

## TD 3. Corrigé

### La longueur de diffusion

La longueur de diffusion est l'unique paramètre pour décrire correctement les collisions entre atomes à très basse énergie, lorsque l'impulsion relative entre atomes  $\hbar k$  tend vers zéro et que les collisions ont lieu en « onde  $s$  » (symétrie sphérique).

#### 1 Introduction à la théorie de la diffusion

##### 1.1 Collision élastique entre deux atomes

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

On introduit les coordonnées barycentriques :

$$\begin{array}{ll} \text{centre de masse :} & \text{mouvement relatif :} \\ \left\{ \begin{array}{l} \hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2 \\ \hat{\mathbf{R}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{r}}_1 + \hat{\mathbf{r}}_2) \end{array} \right. & \left\{ \begin{array}{l} \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{p}}_1 - \hat{\mathbf{p}}_2) \\ \hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2 \end{array} \right. \end{array}$$

$\hat{\mathbf{p}}_1$  commutant avec  $\hat{\mathbf{p}}_2$ , on peut écrire :

$$H = \frac{1}{4M} ((\hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2)^2 + (\hat{\mathbf{p}}_1 - \hat{\mathbf{p}}_2)^2) + V(\hat{\mathbf{r}}),$$

$$H = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{4M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{M} + V(\hat{\mathbf{r}}) = H_{\text{cm}} + H_{\text{rel}}.$$

On reconnaît un terme décrivant le mouvement uniforme du centre de masse (masse  $2M$ ) et un hamiltonien gouvernant le mouvement relatif,  $H_{\text{rel}} = \hat{\mathbf{p}}^2/M + V(\hat{\mathbf{r}})$ . Ce hamiltonien est celui d'une particule fictive de masse  $\mu = M/2$  évoluant dans le potentiel  $V(\hat{\mathbf{r}})$ . On s'est donc ramené pour décrire la collision à un problème à une particule, diffusée par le potentiel d'interaction  $V$ .

##### 1.2 Amplitude de diffusion

Au lieu de décrire la diffusion d'un paquet d'onde, on décompose celui-ci sur les états stationnaires du hamiltonien (des ondes planes pour l'état incident en l'absence de collision). On cherche les états propres de  $H_{\text{rel}}$  sous la forme asymptotique, pour  $r$  grand :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(k, \mathbf{n}, \mathbf{n}') \frac{e^{ikr}}{r}$$

où la direction incidente est donnée par  $\mathbf{k} = k\mathbf{n}$  et la direction après diffusion est définie par  $\mathbf{r} = r\mathbf{n}'$ .  $V(r)$  étant isotrope, le seul axe privilégié dans le problème est celui de la direction incidente  $\mathbf{n}$  et il y a une invariance par rotation autour de cet axe.  $f$  ne dépend donc en réalité que de  $k$  et de l'angle  $\theta = (\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ .

1. L'expression de l'état de collision  $\psi_{\mathbf{k}}$  s'interprète comme la somme de l'onde plane incidente  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  et d'une onde sphérique diffusée avec l'amplitude  $f$ . Il s'agit à présent de relier  $f$  au potentiel d'interaction  $V$ .

2.  $\psi_{\mathbf{k}}$  est état propre de  $H_{\text{rel}}$ . En représentation  $\hat{\mathbf{r}}$ , on peut écrire :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{M}\Delta_{\mathbf{r}} + V(r) \right] \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_k \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{M} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

$$(\Delta_{\mathbf{r}} + k^2) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{M}{\hbar^2} V(r) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1)$$

La solution de l'équation  $(\Delta_{\mathbf{r}} + k^2)G(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$  est la fonction de Green  $G_{\pm}(\mathbf{r}) = G_{\pm}(r) = -e^{\pm ikr}/4\pi r$ . On va utiliser la solution  $G = G_+$ , qui correspond bien à la propagation depuis le centre. On remarque que l'on peut écrire le membre de droite de (1) sous la forme :

$$\frac{M}{\hbar^2} V(r) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{M}{\hbar^2} \int d\mathbf{r}' V(r') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

