m} + V(|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|) = H_{\text{cdm}} + H_{\text{rel}}, \quad (3)$$

nous avons introduit les variables du centre de masse

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_A + \mathbf{r}_B), \quad \mathbf{P} = \mathbf{p}_A + \mathbf{p}_B \quad (4)$$

et celles de la variable relative

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B, \quad \mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_A - \mathbf{p}_B). \quad (5)$$

L'hamiltonien du centre de masse  $H_{\text{cdm}} = \mathbf{P}^2/4m$  est simplement celui d'une particule libre de masse  $2m$  et ne présente donc pas d'intérêt particulier : une base d'états propres pour cet hamiltonien est formée par les ondes planes  $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}$  et nous supposerons dans la suite que nous nous sommes placés dans le référentiel du centre de masse, ce qui revient à poser  $\mathbf{K} = 0$ .

La partie intéressante de la physique de la collision entre les deux atomes est décrite par l'hamiltonien relatif

$$H_{\text{rel}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_r} + V(r), \quad (6)$$

où  $m_r = m/2$  est la masse réduite et nous allons nous intéresser aux états propres de l'opérateur hamiltonien relatif :

$$\hat{H}_{\text{rel}}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Le problème de la collision entre deux particules se ramène donc à l'étude de la diffusion d'une particule par un potentiel. Ce sujet est traité dans tous les bons ouvrages de physique quantique [voir par exemple MESSIAH (2003), LANDAU & LIFSHITZ (1975) et COHEN-TANNOUDJI, DIU et al. (1973)] et nous allons simplement résumer ici les résultats importants pour la suite du cours.

Rappelons que ces états propres sont de deux types :

- Si l'énergie  $E$  est inférieure à  $V(+\infty)$  – que nous prendrons égal à 0 par convention –, alors l'état  $\psi(\mathbf{r})$  est localisé autour de 0, correspondant à un *état lié* de la molécule di-atomique  $AB$ . Cet *état de vibration* correspond à un certain degré d'excitation de l'élongation  $AB$ .
- Si l'énergie  $E$  est supérieure à  $V(+\infty) = 0$ , l'état  $\psi(\mathbf{r})$  est asymptotiquement libre et décrit donc une collision entre  $A$  et  $B$ . Cet état est appelé *état stationnaire de diffusion*.

Dans cette section, nous nous intéressons au processus de collision, donc au cas  $E > 0$  et nous poserons  $E = \hbar^2 k^2 / 2m_r$ .

## 1-2 L'équation intégrale de la diffusion

Pour déterminer la forme des états stationnaires de diffusion, notre point de départ sera l'équation aux valeurs propres (7) que nous écrivons :

$$\frac{\hbar^2}{2m_r} (\nabla^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}). \quad (8)$$

Nous allons la considérer comme une équation différentielle où le terme de droite  $V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$  joue le rôle de source et nous allons utiliser la méthode des fonctions de Green pour la résoudre.

Nous partons donc d'une solution de l'équation sans second membre

$$\frac{\hbar^2}{2m_r} (\nabla^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (9)$$

que nous prenons sous forme d'une onde plane  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ . L'orientation du vecteur  $\mathbf{k}$  correspond à la direction de l'impulsion relative des particules avant la collision. Pour associer une solution de l'équation (8) avec second membre à cette solution  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  de l'équation libre, nous allons d'abord déterminer la fonction de Green de l'équation libre (9). Cela revient à résoudre

$$\frac{\hbar^2}{2m_r} (\nabla^2 + k^2) \mathcal{G}_0(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}), \quad (10)$$

dont deux solutions s'écrivent :

$$\frac{\hbar^2}{2m_r} \mathcal{G}_0^{(\pm)}(\mathbf{r}) = -\frac{e^{\pm i\mathbf{k}r}}{4\pi r} \quad (11)$$

Pour une raison qui va devenir claire dans le paragraphe suivant, nous utiliserons ici la fonction de Green  $\mathcal{G}_0^{(+)}$  qui correspond à une onde sphérique sortante.

Une fois connue cette fonction de Green, nous pouvons construire de manière formelle une solution  $\psi_{\mathbf{k}}$  de (8) en présence du potentiel sous la forme

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int \mathcal{G}_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3r'. \quad (12)$$

Cette équation porte le nom d'*équation intégrale de la diffusion* ou *équation de Lippmann-Schwinger* (LIPPMANN & SCHWINGER 1950).

L'équation (12) est une équation implicite, appelée en mathématiques *équation de Fredholm du second type* : on doit connaître  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$  pour évaluer l'intégrale dont le résultat donne ensuite  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ . On pourrait donc douter de sa pertinence pour notre problème. En fait, son intérêt est bien réel quand le potentiel  $V(\mathbf{r})$  a une portée  $b$  limitée, c'est-à-dire quand on peut le considérer comme négligeable pour  $r > b$ . Dans ce cas, (12) permet de relier les valeurs de  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  en tout point de l'espace, en particulier asymptotiquement loin de  $\mathbf{r} = 0$ , aux valeurs de  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$  au voisinage de 0. En effet, du fait de la présence de  $V(\mathbf{r}')$  dans l'intégrale, seules les valeurs de  $\mathbf{r}'$  proches de 0 contribuent de manière significative à cette intégrale.

Sur le plan mathématique, signalons qu'on peut prouver que l'équation (12) admet une solution unique, pourvu que la fonction  $V(\mathbf{r})$  soit suffisamment régulière. Cette propriété n'est plus vraie quand on généralise cette approche au cas de trois particules ou plus [voir par exemple JOACHAIN (1975), § 5.6 et § 16.1].

### Remarques

- La notion de portée pour  $V(\mathbf{r})$  est bien claire quand on traite un potentiel carré par exemple. Il nous faudra la préciser davantage quand nous nous intéresserons au potentiel de van der Waals, qui décroît comme  $1/r^6$  à l'infini.
- L'état stationnaire de diffusion  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  a été défini à partir de la fonction de Green sortante  $\mathcal{G}_0^{(+)}$  et il devrait en toute rigueur être noté  $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ . Nous omettrons ce  $(+)$  quand il n'y aura pas d'ambiguïté. On peut également définir un état stationnaire de diffusion entrant, noté  $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r})$ , à partir de  $\mathcal{G}_0^{(-)}$ . Nous n'aurons pas besoin de ce type d'état, sauf au paragraphe 2-3.
- On pourra vérifier que les états stationnaires de diffusion  $\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r})$  forment un ensemble orthonormé de fonctions de l'espace de Hilbert quand  $\mathbf{k}$  décrit tout l'espace des vecteurs d'onde. On peut obtenir une base de cet espace en ajoutant à cet ensemble les éventuels états liés de  $\hat{H}_0 + \hat{V}$ . De même, on peut former une base orthonormée de l'espace de Hilbert en utilisant l'ensemble des  $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r})$  complétés par les mêmes états liés. En revanche, nous ne pouvons rien dire à ce stade en ce qui concerne le produit scalaire d'un  $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$  et d'un  $\psi_{\mathbf{k}'}^{(-)}$ . Nous ver-

rons en § 2-3 que ce produit fournit en fait les éléments de matrice de l'opérateur de diffusion  $\hat{S}$ .

### 1-3 L'approximation de Born

Comme nous venons de le mentionner, l'équation (12) est implicite puisque l'intégrande fait intervenir la fonction inconnue  $\psi_{\mathbf{k}}$ . Toutefois, cette expression se prête bien à un développement perturbatif explicite vis-à-vis du potentiel  $V$ , puisque l'intégrande est lui-même proportionnel à  $V$ . En termes plus précis, le calcul de l'état de diffusion à l'ordre  $n$  en  $V$  nécessite pour le membre de droite la connaissance de  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$  à l'ordre  $n - 1$  seulement. Le développement perturbatif que l'on peut ainsi générer est appelé *développement de Born*.

Commençons par le résultat de ce développement à l'ordre le plus bas. À l'ordre 0 en  $V$ , l'état stationnaire de diffusion est égal à la fonction d'onde incidente  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ . L'état stationnaire de diffusion s'écrit donc à l'ordre 1 en  $V$  :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int \mathcal{G}_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} d^3r', \quad (13)$$

qui se calcule sans difficulté (au moins numériquement) pour un potentiel  $V(\mathbf{r}')$  quelconque.

Ce développement de Born peut être mené à un ordre quelconque et conduit à une série infinie de termes :

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ &+ \int \mathcal{G}_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} d^3r' \\ &+ \iint \mathcal{G}_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \mathcal{G}_0^{(+)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') V(\mathbf{r}'') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}''} d^3r' d^3r'' \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (14)$$

La discussion de la validité de l'approximation de Born, et plus généralement de la convergence du développement de Born, n'est pas un problème simple. On pourra consulter par exemple MESSIAH (2003) et LANDAU & LIFSHITZ (1975). Dans la limite basse énergie qui va nous intéresser dans la suite, on trouve la condition nécessaire suivante : la partie attractive

du potentiel  $V(r)$  doit être suffisamment peu profonde pour ne supporter aucun état lié. En pratique, ce n'est pas le cas des potentiels interatomiques réels, comme nous l'avons vu au chapitre 1. Il n'est donc pas possible d'utiliser l'approximation de Born pour ces potentiels. En revanche, nous pourrions être amenés à utiliser des potentiels modèles pour lesquels cette approximation sera pertinente.

