TD 3
La longueur de diffusion

Ce TD est consacré à l'étude des collisions entre atomes froids. On introduit le concept de longueur de diffusion, fondamental pour l'étude des interactions inter atomiques dans les atomes froids, et en particulier les condensats de Bose-Einstein.

1 Introduction à la théorie de la diffusion

On rétablit dans cette section les résultats importants de la théorie des collisions élastiques en mécanique quantique [1].

On considère deux atomes (1) et (2) de même masse M, interagissant par le potentiel radial $V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$. L'hamiltonien du système est alors :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2M} + \frac{\hat{p}_2^2}{2M} + V(|\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|) \quad .$$

1. Il est, en fait, plus approprié de se placer dans le référentiel barycentrique. Ecrire l'expression de l'hamiltonien dans les coordonnées barycentriques. Commentaires

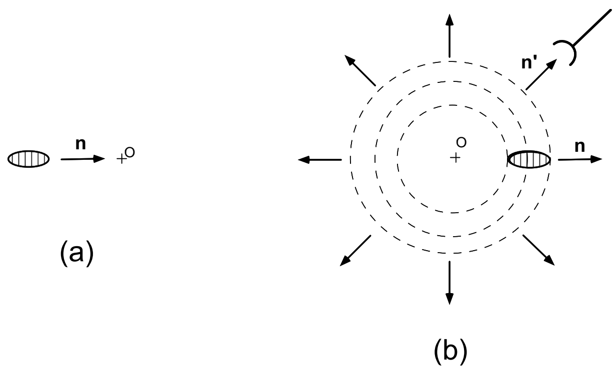

FIGURE 1 – *(a) le paquet d'ondes incident se dirige vers la zone d'action du potentiel. (b) diffusion d'un paquet d'ondes incident se propageant dans la direction* $\mathbf{n}$ *par le potentiel* $V(\hat{r})$.

Pour décrire quantiquement le processus de diffusion d'une particule incidente donnée par le potentiel $V(r)$, il faut *a priori* étudier le comportement au cours du temps du paquet d'ondes qui représente l'état de la particule. Les caractéristiques de ce paquet d'ondes sont supposées connues pour les temps t grands et négatifs où la particule n'a pas encore été affectée par le potentiel. On sait que l'évolution ultérieure du paquet d'ondes s'obtient immédiatement si on l'exprime comme une superposition d'états stationnaires. C'est la raison pour laquelle nous étudions l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien du mouvement relatif, et nous

1. Voir par exemple C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë. Mécanique quantique, ou C. Cohen-Tannoudji et D. Guéry-Odelin, Avancées en physique atomique.

raisonnons directement sur ces états stationnaires et non sur le paquet d'ondes. Les états propres $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ de l'hamiltonien du mouvement relatif pour des énergies positives $E_k = \hbar^2 k^2/M$ vérifient :

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{M} + V(\hat{r})\right)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_k \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{1}$$

Cette convention suppose que $V(\hat{r})$ tende vers zéro lorsque $|\mathbf{r}|$ tend vers l'infini. On cherche asymptotiquement (pour $r \gg b$ où b est la « portée »[2] du potentiel) pour les états propres de diffusion une forme du type :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \underset{r\to\infty}{\sim} e^{ikz} + f(k, \mathbf{n}, \mathbf{n}') \, \frac{e^{ikr}}{r} \tag{2}$$

où $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$, et $\mathbf{n}' = \mathbf{r}/r$. La symétrie sphérique permet de réduire le nombre de variables intervenant dans l'amplitude de diffusion. En effet, au lieu de dépendre de $\mathbf{n}$ et $\mathbf{n}'$, elle ne dépend que de l'angle θ entre ces deux vecteurs ($\cos\theta = \mathbf{n}.\mathbf{n}'$). On note désormais $f(k,\theta) \equiv f(k, \mathbf{n}, \mathbf{n}')$.

2. Donner l'interprétation physique d'un tel état de collision.
3. Montrer en utilisant la résolution par « l'inversion de Green » que

$$f(k,\theta) = -\frac{M}{4\pi\hbar^2}\int e^{-i\mathbf{k}'.\mathbf{r}'} V(r')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \tag{3}$$

   où $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}'$. Commenter.
4. Pour déduire l'expression de la section efficace différentielle de collision et de la section efficace, calculer les contributions de l'onde incidente et de l'onde diffusée au courant de probabilité dans un état stationnaire de diffusion. On rappelle l'expression du courant $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ associé à la fonction d'onde $\varphi(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{2\hbar}{M}\mathrm{Im}(\varphi^*(\mathbf{r})\boldsymbol{\nabla}\varphi(\mathbf{r})).$$

5. **Approximation de Born** : En approchant $\psi_{\mathbf{k}}$ dans l'intégrale (3) par sa valeur non perturbée en l'absence de potentiel, donnez l'expression perturbative de f, ainsi que sa limite $f(k,\theta) \to -a$ pour $k \to 0$.