On a d'autre part :

$$\delta(\mathbf{r}) = (\Delta_{\mathbf{r}} + k^2)G(\mathbf{r}), \quad \text{et donc} \quad \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (\Delta_{\mathbf{r}} + k^2)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

l'opérateur  $\Delta_{\mathbf{r}}$  agissant sur  $\mathbf{r}$  uniquement. Par suite, la relation (1) peut s'écrire :

$$(\Delta_{\mathbf{r}} + k^2) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{M}{\hbar^2} \int d\mathbf{r}' V(r') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') (\Delta_{\mathbf{r}} + k^2) G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (\Delta_{\mathbf{r}} + k^2) \frac{M}{\hbar^2} \int d\mathbf{r}' V(r') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') G(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

On en déduit la valeur de  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , à une fonction près solution de  $(\Delta_{\mathbf{r}} + k^2) \varphi_0(\mathbf{r}) = 0$ , c'est-à-dire une onde plane de la forme  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ .

Revenons à  $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , qui ne dépend en réalité que du module  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ .  $V(r)$  a une portée finie  $b$ , et on peut négliger la contribution à l'intégrale des vecteurs de norme supérieure à  $b$ , donc  $r' < b$ . Comme on s'intéresse à la solution asymptotique  $r \rightarrow \infty$ , on est dans la limite  $r'/r \ll 1$ . Nous pouvons faire un développement limité de  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  :

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}' + r'^2} \simeq r - \frac{\mathbf{r}}{r}\cdot\mathbf{r}' = r - \mathbf{n}\cdot\mathbf{r}'.$$

On a donc :

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \simeq \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'},$$

où  $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}'$ . Le dénominateur modifie peu le résultat et on se contente de l'ordre zéro, alors que le terme de phase doit être pris en compte. On sort ensuite  $e^{ikr}/r$  de l'intégrale sur  $\mathbf{r}'$  et on obtient le résultat annoncé :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{M}{4\pi\hbar^2} \left[ \int d\mathbf{r}' V(r') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} \right] \frac{e^{ikr}}{r}.$$

C'est une équation implicite,  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  intervenant dans les deux membres de l'équation. On a donc en identifiant :

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

3. La section efficace différentielle  $d\sigma/d\Omega$  est reliée à la fraction diffusée par angle solide selon :

$$\frac{dN}{d\Omega} = \Phi_{\text{in}} \frac{d\sigma}{d\Omega}.$$

$dN$  est le nombre de particules diffusées dans l'angle solide  $d\Omega$  dans la direction  $(\theta, \phi)$  et  $\Phi_{\text{in}}$  est le flux incident. L'expression du flux diffusé dans cette direction est donc  $\Phi_{\text{out}} = dN/dS = 1/r^2 dN/d\Omega$ . D'où la relation  $d\sigma/d\Omega = r^2 \Phi_{\text{out}}/\Phi_{\text{in}}$ . Les flux incidents et diffusés sont proportionnels aux courants de probabilité  $J_{\text{in}}$  et  $J_{\text{out}}$  respectivement, donc on a la relation :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r^2 \frac{J_{\text{out}}}{J_{\text{in}}}.$$

Il reste à évaluer ces courants avec  $\varphi_{\text{in}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  et  $\varphi_{\text{out}} = f(k, \theta)e^{ikr}/r$ .

$$\mathbf{J}_{\text{in}} = \frac{2\hbar}{M} \text{Im}(\varphi_{\text{in}}^*(\mathbf{r})\nabla\varphi_{\text{in}}(\mathbf{r})) = \frac{2\hbar\mathbf{k}}{M},$$

on reconnaît la vitesse incidente de la particule fictive de masse  $M/2$ . Le calcul de  $\mathbf{J}_{\text{out}}$  est un peu plus long. On se place en coordonnées sphériques d'axe  $\mathbf{n}$  en se rappelant que l'angle  $\phi$  n'intervient pas et que  $\mathbf{e}_r$  n'est autre que  $\mathbf{n}'$  :

$$\begin{aligned} \nabla\varphi_{\text{out}}(\mathbf{r}) &= \frac{\partial\varphi_{\text{out}}}{\partial r} \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial\varphi_{\text{out}}}{\partial\theta} \mathbf{e}_\theta = \left[ ikf(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} - f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r^2} \right] \mathbf{e}_r + \frac{\partial f}{\partial\theta} \frac{e^{ikr}}{r^2} \mathbf{e}_\theta \\ \varphi_{\text{out}}^*(\mathbf{r})\nabla\varphi_{\text{out}}(\mathbf{r}) &= \left[ ik \frac{|f|^2}{r^2} - \frac{|f|^2}{r^3} \right] \mathbf{n}' + f^* \frac{\partial f}{\partial\theta} \frac{1}{r^3} \mathbf{e}_\theta. \end{aligned}$$