## 2 La formulation opératorielle

La manipulation d'expressions intégrales comme (12) peut être lourde, en particulier quand on veut procéder à des développements comme celui de Born. Pour simplifier l'écriture (sans changer en quoi que ce soit le problème), on peut adopter une écriture plus formelle en terme d'opérateurs et de kets de Dirac. Au delà de la simplification d'écriture, cette *théorie formelle des collisions* présente l'avantage de s'appliquer à une classe plus vaste de problèmes, que ce soit la diffusion de particules matérielles avec un degré de liberté interne (spin), ou encore la diffusion de photons par des atomes ou de phonons sur des impuretés dans un cristal.

### 2-1 Les opérateurs de Green $\hat{G}_0$ et $\hat{G}$

L'équation de départ (8) du paragraphe précédent peut se mettre sous la forme

$$(E - \hat{H}_0) |\psi\rangle = \hat{V} |\psi\rangle, \quad (15)$$

où  $\hat{H}_0$  est ici est l'hamiltonien d'une particule libre de masse  $m_r$  :  $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m_r$ . Sa solution (12) s'écrit

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \hat{G}_0^{(+)}(E) \hat{V} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (16)$$

où l'opérateur  $\hat{G}_0^{(+)}(E)$ , appelé *opérateur de Green* ou *résolvante* de l'hamiltonien  $\hat{H}_0$ , s'écrit formellement

$$\hat{G}_0^{(+)}(E) = \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0_+} \quad (17)$$

pour représenter l'inverse de  $E - \hat{H}_0$ . Notons que l'on doit ajouter une partie imaginaire au dénominateur (ici infiniment petite et notée  $i0_+$ ) pour éviter les divergences quand  $E$  est égale à une valeur propre de  $\hat{H}_0$ . En pratique, cette partie imaginaire se traite via l'égalité au sens des distributions :

$$\frac{1}{x - x_0 + i0_+} = \mathcal{PP} \left( \frac{1}{x - x_0} \right) - i\pi\delta(x - x_0), \quad (18)$$

où  $\mathcal{PP}$  désigne l'intégrale en partie principale. On pourra vérifier directement que

$$\langle \mathbf{r} | \hat{G}_0^{(+)} | \mathbf{r}' \rangle = \mathcal{G}_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (19)$$

Une relation similaire pour la fonction de Green entrante  $\mathcal{G}_0^{(-)}$  est obtenue en prenant une partie imaginaire  $i0_-$  au lieu de  $i0_+$  dans la définition (17) de l'opérateur de Green. Dans ce qui suit, nous omettrons l'exposant "(+)" de  $\hat{G}_0^{(+)}(E)$  quand il n'y a pas d'ambiguïté.

On peut également introduire l'opérateur de Green de l'hamiltonien total  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  :

$$\hat{G}^{(+)}(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + i0_+}. \quad (20)$$

Contrairement à  $\hat{G}_0$ , il n'est généralement pas possible de calculer explicitement les éléments de matrice de  $\hat{G}$  en point de vue position. Néanmoins, cet opérateur va jouer un rôle central dans la suite.

Il est utile d'établir un certain nombre de relations très simples entre  $\hat{G}$  et  $\hat{G}_0$ . Partant de :

$$E - \hat{H} + i0_+ = E - \hat{H}_0 + i0_+ - \hat{V}, \quad (21)$$

on obtient immédiatement

$$\frac{1}{\hat{G}} = \frac{1}{\hat{G}_0} - \hat{V}, \quad (22)$$

ou encore, en multipliant (22) à gauche par  $\hat{G}$  et à droite par  $\hat{G}_0$  :

$$\hat{G}_0 = \hat{G} - \hat{G}\hat{V}\hat{G}_0 \quad (23)$$

ce qu'on écrira dans la suite :

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}\hat{V}\hat{G}_0. \quad (24)$$

Bien entendu, on aurait également pu multiplier (22) à droite par  $\hat{G}$  et à gauche par  $\hat{G}_0$  pour obtenir :

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}. \quad (25)$$

On peut ensuite itérer les relations (23) et (24) en substituant à  $G$  son expression :

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G} \quad (26)$$

$$= \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 \quad (27)$$

$$= \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 \quad (28)$$

et ainsi de suite, l'important étant qu'il y ait un et un seul  $\hat{G}$  dans le dernier terme de la somme.

En itérant cette procédure à l'infini, on peut aussi exprimer  $\hat{G}$  comme une série de produits ne faisant intervenir que  $\hat{G}_0$  et  $\hat{V}$  :

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \hat{G}_0(\hat{V}\hat{G}_0)^2 + \dots \quad (29)$$

## 2-2 La matrice de transition $\hat{T}$

L'approximation de Born à l'ordre 1 en  $\hat{V}$  donnée en (13) s'écrit avec ces notations :

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle \approx |\mathbf{k}\rangle + \hat{G}_0\hat{V}|\mathbf{k}\rangle, \quad (30)$$

où on a posé<sup>1</sup>  $\langle \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  et  $\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ . Le développement de Born infini (14) donne quant à lui :

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \hat{G}_0\hat{V}|\mathbf{k}\rangle + (\hat{G}_0\hat{V})^2|\mathbf{k}\rangle + \dots \quad (33)$$

1. Nous poserons dans tout ce cours :

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{q} \rangle = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad \langle \mathbf{q} | \mathbf{q}' \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'), \quad (31)$$

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

$$\hat{1} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int |\mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{q}| d^3q = \int |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| d^3r. \quad (32)$$

Pour la suite, il sera commode d'introduire l'opérateur (ou matrice) de transition  $\hat{T}(E)$  défini par

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \hat{V}(\hat{G}_0\hat{V})^2 + \dots \quad (34)$$

qui se resomme pour donner une autre forme de l'équation de Lippmann-Schwinger :

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{T}. \quad (35)$$

L'élément de matrice de  $\hat{T}(E)$  entre deux états  $|\mathbf{k}_i\rangle$  et  $|\mathbf{k}_f\rangle$  calculé à partir de (34) prend en compte tous les "chemins" permettant de coupler ces deux états par le potentiel  $\hat{V}$ , en partant l'ordre 1 (couplage direct), puis avec un état relai  $|\mathbf{k}_r\rangle$ , etc. :

$$\langle \mathbf{k}_f | \hat{T} | \mathbf{k}_i \rangle = \langle \mathbf{k}_f | \hat{V} | \mathbf{k}_i \rangle + \sum_{\mathbf{k}_r} \frac{\langle \mathbf{k}_f | \hat{V} | \mathbf{k}_r \rangle \langle \mathbf{k}_r | \hat{V} | \mathbf{k}_i \rangle}{E - E_r + i0_+} + \dots \quad (36)$$

avec pour chaque état relai un dénominateur faisant intervenir l'écart entre son énergie  $E_r$  et l'énergie  $E$  considérée.

L'opérateur  $\hat{T}$  fournit une écriture compacte pour l'état stationnaire de diffusion (33) :

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \hat{G}_0\hat{T}|\mathbf{k}\rangle. \quad (37)$$

On passe donc de l'expression approchée de Born (30) à l'expression exacte (37) en remplaçant l'opérateur  $\hat{V}$  par l'opérateur  $\hat{T}$ . Bien sûr, la simplicité formelle de ce résultat ne doit pas faire illusion : on a reporté toute la difficulté sur le calcul explicite de  $\hat{T}$ .

Par ailleurs, il est intéressant de remarquer l'identité

$$\hat{V}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \hat{T}|\mathbf{k}\rangle \quad (38)$$

qui se prouve simplement en combinant (15) et (37) :

$$\hat{V}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = (E - \hat{H}_0) \left[ |\mathbf{k}\rangle + \hat{G}_0\hat{T}|\mathbf{k}\rangle \right] = 0 + (E - \hat{H}_0) (E - \hat{H}_0)^{-1} \hat{T}|\mathbf{k}\rangle. \quad (39)$$

Il est possible d'exprimer la série (34) définissant l'opérateur  $\hat{T}$  en fonction de l'opérateur de Green  $\hat{G}$  de l'hamiltonien total. On a en effet :

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \hat{V} + \hat{V} \left[ \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \dots \right] \hat{V} \\ &= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}\hat{V}. \end{aligned} \quad (40)$$

Ce résultat est lui aussi assez formel, dans la mesure où le calcul explicite de  $\hat{G}(E)$  est généralement impossible à faire, au contraire du calcul de  $\hat{G}_0(E)$ . Il présente néanmoins un point très intéressant : si on prend pour l'énergie  $E$  une valeur négative correspondant à un état lié de  $\hat{H}$ , alors on doit voir apparaître une divergence dans l'expression de l'état stationnaire de diffusion. En anticipant légèrement sur ce qui va suivre, on déduit de cette expression que les pôles de l'amplitude de diffusion (directement reliée à  $\psi_{\mathbf{k}}$ ) donnent les énergies de ces états liés.