2 Développement en ondes partielles

Pour la détermination exacte de l'amplitude de diffusion, il est nécessaire de connaître la solution de l'équation de Schrödinger. Pour tirer partie de la symétrie du problème, il est commode de développer l'onde incidente et l'onde diffusée sur la base des vecteurs propres communs à $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$, où $\hat{\mathbf{L}}$ est l'opérateur moment cinétique relatif :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^m(\theta,\phi)\frac{u_{k,\ell,m}(r)}{r} \tag{4}$$

où ϕ est l'angle azimutal autour de l'axe z. Les $Y_\ell^m(\theta,\phi) = \langle\theta,\phi|\ell,m\rangle$ sont les harmoniques sphériques, états propres de $\mathbf{L}^2$ et L_z avec les valeurs propres respectives $\ell(\ell+1)\hbar^2$ et $m\hbar$.

2. Pour les potentiels nuls à partir d'une certaine valeur la définition de la portée est claire. En revanche, pour les autres potentiels, par exemple pour ceux qui décroissent comme r^{-n} ($n > 0$) à l'infini, la notion de portée du potentiel mérite d'être éclaircie.

1. Quelle est l'équation vérifiée par $u_{k,\ell,m}(r)$?
   Rappel : expression de l'opérateur Laplacien en coordonnées sphériques,
$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2}.$$
2. En utilisant l'invariance par rotation du potentiel $V(r)$, montrer qu'on a nécessairement $m = 0$. L'harmonique sphérique Y_ℓ^0 est donnée par $\sqrt{(2\ell+1)/4\pi P_\ell(\cos\theta)}$ où P_ℓ est un polynôme de Legendre, de sorte qu'on écrira désormais
$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\frac{u_{k,\ell}(r)}{kr} \tag{5}$$
   en renormalisant les $u_{k,\ell}$.

On cherche la forme aymptotique de $\psi_{\mathbf{k}}$ à la limite $r \gg b$, $kr \gg 1$, de sorte qu'on s'intéresse **à la solution $v_{k,\ell}$ de l'équation précédente avec** $V(r) = 0$. On introduit (sans les expliciter) les fonctions de Bessel sphériques [3] j_ℓ et n_ℓ, où $xj_\ell(x)$ et $xn_\ell(x)$ sont solutions indépendantes de l'équation différentielle
$$y'' + \left(1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\right)y = 0. \tag{6}$$

3. Montrer que la solution pour $V(r) = 0$ peut se mettre sous la forme
$$v_{k,\ell}(r) = \mathcal{N}(k,\ell)kr\left[j_\ell(kr)\cos\delta_\ell(k) + n_\ell(kr)\sin\delta_\ell(k)\right]. \tag{7}$$
4. On donne le développement en $x \to 0$ et $x \to \infty$ des fonctions de Bessel sphériques :
$$xj_\ell(x) \underset{x\to\infty}{\sim} \sin\left(x - \ell\frac{\pi}{2}\right) \qquad xn_\ell(x) \underset{x\to\infty}{\sim} \cos\left(x - \ell\frac{\pi}{2}\right) \tag{8}$$
$$xj_\ell(x) \underset{x\to 0}{\sim} \frac{x^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!} \qquad xn_\ell(x) \underset{x\to 0}{\sim} \frac{(2\ell+1)!!}{(2\ell+1)x^\ell} \tag{9}$$
   où $n!! = n(n-2)(n-4)(n-6)\ldots$. Donner le développement en $r \to \infty$ de $v_{k,\ell}(r)$ (7). Montrer que le paramètre $\delta_\ell(k)$ joue le rôle d'un déphasage.