Soit pour le courant :

$$\mathbf{J}_{\text{out}} = \frac{|f|^2}{r^2} \frac{2\hbar\mathbf{k}'}{M} + \frac{2\hbar}{Mr^3} \text{Im} \left( f^* \frac{\partial f}{\partial\theta} \right) \mathbf{e}_\theta.$$

Seule la partie en  $1/r^2$  contribue au flux à l'infini donc on peut négliger le second terme et on a, en norme,  $J_{\text{out}} = J_{\text{in}}|f|^2/r^2$ , ce qui donne une section efficace de diffusion différentielle :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r^2 \frac{J_{\text{out}}}{J_{\text{in}}} = |f(k, \theta)|^2.$$

Dans la limite où  $f$  tend vers une constante  $-a$ , la section efficace de diffusion totale vaut  $\sigma = 4\pi a^2$ . Il faut corriger cette valeur d'un facteur deux pour des bosons dégénérés ( $\sigma = 8\pi a^2$ ).

4. **Approximation de Born.** L'approximation de Born est une approche perturbative qui revient à remplacer dans l'intégrale de la définition de  $f$   $\psi_{\mathbf{k}}$  par sa valeur à l'ordre zéro  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}$ , ce qui relie  $f$  à la transformée de Fourier de  $V$  en  $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = k(\mathbf{n}' - \mathbf{n})$  :

$$\begin{aligned} f(k, \theta) &= -\frac{M}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' V(r') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} \propto \tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ f(k, \theta) &\simeq -\frac{M}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' V(r') \quad \text{pour } kb \rightarrow 0, \end{aligned}$$

soit

$$a \simeq \frac{M}{4\pi\hbar^2} \int d^3r V(r).$$

C'est bien à cette expression que l'on arrive pour un potentiel carré à la limite des faibles potentiels  $k_0 b \rightarrow 0$ , voir la question 6 de la partie 3.

## 2 Développement en ondes partielles

Le potentiel diffusant étant isotrope, il est commode de développer la fonction d'onde recherchée sur les harmoniques sphériques  $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ , états propres de  $\mathbf{L}^2$  et de  $L_z$  de valeurs propres  $\ell(\ell+1)\hbar^2$  et  $m\hbar$  respectivement. On part de l'équation (1) et on introduit le développement

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^m(\theta, \phi) \frac{u_{k\ell m}(r)}{r}. \quad (2)$$

1. On obtient :

$$\Delta_{\mathbf{r}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left( \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^m(\theta, \phi) \frac{1}{r} \left[ u_{k\ell m}''(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u_{k\ell m}(r) \right].$$

Comme les  $Y_\ell^m$  sont linéairement indépendantes, on peut écrire pour tout  $\ell$  et tout  $m$  tel que  $|m| \leq \ell$  :

$$u_{k\ell m}''(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u_{k\ell m}(r) + k^2 u_{k\ell m}(r) = \frac{M}{\hbar^2} V(r) u_{k\ell m}(r)$$

ou encore :

$$-u_{k\ell m}''(r) + \left[ \frac{M}{\hbar^2} V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u_{k\ell m}(r) = k^2 u_{k\ell m}(r). \quad (3)$$

$u_{k\ell m}(r)$  est donc la solution d'énergie  $E_k = \hbar^2 k^2 / M$  d'une équation de Schrödinger à une dimension, avec un potentiel  $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \hbar^2 \ell(\ell+1) / (Mr^2)$  modifié par un terme centrifuge en  $1/r^2$ , lié au moment cinétique orbital. Ce terme n'est nul que pour  $\ell = 0$  (onde  $s$ ).