Pour terminer, indiquons que la relation  $\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}$  entre les deux opérateurs de Green et ses itérations permettent de réécrire l'état stationnaire de diffusion (37) :

$$\begin{aligned} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle &= |\mathbf{k}\rangle + \hat{G}_0(\hat{V} + \hat{V}\hat{G}\hat{V})|\mathbf{k}\rangle \\ &= |\mathbf{k}\rangle + (\hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G})\hat{V}|\mathbf{k}\rangle \\ &= |\mathbf{k}\rangle + \hat{G}\hat{V}|\mathbf{k}\rangle. \end{aligned} \quad (41)$$

Nous disposons donc d'une série d'expressions permettant de relier de manière explicite ou implicite l'onde plane  $|\mathbf{k}\rangle$  (état propre de  $\hat{H}_0$ ) et l'état stationnaire de diffusion  $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$  (état propre de  $\hat{H}$ ) :

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \hat{G}_0\hat{T}|\mathbf{k}\rangle \quad (42)$$

$$= |\mathbf{k}\rangle + \hat{G}_0\hat{V}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (43)$$

$$= |\mathbf{k}\rangle + \hat{G}\hat{V}|\mathbf{k}\rangle. \quad (44)$$

### 2-3 La matrice de diffusion (*scattering*) $\hat{S}$

En pratique, on étudie un processus de diffusion en préparant à un instant initial  $t_i$  un paquet d'ondes d'énergie  $E_i$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_i$  connus avec une bonne précision, ne recouvrant pas la zone où  $V(\mathbf{r})$  prend des valeurs significatives. Le paquet d'ondes se propage, arrive dans la zone où  $V(\mathbf{r})$  joue un rôle, puis repart sous forme d'une onde diffusée et d'une onde transmise. On s'intéresse alors à l'amplitude de probabilité pour trouver la particule diffusée avec un vecteur d'onde  $\mathbf{k}_f$  à un instant ultérieur  $t_f$ .

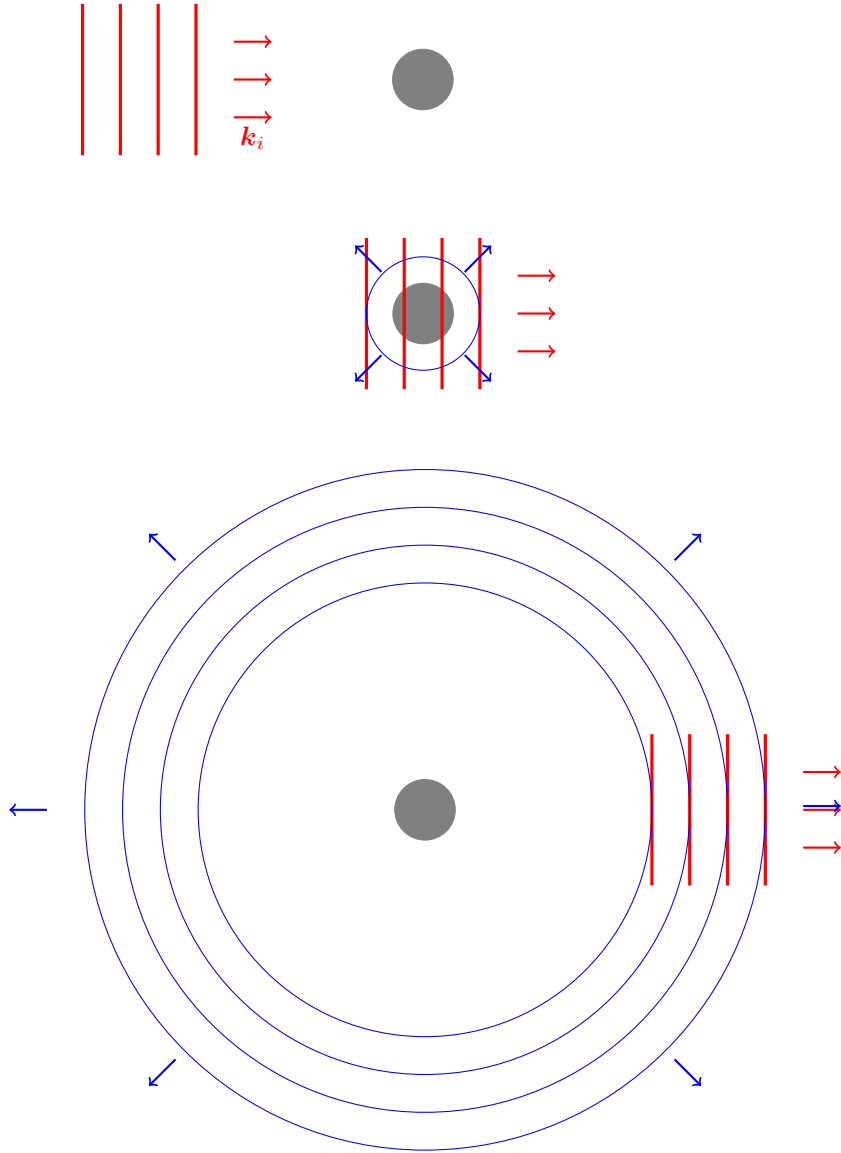


FIGURE 1. Paquet d'ondes incident de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_i$  (en rouge) et paquet d'ondes diffusé (en bleu).

La quantité que nous cherchons à évaluer est donc du type

$$\langle \mathbf{k}_f | \hat{U}(t_f, t_i) | \mathbf{k}_i \rangle, \quad t_i \rightarrow -\infty, t_f \rightarrow +\infty, \quad (45)$$

où  $\hat{U}(t_f, t_i) = e^{-i\hat{H}(t_f - t_i)/\hbar}$  est l'opérateur d'évolution associé à l'hamiltonien  $\hat{H}$ , mais il faut travailler un peu pour donner un sens non ambigu à cette expression. Dans un premier temps, nous allons réécrire l'expression précédente comme :

$$\langle \mathbf{k}_f | \hat{U}(t_f, 0) \hat{U}(0, t_i) | \mathbf{k}_i \rangle \quad (46)$$

que nous allons interpréter comme le produit scalaire de deux vecteurs de l'espace de Hilbert :

$$\hat{U}(0, t_i) | \mathbf{k}_i \rangle \quad \text{et} \quad \hat{U}^\dagger(t_f, 0) | \mathbf{k}_f \rangle, \quad (47)$$

où l'instant 0 peut être vu comme celui où le paquet d'ondes est arrivé sur le centre diffuseur et où l'interaction est maximale (la valeur précise de cet instant est sans importance).

Puisque nous voulons donner un sens à la limite de ces quantités quand  $t_i, t_f \rightarrow \pm\infty$ , il faut éliminer leurs oscillations "triviales". Considérons par exemple le premier de ces deux termes. Une première étape dans cette direction consiste à éliminer l'évolution libre de  $|\mathbf{k}_i\rangle$  en  $e^{iE_i t_i/\hbar}$  qui serait présente même si  $V$  était nul. On prend donc plutôt :

$$e^{-iE_i t_i/\hbar} \hat{U}(0, t_i) | \mathbf{k}_i \rangle, \quad (48)$$

ce qui correspond au *point de vue interaction*. De plus, pour simuler l'arrivée progressive du paquet d'ondes sur le centre diffuseur, nous n'allons pas considérer un branchement brutal du couplage  $\hat{V}$  à l'instant  $t_i$ , ce qui pourrait créer un régime transitoire non pertinent, mais plutôt prendre un branchement adiabatique de ce couplage et considérer :

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \eta \int_{-\infty}^0 e^{\eta t} e^{-iE_i t/\hbar} \hat{U}(0, -t) | \mathbf{k}_i \rangle dt. \quad (49)$$

Ce vecteur n'est autre que l'état stationnaire de diffusion  $|\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}\rangle$ . Pour le montrer, il suffit d'utiliser l'expression de l'opérateur d'évolution

$\hat{U}(0, -t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}$  et d'effectuer l'intégration sur le temps :

$$\begin{aligned}
 (49) &= \eta \left[ \int_{-\infty}^0 e^{-i(E_i - \hat{H} + i\eta\hbar)t/\hbar} dt \right] |\mathbf{k}_i\rangle \\
 &= \frac{i\eta\hbar}{E_i - \hat{H} + i\eta\hbar} |\mathbf{k}_i\rangle \\
 &= \left[ 1 + \frac{1}{E_i - \hat{H} + i\eta\hbar} (\hat{H} - \hat{H}_0) \right] |\mathbf{k}_i\rangle \\
 &= |\mathbf{k}_i\rangle + \hat{G}^{(+)}(E_i) \hat{V} |\mathbf{k}_i\rangle = |\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}\rangle
 \end{aligned} \tag{50}$$

où la limite  $\eta \rightarrow 0_+$  est implicite. Notons que nous avons mis ici la mention explicite  $(+)$  de l'opérateur de Green avancé, car nous allons également avoir besoin de l'opérateur de Green retardé dans ce qui suit.