Conditions aux limites en $+\infty$. La solution $u_{k,\ell}(r)$ pour $V \neq 0$ se raccorde à $v_{k,\ell}(r)$ pour r grand, où $\delta_\ell(k)$ est fixé par le comportement de $\psi_{\mathbf{k}}$ avec $r \lesssim b$. On donne le développement d'une onde plane sur les harmoniques sphériques :
$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{+\infty}(2\ell+1)i^\ell j_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta).$$

5. En identifiant $f(k,\theta)\,e^{ikr}/r$ à $\left[\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - e^{ikz}\right]$ avec $kr \to \infty$, déterminer $\mathcal{N}(k,\ell)$ et montrer que f peut se mettre sous la forme
$$f(k,\theta) = \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{+\infty}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\,e^{i\delta_\ell(k)}\sin\delta_\ell(k) = \sum_{\ell=0}^{+\infty}\frac{(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)}{k\mathrm{cotg}[\delta_\ell(k)] - ik}. \tag{10}$$

3. Définies avec la convention de signe du cours de Jook Walraven, Vienne, 2013.

6. Justifier l'expression de la section efficace totale pour deux particules identiques

$$\sigma_{b,f}(k) = 2\pi \int_0^{\pi/2} |f(k,\theta) \pm f(k,\pi-\theta)|^2 \sin\theta \, d\theta$$

où le signe $+$ correspond aux bosons et le signe $-$ aux fermions.

7. En utilisant l'orthogonalité des polynômes de Legendre $\int_0^{\pi/2} P_\ell(\cos\theta) P_{\ell'}(\cos\theta) \sin\theta \, d\theta = \delta_{\ell,\ell'}/(2\ell+1)$, montrer qu'on peut mettre la section efficace totale sous la forme

$$\sigma_{b,f}(k) = 2 \sum_{\ell \text{ (im)pair}} \sigma_\ell(k) \qquad \text{où} \qquad \sigma_\ell(k) = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell(k). \tag{11}$$

3 Longueur de diffusion dans l'onde s ; potentiel carré

1. En supposant que $V(r)$ décroît « assez vite » à l'infini, montrer que seuls les états de moment cinétique ℓ suffisamment faible contribuent à la collision.
2. En dessous de quel seuil en énergie la collision se fait-elle essentiellement dans l'onde s ? Pour la suite, on donne j_0 et n_0 : $xj_0(x) = \sin x$, $xn_0(x) = \cos x$.
3. Montrer que dans la limite des ondes s, $f(k) = 1/(k\text{cotg}[\delta_0(k)] - ik)$ de sorte que l'amplitude de diffusion ne dépend plus que de l'énergie incidente.

En général, $\delta_0(k) \sim k$ pour $k \to 0$. On définit *la longueur de diffusion*[4] a par : $a = -\lim_{k\to 0} \delta_0(k)/k$. On a aussi $a = -\lim_{k\to 0} f(k)$. Lorsqu'au contraire $\delta_0(k)$ ne s'annule pas pour $k \to 0$, on a une *résonance de diffusion* et f diverge à énergie nulle ($f \propto k^{-1}$).

4. Montrer que dans le cas où a est bien définie, on a $u_{k,0} = k(r-a)$ à la limite $b \ll r \ll k^{-1}$.

On considère, dans la suite, un potentiel carré avec un mur infini en $r = 0$ et tel que $V(r) = V_0$ si $r < b$ et $V(r)$ nul sinon. On pose $k_0 = \sqrt{M\,|V_0|}/\hbar$ (et donc $V_0 = \pm\hbar^2 k_0^2/M$).

5. On suppose $V_0 > 0$. Montrer que

$$a = b - \frac{\text{th}(k_0 b)}{k_0}$$

Quel est le signe de a ? On considère la limite d'un potentiel en fonction delta, en faisant tendre V_0 vers l'infini et b vers 0, l'intégrale $\int d^3r V(r)$ restant constante. Que devient la longueur de diffusion ? Conclure.

6. On suppose $V_0 < 0$. Montrer que

$$a = b - \frac{\text{tg}(k_0 b)}{k_0}$$

Quel est le signe de a ? Tracer a en fonction de k_0 et relier les divergences de a à l'apparition de nouveaux états liés dans le potentiel $V(r)$ (théorème de Levinson). Que vaut alors σ ?

4. Plus précisément, le développement à basse énergie peut s'écrire

$$k\,\text{cotg}[\delta_0(k)] \simeq -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_e k^2 \qquad \text{ou} \qquad f(k) \simeq \frac{-1}{\frac{1}{a} - \frac{1}{2} r_e k^2 + ik}$$

où, par définition, a est la longueur de diffusion et r_e la portée effective du potentiel. Voir par exemple le cours au Collège de France de Claude Cohen-Tannoudji, année 1998.