2. Le problème étant invariant par rotation,  $\psi_{\mathbf{k}}$  ne dépend pas de  $\phi$ . Or,  $Y_\ell^m(\theta, \phi) = P_{\ell,m}(\cos \theta) e^{im\phi}$  où  $P_{\ell,m}$  est un polynôme. On doit donc avoir  $u_{k,\ell,m} = 0$  pour  $m \neq 0$ , afin que la somme (2) ne dépende pas de  $\phi$ . On écrit maintenant

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) P_\ell(\cos \theta) \frac{u_{k,\ell}(r)}{kr}. \quad (4)$$

3. On cherche la solution asymptotique  $v_{k,\ell}$  à laquelle  $u_{k,\ell}$  se raccorde à l'infini, là où  $V(r) \rightarrow 0$ . On part de (3) avec  $V = 0$  :

$$\frac{1}{k^2} v_{k,\ell}''(r) + \left[ 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{k^2 r^2} \right] v_{k,\ell}(r) = 0.$$

On introduit la fonction  $\lambda_\ell(x)$  telle que  $v_{k,\ell}(r) = \lambda_\ell(kr)$ . Elle obéit à l'équation

$$\lambda_\ell''(x) + \left[ 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] \lambda_\ell(x) = 0.$$

Les solutions indépendantes pour  $\lambda_\ell$  sont donc  $x j_\ell(x)$  et  $x n_\ell(x)$ . La solution générale est une combinaison de ces solutions, que l'on peut toujours écrire sous la forme

$$\lambda_\ell(x) = \mathcal{N}(k, \ell) x [j_\ell(x) \cos \delta_\ell(k) + n_\ell(x) \sin \delta_\ell(k)], \quad (5)$$

soit pour  $v_{k,\ell}$  :

$$v_{k,\ell}(r) = \mathcal{N}(k, \ell) kr [j_\ell(kr) \cos \delta_\ell(k) + n_\ell(kr) \sin \delta_\ell(k)]. \quad (6)$$

4. En utilisant le développement à l'infini de  $j_\ell$  et  $n_\ell$ , on obtient pour  $v_{k,\ell}$  et donc  $u_{k,\ell}$  :

$$\begin{aligned} u_{k,\ell}(r) &\underset{kr \rightarrow \infty}{\sim} v_{k,\ell}(r) \underset{kr \rightarrow \infty}{\sim} \mathcal{N}(k, \ell) \left[ \sin \left( kr - \ell \frac{\pi}{2} \right) \cos \delta_\ell(k) + \cos \left( kr - \ell \frac{\pi}{2} \right) \sin \delta_\ell(k) \right] \\ u_{k,\ell}(r) &\underset{kr \rightarrow \infty}{\sim} \mathcal{N}(k, \ell) \sin \left( kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_\ell(k) \right). \end{aligned}$$

$\delta_\ell$  indique donc la phase de l'oscillation à laquelle se raccorde  $u_{k,\ell}$  à grande distance.

5. On repartant de la définition de  $f$ , on peut écrire pour  $kr \rightarrow \infty$

$$f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \sim \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) \left[ \frac{u_{k,\ell}(r)}{kr} - i^\ell j_\ell(kr) \right].$$

En utilisant les développements à l'infini, il vient

$$f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) \left[ \mathcal{N}(k, \ell) \sin \left( kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_\ell(k) \right) - i^\ell \sin \left( kr - \ell \frac{\pi}{2} \right) \right].$$

Le crochet peut s'écrire

$$\frac{1}{2i} \left[ \mathcal{N}(k, \ell) e^{ikr} (-i)^\ell e^{i\delta_\ell(k)} - \mathcal{N}(k, \ell) e^{-ikr} i^\ell e^{-i\delta_\ell(k)} - i^\ell e^{ikr} (-i)^\ell + i^\ell e^{-ikr} i^\ell \right].$$

Les termes en  $e^{-ikr}$  doivent s'éliminer pour que le résultat soit en  $f e^{ikr}/r$ , ce qui détermine le coefficient  $\mathcal{N}(k, \ell) = i^\ell e^{i\delta_\ell(k)}$ . Il vient au total :

$$f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) \left[ e^{i2\delta_\ell(k)} - 1 \right],$$

soit pour  $f$

$$f(k, \theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) \frac{e^{i2\delta_\ell(k)} - 1}{2i} = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) e^{i\delta_\ell(k)} \sin \delta_\ell(k). \quad (7)$$

On peut aussi écrire

$$\frac{1}{k} e^{i\delta_\ell(k)} \sin \delta_\ell(k) = \frac{\sin \delta_\ell(k)}{k e^{-i\delta_\ell(k)}} = \frac{\sin \delta_\ell(k)}{k \cos \delta_\ell(k) - ik \sin \delta_\ell(k)} = \frac{1}{k \cotg[\delta_\ell(k)] - ik}. \quad (8)$$