De même, nous sommes amenés à modifier l'autre vecteur intervenant dans l'élément de matrice de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
 \hat{U}^\dagger(t_f, 0) |\mathbf{k}_f\rangle &\rightarrow \eta \int_0^{+\infty} e^{-\eta t} e^{-iE_f t/\hbar} \hat{U}^\dagger(t, 0) |\mathbf{k}_f\rangle \\
 &\rightarrow \left[ 1 + \frac{1}{E_f - \hat{H} - i\eta\hbar} (\hat{H} - \hat{H}_0) \right] |\mathbf{k}_f\rangle \\
 &\rightarrow |\mathbf{k}_f\rangle + \hat{G}^{(-)}(E_f) \hat{V} |\mathbf{k}_f\rangle = |\psi_{\mathbf{k}_f}^{(-)}\rangle.
 \end{aligned} \tag{51}$$

Maintenant que la notion de limite  $t_i, t_f \rightarrow \pm\infty$  est bien posée, nous pouvons définir l'amplitude de probabilité recherchée :

$$S_{fi} = \langle \psi_{\mathbf{k}_f}^{(-)} | \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)} \rangle \equiv \langle \mathbf{k}_f | \hat{S} | \mathbf{k}_i \rangle. \tag{52}$$

Le calcul explicite de cet élément de matrice se fait sans difficulté et on trouve :

$$S_{fi} = \delta_{\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f} - 2i\pi \delta(E_i - E_f) \langle \mathbf{k}_f | \hat{T}(E_i) | \mathbf{k}_i \rangle. \tag{53}$$

La connaissance de la matrice de transition  $\hat{T}$  est donc suffisante pour déterminer toutes les amplitudes de transition pertinentes dans un processus de diffusion. Nous allons approfondir cette notion plus concrètement dans le prochain paragraphe.

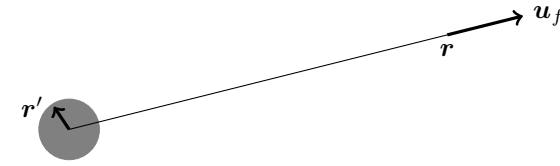


FIGURE 2. Disposition des points  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{r}'$  pour le calcul de l'amplitude de diffusion. La zone grisée représente la portée  $b$  du potentiel.

### 3 L'amplitude de diffusion

Nous allons maintenant chercher à donner un sens physique à l'expression (12) trouvée plus haut pour les états stationnaire de diffusion. Nous allons nous intéresser à leur comportement asymptotique, c'est-à-dire à leur valeur en un point bien en dehors de la portée du potentiel. Cela va nous permettre de dégager les notions d'amplitude de diffusion et de section efficace de collision, qui nous seront très utiles dans la suite.

#### 3-1 Définition

Pour exploiter (12), considérons un point  $\mathbf{r}$  situé dans une région très loin de la zone où  $V$  prend des valeurs significatives (figure 2). Nous pouvons développer la fonction de Green  $\mathcal{G}_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  sous la forme :

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{r}'} \tag{54}$$

où  $\mathbf{u}_f$  est le vecteur unitaire  $\mathbf{u}_f = \mathbf{r}/r$  donnant la direction où l'on regarde le produit final de la diffusion. L'équation intégrale de la diffusion devient

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(k, \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_f) \frac{e^{ikr}}{r} \tag{55}$$

où  $\mathbf{u}_i = \mathbf{k}/k$  est le vecteur unitaire associé au vecteur d'onde  $\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}_i$  initial et où on a défini l'amplitude de diffusion

$$f(k, \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_f) = -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{r}'} V(r') \psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}') d^3r', \tag{56}$$



qui est une fonction complexe de l'énergie  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ . En utilisant la formulation opératorielle développée en §2, cette définition s'écrit

$$f(k, \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_f) = -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \langle \mathbf{k}_f | \hat{V} | \psi_{\mathbf{k}_i} \rangle \quad (57)$$

avec  $\mathbf{k}_f = k\mathbf{u}_f$ , ou encore en utilisant (38) :

$$f(k, \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_f) = -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \langle \mathbf{k}_f | \hat{T} | \mathbf{k}_i \rangle. \quad (58)$$

Supposons pour simplifier les notations que le potentiel  $V(\mathbf{r})$  soit invariant par rotation. Cette invariance entraîne que l'amplitude de diffusion ne dépend en fait que de  $k$  et de l'angle  $\theta$  entre  $\mathbf{u}_i$  et  $\mathbf{u}_f$  :

$$f(k, \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_f) = f(k, \theta). \quad (59)$$

Tout comme l'équation intégrale de la diffusion, la forme (55) est implicite puisque le calcul de  $f(k, \theta)$  nécessite la connaissance de  $\psi_{\mathbf{k}}$ , au moins dans certaines régions de l'espace. Elle est néanmoins très parlante ; un état stationnaire de diffusion peut être vu comme la superposition d'une onde plane incidente  $\psi_{\mathbf{k}}^{(\text{inc})}$  et d'une onde diffusée  $\psi_{\mathbf{k}}^{(\text{dif})}$  :

$$\psi_{\mathbf{k}} = \psi_{\mathbf{k}}^{(\text{inc})} + \psi_{\mathbf{k}}^{(\text{dif})}, \quad (60)$$

avec l'onde incidente

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\text{inc})}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (61)$$

et l'onde diffusée caractérisée par son amplitude  $f(k, \theta)$  dans une direction donnée  $\theta$  :

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\text{dif})}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (62)$$

Notons que si nous avons utilisé la fonction de Green entrante  $\mathcal{G}_0^{(-)}$  au lieu de  $\mathcal{G}_0^{(+)}$ , nous aurions abouti à un état stationnaire de diffusion composé d'une onde plane et d'une onde sphérique entrante. En tant qu'état propre de  $H_{\text{rel}}$ , cet état est tout aussi légitime que (55), mais il correspond à une situation physique difficile à réaliser. Il s'agirait d'envoyer vers l'origine et de toutes les directions de l'espace des ondes avec l'amplitude adéquate pour qu'après collision, on forme l'onde plane progressive  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ .

**Retour sur l'approximation de Born.** Rappelons que cette approximation consiste à remplacer l'état stationnaire de diffusion (*a priori* inconnu) par son approximation d'ordre 0,  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ , dans l'intégrale de (12) ou de (56). L'amplitude de diffusion à l'ordre 1 en  $V$  s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \text{Approximation de Born : } f(k, \theta) &\approx -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} V(r') d^3r' \quad (63) \\ &\approx -\frac{2m_r}{q\hbar^2} \int_0^{+\infty} \sin(qr') V(r') r' dr', \end{aligned}$$

où l'on rappelle que  $\theta$  est l'angle entre les deux vecteurs unitaires  $\mathbf{u}_i = \mathbf{k}/k$  et  $\mathbf{u}_f = \mathbf{r}/r$ , et  $\mathbf{q} = k(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_f)$  avec  $q = 2k \sin(\theta/2)$ . À cet ordre du calcul, l'amplitude de diffusion est donc simplement proportionnelle à la transformée de Fourier du potentiel diffusant.

### 3-2 Section efficace

Pour rendre encore plus concret l'interprétation de l'état stationnaire de diffusion, il est utile d'introduire la notion de section efficace de collision.

On définit la section efficace différentielle  $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega)$  à partir de

$$\delta^2 \mathcal{A} = \frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega) \delta^2 \Omega. \quad (64)$$

Dans cette définition,  $\delta^2 \mathcal{A}$  (qui a la dimension d'une surface) est égale au rapport entre deux flux :

- le flux sortant dans l'angle solide  $\delta\Omega$  autour de la direction moyenne définie par  $\Omega$  (unité :  $\text{s}^{-1}$ )
- le flux entrant pour une direction incidente  $\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}_i$  bien définie (unité :  $\text{s}^{-1}\text{m}^{-2}$ ).

Cette grandeur est une propriété intrinsèque du potentiel  $V$  et ne dépend pas du flux incident, puisque le flux sortant lui est proportionnel.

Pour relier la section efficace différentielle à l'amplitude de diffusion, le plus simple est de calculer les courants de probabilité correspondant à l'onde incidente et à l'onde diffusée. Rappelons la définition générale du courant de probabilité associé à une fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r})$  :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \{ \psi^*(\mathbf{r}) \nabla [\psi(\mathbf{r})] \}. \quad (65)$$

On trouve ici pour le courant de probabilité associé à l'onde incidente (61)

$$\mathbf{J}^{(\text{inc})}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m_r} \text{Im} \left\{ \psi_{\mathbf{k}}^{(\text{inc})*} \nabla \left[ \psi_{\mathbf{k}}^{(\text{inc})} \right] \right\} = \frac{\hbar k}{m_r} \mathbf{u}_i \quad (66)$$

et pour le courant de probabilité associé à l'onde diffusée (62) :

$$\mathbf{J}^{(\text{dif})}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\hbar}{m_r} \text{Im} \left\{ \psi_{\mathbf{k}}^{(\text{dif})*} \nabla \left[ \psi_{\mathbf{k}}^{(\text{dif})} \right] \right\} = \frac{\hbar k}{m_r} |f(k, \theta)|^2 \frac{\mathbf{u}_f}{r^2} \quad (67)$$

Notons que nous nous sommes limités ici au terme dominant aux grands  $r$ , qui varie comme  $1/r^2$ . C'est en effet le seul terme qui contribue au flux sortant de manière asymptotique. Notons également qu'il existe une troisième contribution au courant de probabilité, provenant des termes croisés entre  $\psi_{\mathbf{k}}^{(\text{inc})}$  et  $\psi_{\mathbf{k}}^{(\text{dif})}$  dans (65). Nous ne prenons pas ce terme en compte pour l'instant. Nous verrons en effet lors de notre discussion du *théorème optique* que ce terme a une contribution nulle au flux diffusé en dehors de la diffusion vers l'avant, c'est-à-dire pour  $\theta = 0$ .

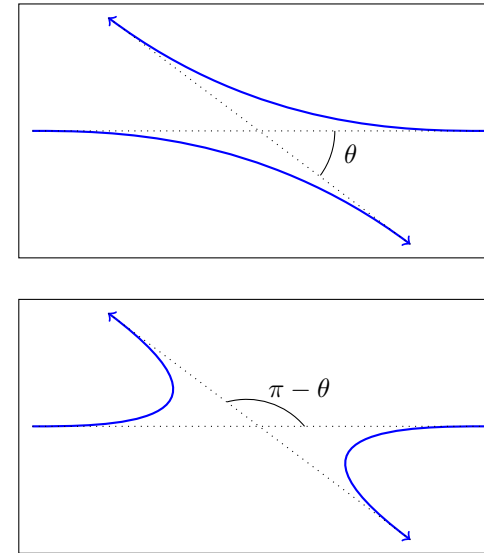
Le rapport entre les deux flux figurant dans la définition (64) donne alors le résultat très simple

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega) = |f(k, \theta)|^2. \quad (68)$$

Remarquons que dans notre raisonnement basé sur les courants de probabilité, nous avons supposé implicitement que nous sommes capables, au moins en principe, de distinguer entre l'état final correspondant à une diffusion avec l'angle  $\theta$  et une diffusion avec l'angle  $\pi - \theta$  (figure 3). Quand on regarde la diffusion d'une "vraie" particule par un potentiel  $V(r)$ , cela va de soi. Quand on s'intéresse à la collision entre deux particules identiques, c'est beaucoup moins évident : il faut que les deux processus représentés sur la figure 3 ne soient pas équivalents, ce qui impose que les particules en collision soient discernables, par exemple via leur état de spin. Quand les particules sont indiscernables, le résultat (68) doit être modifié, comme nous le verrons en §4-3.

On définit également la section efficace totale par

$$\sigma_{\text{tot}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d^2\Omega = 2\pi \int_0^\pi |f(k, \theta)|^2 \sin \theta d\theta. \quad (69)$$



**FIGURE 3.** Deux processus de collision conduisant à une diffusion de la particule relative de l'angle  $\theta$  (haut) et  $\pi - \theta$  (bas). Si les particules sont discernables, via leur état de spin par exemple, on peut en principe distinguer ces deux processus et le résultat (68) s'applique. Le cas de particules indiscernables est traité en §4-3.

Par construction, cette quantité est égale à l'aire de la surface qu'il faudrait mettre devant le faisceau incident pour bloquer un nombre de particules équivalent à celui prélevé sur le faisceau par le processus de diffusion.

### 3-3 Le théorème optique

Dans les paragraphes qui précèdent, nous sommes arrivés à la forme asymptotique suivante pour un état stationnaire de diffusion, c'est-à-dire un état propre de l'hamiltonien avec une énergie  $E = \hbar^2 k^2 / 2m_r$  :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (70)$$

Il ne faudrait pas déduire de cette forme simple que toute fonction complexe  $f(k, \theta)$  est éligible comme amplitude de diffusion. Il existe en fait

plusieurs contraintes sur cette fonction. Le but de ce paragraphe est de présenter l'une des plus importantes,

$$2 \operatorname{Im} [f(k, \theta = 0)] = k \int_0^\pi |f(k, \theta)|^2 \sin \theta \, d\theta \quad (71)$$

ou encore

$$\operatorname{Im} [f(k, \theta = 0)] = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}}, \quad (72)$$

appelée *théorème optique*. Pour une revue générale des propriétés que doit satisfaire l'amplitude de diffusion  $f$ , on pourra consulter par exemple GOLDBERGER & WATSON (2004), LANDAU & LIFSHITZ (1975) ou JOACHAIN (1975).

Le théorème optique trouve son origine dans l'équation de continuité vérifiée par toute solution  $\psi(\mathbf{r}, t)$  de l'équation de Schrödinger,

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (73)$$

où le courant de probabilité  $\mathbf{J}$  a été défini en (65) et où  $\rho = |\psi|^2$ . Cette relation est elle-même une conséquence du fait que l'évolution régie par l'équation de Schrödinger est unitaire.

Pour un état d'énergie  $E$  fixée, l'évolution temporelle de  $\psi$  est donnée par  $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, 0) e^{-iEt/\hbar}$  de sorte que  $\rho$  est constante au cours du temps. On doit donc avoir :

$$\text{État stationnaire : } \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (74)$$

Comme annoncé, cette relation vient mettre une contrainte forte sur les fonctions  $f(k, \theta)$  éligibles.

La condition  $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$  entraîne que le flux de  $\mathbf{J}$  à travers une sphère est nul. Prenons donc une sphère  $\mathcal{S}$  centrée en 0, de rayon  $r$  arbitrairement grand et imposons la contrainte

$$\int_{\mathcal{S}} \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{J} \, d^2\Omega = 0, \quad (75)$$

où  $\mathbf{u}_f$  est comme précédemment le vecteur unitaire  $\mathbf{r}/r$ . Le courant de probabilité est une fonction quadratique de l'état (70) et comporte donc trois termes :

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}^{(\text{inc})} + \mathbf{J}^{(\text{dif})} + \mathbf{J}^{(\text{interf})} \quad (76)$$

Les deux premiers termes ont d'ores et déjà été calculés au paragraphe précédent. Le courant  $\mathbf{J}^{(\text{inc})}$  donné en (66) est uniforme dans l'espace et il a donc un flux nul à travers la sphère  $\mathcal{S}$  :

$$\int_{\mathcal{S}} \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{J}^{(\text{inc})} \, d^2\Omega = 0. \quad (77)$$

Le courant  $\mathbf{J}^{(\text{dif})}$  donné en (67) est normal à la sphère et son flux n'est autre que la section efficace totale, à un coefficient multiplicatif près :

$$\int_{\mathcal{S}} \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{J}^{(\text{dif})} \, d^2\Omega = \frac{\hbar k}{m_r} \sigma_{\text{tot}}. \quad (78)$$

Il nous reste à évaluer la contribution du terme "d'interférence"  $\mathbf{J}^{(\text{interf})}$ , faisant intervenir à la fois la contribution de  $\psi_{\mathbf{k}}^{(\text{inc})}$  et celle de  $\psi_{\mathbf{k}}^{(\text{dif})}$  :

$$\mathbf{J}^{(\text{interf})} = \frac{\hbar}{m_r} \operatorname{Im} \left\{ \psi_{\mathbf{k}}^{(\text{inc})*} \nabla [\psi_{\mathbf{k}}^{(\text{dif})}] + \psi_{\mathbf{k}}^{(\text{dif})*} \nabla [\psi_{\mathbf{k}}^{(\text{inc})}] \right\} \quad (79)$$

Pour  $r$  grand, la forme asymptotique de  $\psi_{\mathbf{k}}^{(\text{dif})}$  conduit à :

$$\mathbf{J}^{(\text{interf})} = \frac{\hbar}{m_r} \operatorname{Im} \left\{ ik(\mathbf{u}_i + \mathbf{u}_f) \frac{f(k, \theta)}{r} e^{i(kr - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right\} \quad (80)$$

qui a pour flux à travers la sphère  $\mathcal{S}$  :

$$\int_{\mathcal{S}} \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{J}^{(\text{interf})} \, d^2\Omega = \frac{2\pi\hbar}{m_r} \operatorname{Im} \left\{ \int_0^\pi ikr (1 + \cos \theta) e^{ikr(1 - \cos \theta)} f(k, \theta) \sin \theta \, d\theta \right\}. \quad (81)$$

Quand on prend la limite  $r \rightarrow \infty$ , l'exponentielle  $e^{ikr(1 - \cos \theta)}$  oscille de plus en plus vite autour de 0 et annule la contribution des différents membres de l'intégrale, sauf si  $\theta$  est choisi très proche de 0 pour "adoucir" la variation de la phase  $kr(1 - \cos \theta)$ . En faisant un développement limité des différents termes au voisinage de  $\theta = 0$ , on arrive donc à :

$$\int_{\mathcal{S}} \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{J}^{(\text{interf})} \, d^2\Omega = \frac{4\pi\hbar}{m_r} \operatorname{Im} \left\{ f(k, 0) \int_0^\pi ikr e^{ikr\theta^2/2} \theta \, d\theta \right\}. \quad (82)$$

et l'intégrale restante est égale à  $-1$  (à un terme oscillant infiniment rapidement près).

Au final, on trouve que le flux total de  $\mathbf{J}$  à travers la sphère  $\mathcal{S}$  est égal à 0 si et seulement si la somme des trois contributions (77), (78) et (82) s'annule, soit :

$$0 + \frac{\hbar k}{m_r} \sigma_{\text{tot}} - \frac{4\pi\hbar}{m_r} \text{Im} \{ f(k, 0) \} = 0 \quad (83)$$

ce qui correspond au "théorème optique" annoncé.

La morale de ce théorème est une variante de "rien ne se perd, rien ne crée, tout se transforme" : les particules qui sont diffusées dans l'angle solide de  $4\pi$  stéradians sont prélevées sur le faisceau incident, qui donc être atténué. Cette atténuation n'apparaît pas de manière explicite sur l'expression (70) de l'état stationnaire de diffusion, mais elle est malgré tout bien présente sous forme d'une interférence (destructive) vers l'avant entre onde incidente et onde diffusée.

### 3-4 Le théorème optique dans le cas isotrope

Les chapitres qui vont suivre seront essentiellement consacrés au cas d'une diffusion isotrope, c'est-à-dire une amplitude de diffusion indépendante de l'angle  $\theta$ . Le théorème optique prend dans ce cas une forme très simple. La section efficace totale vaut :

$$\sigma_{\text{tot}} = 2\pi \int_0^\pi |f(k)|^2 \sin \theta \, d\theta = 4\pi |f(k)|^2 \quad (84)$$

de sorte que ce théorème impose

$$\text{Im} [f(k)] = k |f(k)|^2 \quad (85)$$

ou encore

$$\text{Im} \left[ \frac{1}{f(k)} \right] = -k. \quad (86)$$

La partie imaginaire de  $1/f$  est donc complètement fixée par le théorème optique, alors qu'aucune contrainte ne porte à ce stade sur sa partie réelle. Nous serons donc fréquemment amenés à vérifier que le résultat d'un modèle de collision isotrope conduit bien à :

$$\frac{1}{f(k)} = \text{fonction réelle}(k) - ik. \quad (87)$$

Remarquons que le théorème optique vient ici imposer une borne supérieure à  $|f(k)|$ . Il est en effet clair sur (87) que

$$\frac{1}{|f(k)|} \geq k \quad \Rightarrow \quad \sigma = 4\pi |f(k)|^2 \leq \frac{4\pi}{k^2}. \quad (88)$$

Quand cette inégalité est saturée, on dit qu'on a atteint le *régime unitaire*, c'est-à-dire la plus grande valeur autorisée pour la section efficace compte tenu de l'unitarité de la physique quantique.

## 4 La symétrie de rotation

Les termes dominants de l'interaction entre deux atomes neutres – potentiel de van der Waals à longue distance, potentiel d'échange à courte distance – sont généralement invariants par rotation. Cette invariance peut être brisée si l'interaction entre les dipôles magnétiques des atomes devient significative, comme c'est le cas pour certaines espèces comme le dysprosium, l'erbium ou le chrome : leur moment magnétique  $\mu$  dans l'état fondamental est en effet égal à plusieurs fois le magnéton de Bohr et l'énergie d'interaction magnétique  $\sim \mu^2/r^3$  peut devenir significative à très basse température. Pour les autres espèces, il est généralement raisonnable de négliger cette interaction dipôle-dipôle magnétique, ce qui nous ramène à un potentiel invariant par rotation.

Nous avons déjà tiré parti de cette invariance en écrivant l'amplitude de diffusion sous la forme  $f(k, \theta)$ , qui suppose que cette amplitude ne dépend que de l'angle entre les vecteurs  $\mathbf{u}$  et  $\mathbf{u}'$ , et pas de leur orientation particulière. Mais les conséquences de l'invariance par rotation vont bien au delà de cette simplification, comme nous allons le voir dans cette section.

### 4-1 Prise en compte de la symétrie

Pour un hamiltonien  $H_{\text{rel}}$  invariant par rotation, on peut chercher une base d'états propres communs à  $H_{\text{rel}}$  et au moment cinétique, plus précisément au carré du moment cinétique  $L^2$  et à sa projection sur un axe donné,  $z$  par exemple. En travaillant avec cette base d'états propres, on peut faire

un *développement en ondes partielles* du processus de collision, qui simplifie grandement son analyse et permet de la caractériser entièrement.

Considérons une fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \varphi)$  état propre de  $L^2$  et  $L_z$ . On sait d'après la théorie générale du moment cinétique orbital que la dépendance en  $\theta$  et  $\varphi$  de  $\psi(\mathbf{r})$  est fixée sous forme d'une harmonique sphérique :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) \quad (89)$$

avec

$$\hat{L}^2 \psi = \hbar^2 \ell(\ell + 1) \psi, \quad \hat{L}_z \psi = \hbar m \psi, \quad (90)$$

$\ell$  étant un entier positif ou nul et  $m$  un autre entier de l'ensemble  $\{-\ell, -\ell + 1, \dots, +\ell\}$ . La dépendance radiale  $\chi(r)$  est à ce stade quelconque car les opérateurs  $L^2$  et  $L_z$  ne portent que sur les variables angulaires  $\theta$  et  $\varphi$ .

En utilisant l'expression de l'opérateur  $\hat{p}^2 = -\hbar^2 \nabla^2$  en coordonnées sphériques

$$\hat{p}^2 \psi = -\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi) + \frac{1}{r^2} \hat{L}^2 \psi \quad (91)$$

on déduit que la fonction réduite  $u(r) = r\chi(r)$  est solution de l'équation différentielle à une dimension

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} \frac{d^2}{dr^2} u(r) + \left[ V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2m_r r^2} \right] u(r) = E u(r) \quad (92)$$

sur la demi-droite  $r \geq 0$ , avec la condition aux limites  $u(0) = 0$ .

L'interprétation physique de (92) est simple : grâce à l'invariance par rotation, on s'est ramené à une série de problèmes à une dimension indépendants. Chaque valeur de  $\ell$  correspond à un "canal de diffusion" pour une particule de masse  $m_r$  en mouvement sur une demi-droite dans le potentiel effectif :

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2m_r r^2}, \quad (93)$$

c'est-à-dire la somme du potentiel interatomique discuté au chapitre précédent et du potentiel centrifuge associé au moment cinétique  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ . Dans ce point de vue, le processus de diffusion se décrit en considérant une particule de masse  $m_r$  qui arrive depuis  $r = +\infty$  en bougeant dans le sens des  $r$  décroissants, pénètre dans la zone où le potentiel  $V(r)$  est appréciable, rebondit sur cette zone pour repartir vers  $r = +\infty$ . Toute l'information sur

le processus de diffusion est contenue dans le déphasage accumulé lors de l'interaction avec le potentiel  $V$ .

Pour obtenir la valeur de ce déphasage, il suffit de comparer les coefficients de  $e^{\pm ikr}$  dans la solution  $u(r)$  de l'équation radiale (92) selon que  $V(r)$  est présent ou non. On pose traditionnellement pour la forme asymptotique de la solution de l'équation radiale (92) pour une valeur de  $\ell$  donnée :

$$u_\ell(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} (-1)^{\ell+1} e^{-ikr} + e^{2i\delta_\ell} e^{ikr} \propto \sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_\ell) \quad (94)$$

et la résolution de l'équation radiale (92) doit fournir la phase  $\delta_\ell(E)$ . La raison d'être du coefficient  $(-1)^{\ell+1}$  apparaîtra un peu plus loin [eq. (99)], quand nous utiliserons le développement de l'état incident  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  sur ces états de moment cinétique bien défini.

**Remarque sur le théorème optique.** Le théorème optique que nous avons établi en toute généralité au paragraphe § 3-3 exprime la conservation du nombre de particules lors du processus de diffusion. Ici, nous avons pris implicitement en compte cette conservation dans chaque canal  $\ell$  en posant que l'effet du potentiel  $V(r)$  pouvait se décrire par le simple déphasage  $\delta_\ell$  de l'onde sortante, sans que son amplitude soit modifiée. On s'attend donc à ce que le théorème optique soit automatiquement satisfait dans le cas présent. Nous verrons un peu plus loin que c'est effectivement le cas pour chaque canal [cf. (105)].

## 4-2 Les déphasages $\delta_\ell$

Pour une énergie  $\hbar^2 k^2 / 2m_r$  donnée, l'ensemble des états  $\{Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) u_\ell(r)/r\}$  que nous venons d'introduire (complétés par les éventuels états liés dans le potentiel  $V(r)$ ) constitue une base de l'espace de Hilbert. On peut donc décomposer l'état stationnaire de diffusion  $\psi_{\mathbf{k}}(r)$  sur cette base. Choisissons l'axe  $z$  de quantification du moment cinétique parallèle au vecteur d'onde incident  $\mathbf{k}$ . Compte tenu de l'invariance par rotation du potentiel, l'état  $\psi_{\mathbf{k}}(r)$  est indépendant de l'angle azimutal  $\varphi$  et ne dépend que de  $r$  et  $\theta$ ; il va donc se décomposer sur les états

$Y_{\ell,m=0}(\theta) u_{\ell}(r)/r$  :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell} c_{\ell} \frac{u_{\ell}(r)}{r} Y_{\ell,0}(\theta) \quad (95)$$

avec par définition des harmoniques sphériques :

$$Y_{\ell,0}(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_{\ell}(\cos \theta), \quad (96)$$

où  $P_{\ell}(x)$  est le polynôme de Legendre de degré  $\ell$ , avec en  $\theta = 0$  la valeur  $P_{\ell}(1) = 1$ . En utilisant l'expression asymptotique (94) des fonctions  $u_{\ell}$ , nous obtenons donc le comportement attendu pour  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  aux grands  $r$  :

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{-ikr}}{r} \sum_{\ell} (-1)^{\ell+1} c_{\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_{\ell}(\cos \theta) \\ &+ \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{\ell} e^{2i\delta_{\ell}} c_{\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_{\ell}(\cos \theta) \end{aligned} \quad (97)$$

Pour relier l'amplitude de diffusion aux déphasages, il suffit de faire correspondre (97) à l'expression asymptotique de  $\psi_{\mathbf{k}}$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (98)$$

Une formule mathématique classique donne le développement de l'onde plane  $e^{ikz}$  [voir par exemple LANDAU & LIFSHITZ (1975)] :

$$e^{ikz} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{2ikr} \sum_{\ell} (2\ell+1) P_{\ell}(\cos \theta) [(-1)^{\ell+1} e^{-ikr} + e^{ikr}], \quad (99)$$

ce qui conduit à

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} (-1)^{\ell+1} (2\ell+1) P_{\ell}(\cos \theta) \\ &+ \frac{e^{ikr}}{r} \left[ f(k, \theta) + \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} (2\ell+1) P_{\ell}(\cos \theta) \right] \end{aligned} \quad (100)$$

La comparaison terme à terme de (97) et (100) de la composante en  $e^{-ikr}/r$  entraîne que

$$c_{\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} = 2\ell+1 \quad (101)$$

et donc pour la composante en  $e^{ikr}/r$  :

$$f(k, \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} (2\ell+1) P_{\ell}(\cos \theta) (e^{2i\delta_{\ell}} - 1). \quad (102)$$

Cette amplitude est nulle si et seulement si toutes les phase  $\delta_{\ell}$  sont nulles (modulo  $\pi$ ).

Il est commode d'écrire cette amplitude sous la forme

$$f(k, \theta) = \sum_{\ell} (2\ell+1) P_{\ell}(\cos \theta) f_{\ell}(k) \quad (103)$$

où nous avons introduit l'amplitude de diffusion du canal  $\ell$  :

$$f_{\ell}(k) = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_{\ell}} - 1) \quad (104)$$

ou encore

$$\frac{1}{f_{\ell}(k)} = \frac{k}{\tan \delta_{\ell}(k)} - ik. \quad (105)$$

La partie imaginaire de l'amplitude de diffusion de chaque canal  $\ell$  est donc égale à  $-k$ , quel que soit le potentiel diffusant.

Du fait des propriétés d'orthonormalité des harmoniques sphériques<sup>2</sup>, la section efficace totale, obtenue en intégrant  $|f(k, \theta)|^2$  sur l'angle solide, s'écrit :

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_{\ell} \sigma_{\ell} \quad \text{avec} \quad \sigma_{\ell} = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) \sin^2 [\delta_{\ell}(k)]. \quad (107)$$

Chaque onde partielle contribue donc de manière positive à la section efficace totale, la contribution de l'onde partielle  $\ell$  étant majorée par  $4\pi(2\ell+1)/k^2$ . On peut vérifier à partir de ces expressions le théorème optique annoncé plus haut.

2. On utilise notamment le fait que  $P_{\ell}(1) = 1$  et

$$\int_0^{\pi} P_{\ell}(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2\delta_{\ell,\ell'}}{2\ell+1}. \quad (106)$$

### 4-3 Collision de particules indiscernables

Intéressons-nous maintenant au cas d'une collision entre deux particules identiques, qui peuvent être bosoniques ou fermioniques. Pour simplifier, nous allons supposer que ces deux particules sont préparées dans le même état de spin. Le principe de Pauli impose donc la symétrie ou l'antisymétrie de la partie orbitale de la fonction d'onde :

$$\Psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \epsilon \Psi(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A), \quad (108)$$

avec le signe  $\epsilon = +$  pour des bosons et  $\epsilon = -$  pour des fermions. Quand on utilise les variables centre de masse et relative, l'échange  $\mathbf{r}_A \leftrightarrow \mathbf{r}_B$  se transcrit en :

$$\mathbf{R} \leftrightarrow \mathbf{R}, \quad \mathbf{r} \leftrightarrow -\mathbf{r}. \quad (109)$$

Le principe de Pauli n'apporte donc aucune contrainte sur l'état du centre de masse, mais il impose que les fonctions d'onde de la variable relative vérifient

$$\psi(-\mathbf{r}) = \epsilon \psi(\mathbf{r}). \quad (110)$$

Pour les coordonnées sphériques, la transformation  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  s'écrit :

$$r \rightarrow r, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi \quad (111)$$

Or les harmoniques sphériques vérifient la propriété

$$Y_{\ell, m}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^\ell Y_{\ell, m}(\theta, \varphi). \quad (112)$$

La prise en compte du principe de Pauli se ramène donc à la condition nécessaire et suffisante :

- Le nombre quantique  $\ell$  ne peut prendre que des valeurs paires ( $\ell = 0, 2, 4, \dots$ ) si les particules sont des bosons dans le même état de spin.
- Le nombre quantique  $\ell$  ne peut prendre que des valeurs impaires ( $\ell = 1, 3, \dots$ ) si les particules sont des fermions dans le même état de spin.

Après cette identification des canaux de collision autorisés, la caractérisation de la fonction d'onde radiale dans chaque canal est inchangée [cf. (92)]. Il reste néanmoins une modification supplémentaire à apporter, qui

porte sur le lien entre amplitude de diffusion et section efficace. Après symétrisation ou antisymétrisation, la partie asymptotique de l'état stationnaire de diffusion s'écrit en effet

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \epsilon e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}] + \frac{1}{\sqrt{2}} [f(k, \theta) + \epsilon f(k, \pi - \theta)] \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (113)$$

La section efficace de diffusion vaut alors

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} |f(k, \theta) + \epsilon f(k, \pi - \theta)|^2. \quad (114)$$

Quand on développe cette expression, on retrouve la somme des sections efficaces en  $\theta$  et en  $\pi - \theta$ , plus un terme d'interférence. Ce dernier peut avoir des conséquences spectaculaires : par exemple, pour des fermions polarisés, on trouve que la section efficace s'annule toujours pour  $\theta = \pi/2$ , quelle que soit l'énergie des partenaires de la collision.

L'expression (107) de la section efficace totale devient quant à elle :

$$\text{Bosons :} \quad \sigma_{\text{tot}} = 2 \sum_{\ell \text{ pair}} \sigma_{\ell} \quad (115)$$

$$\text{Fermions :} \quad \sigma_{\text{tot}} = 2 \sum_{\ell \text{ impair}} \sigma_{\ell} \quad (116)$$

avec toujours  $\sigma_{\ell} = (4\pi/k^2) (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\ell}(k)$ . En d'autres termes, il n'y a plus que la moitié des  $\ell$  qui contribuent à chaque somme ( $\ell$  pairs ou impairs selon la nature statistique des particules), mais leur contribution est doublée par rapport au cas de particules discernables.

Une jolie illustration de cet effet des statistiques quantiques sur la section efficace de collision est fournie par PLATTNER & SICK (1981). Ces auteurs ont étudié la diffusion coulombienne entre des noyaux de carbone  $^{12}\text{C}$  (un boson sans spin) et  $^{13}\text{C}$  (un fermion de spin 1/2). Un faisceau d'ions  $\text{C}^{2+}$  est accéléré à une énergie de l'ordre de 4 MeV est envoyé sur une cible composée elle-même de carbone. Les résultats principaux de cette étude sont montrés sur la figure 4. Si les noyaux sont discernables (*i.e.*  $^{12}\text{C} + ^{13}\text{C}$ ), la section efficace différentielle ne présente pas de structure marquée : elle décroît avec l'angle comme attendu pour la diffusion Rutherford :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}. \quad (117)$$

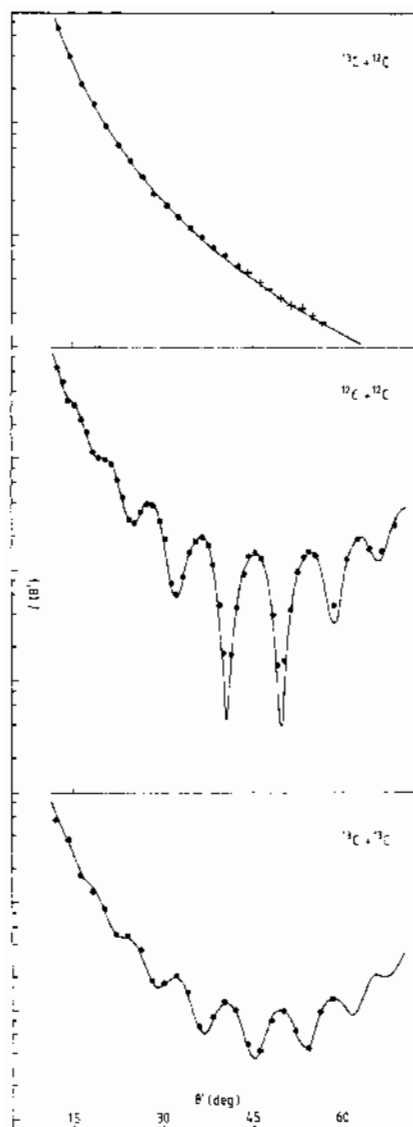


FIGURE 4. Diffusion coulombienne entre deux noyaux de carbone.  $^{12}\text{C}$  est un boson sans spin et  $^{13}\text{C}$  est un fermion de spin 1/2. L'angle  $\theta'$  est à peu près égal à  $\theta/2$ . Figure extraite de PLATTNER & SICK (1981).

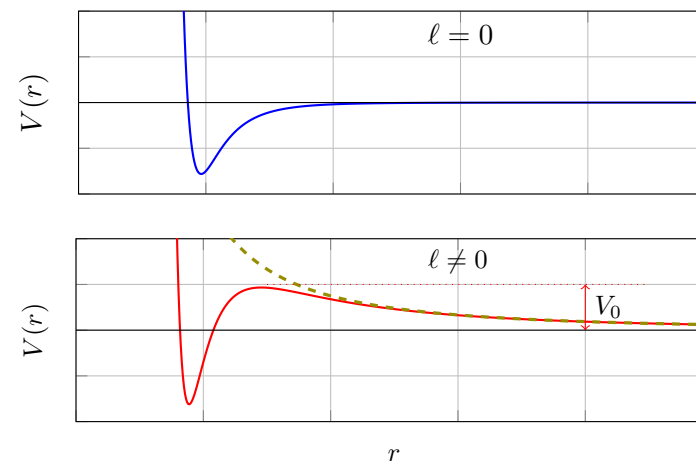


FIGURE 5. Potentiel effectif obtenu en sommant un potentiel de Lennard–Jones en  $C_{12}/r^{12} - C_6/r^6$  et le potentiel centrifuge proportionnel à  $1/r^2$ . Haut :  $\ell = 0$ , bas  $\ell \neq 0$ . La courbe en trait tireté vert représente le potentiel centrifuge. Pour des gaz quantiques, la hauteur de la barrière pour  $\ell \neq 0$  est généralement bien supérieure aux énergies thermiques.

En revanche, quand les deux noyaux sont identiques, des oscillations marquées sont visibles. La section efficace différentielle présente un maximum local à  $\theta = \pi/2$  pour des bosons, du fait de l'interférence constructive entre les deux processus de la figure 3. Pour des fermions, cette section efficace différentielle est au contraire minimale en  $\theta = \pi/2$ . Ce minimum n'est pas strictement nul, contrairement à ce qu'on attendrait à partir de (114). Cela vient du fait que les spins des noyaux  $^{13}\text{C}$  ne sont pas polarisés : seule une fraction des collisions porte donc dans ce cas sur des particules indiscernables.

#### 4-4 Barrière centrifuge et atomes froids

Nous pouvons distinguer deux cas dans le développement en ondes partielles que nous venons d'effectuer (cf. figure 5) :



- Le moment cinétique nul  $\ell = 0$ , auquel cas l'équation à résoudre pour trouver  $u(r)$  ne fait intervenir que  $V(r)$  :

$$\ell = 0 : \quad u''(r) + \left[ k^2 - \frac{2m_r}{\hbar^2} V(r) \right] u(r) = 0 \quad (118)$$

Ces collisions à moment cinétique nul sont appelées collisions dans l'onde s. Comme l'harmonique sphérique  $Y_{0,0}$  est indépendante de  $\theta$  et  $\varphi$ , la fonction d'onde dans ce canal est isotrope.

- Les moments cinétiques non nuls  $\ell = 1, 2, \dots$  :

$$\ell \neq 0 : \quad u''(r) + \left[ k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2m_r}{\hbar^2} V(r) \right] u(r) = 0 \quad (119)$$

auquel cas le terme dominant dans  $V_{\text{eff}}(r)$  quand  $r \rightarrow \infty$  est toujours le potentiel centrifuge qui décroît comme  $1/r^2$ , donc beaucoup moins vite que  $V(r)$  qui décroît comme  $1/r^6$ . Le potentiel effectif présente alors toujours une barrière strictement positive aux grands  $r$ .

La barrière centrifuge joue un rôle particulièrement important dans le cas de collisions entre atomes froids, donc peu énergétiques. Il est intéressant d'estimer la hauteur de la bosse de potentiel  $V_0$  résultant de la somme du potentiel de van der Waals et du potentiel centrifuge pour le plus petit moment cinétique non nul possible<sup>3</sup>,  $\ell = 1$  :

$$\text{Pour } r \text{ grand :} \quad V_{\text{eff}}(r) \approx -\frac{C_6}{r^6} + \frac{\hbar^2}{m_r r^2}. \quad (120)$$

Le maximum se trouve en  $r = (3m_r C_6 / \hbar^2)^{1/4}$  et conduit à

$$V_0 = \frac{2}{3\sqrt{3}} \frac{\hbar^3}{\sqrt{m_r^3 C_6}}. \quad (121)$$

Pour l'atome de rubidium, cela correspond à une énergie  $V_0 \approx k_B \times 30 \mu\text{K}$ . Les énergies thermiques des gaz quantiques sont généralement inférieures par un ou deux ordres de grandeur à cette barrière, qui joue donc bien un rôle déterminant.

3. En fait, comme nous l'avons vu en §4-3, le moment cinétique doit être pair pour des bosons indiscernables et la barrière devrait plutôt être estimée pour  $\ell = 2$ . Son effet n'en serait qu'augmenté.

## 4-5 Potentiel en loi de puissance et critères de convergence

Dans les chapitres qui vont suivre, nous serons amenés à utiliser fréquemment des potentiels en loi de puissance,  $V(r) \propto r^{-n}$ , en particulier le cas  $n = 6$  pour l'interaction de van der Waals. Il est utile de garder en mémoire la convergence des principales quantités introduites jusqu'à maintenant selon la valeur de  $n$ . Nous nous contentons ici de donner les résultats principaux et nous renvoyons vers des ouvrages spécialisés (MOTT & MASSEY 1949; LANDAU & LIFSHITZ 1975) le lecteur intéressé par leur preuve :

- Pour  $n \leq 1$ , les phases  $\delta_\ell(k)$  sont infinies. Elles ne sont bien définies que pour  $n > 1$ .
- Pour  $n \leq 2$ , la section efficace totale diverge. C'est en particulier le cas pour la diffusion coulombienne, comme on peut s'en convaincre à partir de la section efficace différentielle donnée en (117), qui se comporte comme  $1/\theta^4$  au voisinage de  $\theta = 0$ .
- La convergence de l'amplitude de diffusion vers l'avant  $\theta = 0$ , c'est-à-dire  $f(k, 0)$ , n'est obtenue que pour  $n > 3$ .

## Références

- BETH, Erich & George E UHLENBECK (1937), « The quantum theory of the non-ideal gas. II. Behaviour at low temperatures », in *Physica* **4**, p. 915-924.
- COHEN-TANNOUJJI, C., B. DIU & F. LALOË (1973), *Mécanique Quantique*, Hermann.
- GOLDBERGER, Marvin L & Kenneth M WATSON (2004), *Collision theory*, Dover Publications.
- HUANG, K. (1987), *Statistical Mechanics*, New York : Wiley.
- JOACHAIN, Charles Jean (1975), *Quantum collision theory*.
- LANDAU, L. D. & E. M. LIFSHITZ (1975), *Mécanique quantique*, Editions Mir.
- LIPPMANN, B. A. & Julian SCHWINGER (1950), « Variational Principles for Scattering Processes. I », in *Phys. Rev.* **79**, p. 469-480.
- MESSIAH, A. (2003), *Mécanique Quantique*, Dunod.
- MOTT, Nevill Francis & Harrie Stewart Wilson MASSEY (1949), *The theory of atomic collisions*, Clarendon Press.

PLATTNER, G-R & Ingo SICK (1981), « Coherence, interference and the Pauli principle : Coulomb scattering of carbon from carbon », in *European Journal of Physics* 2, p. 109.