6. Lorsque les particules sont identiques, les processus avec  $\theta$  et  $\pi - \theta$  conduisent du même état initial au même état final, comme le montre la figure 1. Ils interfèrent donc et il faut symétriser (pour des bosons) ou antisymétriser (pour des fermions) la somme  $|f(k, \theta) \pm f(k, \pi - \theta)|^2$  pour aboutir à la section efficace.

$$\sigma_{b,f}(k) = 2\pi \int_0^{\pi/2} |f(k, \theta) \pm f(k, \pi - \theta)|^2 \sin \theta d\theta. \quad (9)$$

7. Calculons l'intégrale (9) en partant de l'expression (7) de l'amplitude de diffusion. Le polynôme  $P_\ell$  a la parité de  $\ell$ , de sorte que  $P_\ell[\cos(\pi - \theta)] = P_\ell(-\cos \theta) = (-1)^\ell P(\cos \theta)$ . Le terme  $\ell$  de la somme  $f(k, \theta) \pm f(k, \pi - \theta)$  est donc proportionnel à  $1 \pm (-1)^\ell$ . Cela signifie que pour des bosons

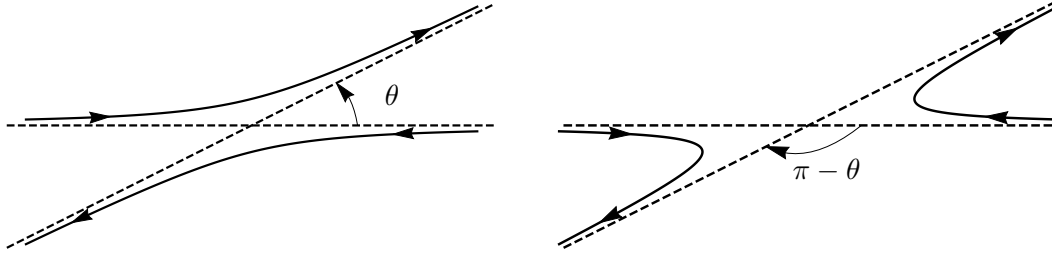


FIGURE 1 – Deux processus aboutissant au même état final pour des particules identiques.

(respectivement pour des fermions), la somme se fait sur les  $\ell$  pairs (respectivement impairs), et le résultat est doublé. Autrement dit :

$$f(k, \theta) \pm f(k, \pi - \theta) = \frac{2}{k} \sum_{\ell \text{ (im)pair}} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) e^{i\delta_{\ell}(k)} \sin \delta_{\ell}(k).$$

On a donc

$$\begin{aligned} \sigma_{b,f}(k) &= \frac{8\pi}{k^2} \sum_{\ell, \ell' \text{ (im)pairs}} (2\ell + 1)(2\ell' + 1) e^{i[\delta_{\ell} - \delta_{\ell'}]} \sin \delta_{\ell}(k) \sin \delta_{\ell'}(k) \int_0^{\pi/2} P_{\ell}(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta \\ &= \frac{8\pi}{k^2} \sum_{\ell, \ell' \text{ (im)pairs}} (2\ell + 1)(2\ell' + 1) e^{i\delta_{\ell}(k)} e^{-i\delta_{\ell'}(k)} \sin \delta_{\ell}(k) \sin \delta_{\ell'}(k) \frac{\delta_{\ell, \ell'}}{2\ell + 1} \\ &= \frac{8\pi}{k^2} \sum_{\ell \text{ (im)pair}} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\ell}(k). \end{aligned} \quad (10)$$

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

1. Supposons à présent que le potentiel  $V(r)$  décroisse suffisamment rapidement à grande distance — plus rapidement que  $1/r^2$ . C'est le cas des interactions de type van der Waals, qui sont en  $-1/r^6$ , avec un « cœur dur » à courte distance. Pour  $\ell$  non nul, le nouveau potentiel  $V_{\text{eff}}(r)$  est dominé à grande distance par le terme positif en  $1/r^2$ , alors qu'aux distances intermédiaires c'est la partie attractive de  $V$  qui domine. Par conséquent, le potentiel possède à présent un maximum local positif, autour de  $b$ , d'énergie de l'ordre de  $E_b = \hbar^2 \ell(\ell + 1)/(Mb^2)$  (voir figure 2). A basse énergie, c'est-à-dire pour  $E_k < E_b$  ou  $k < \ell/b$  ou  $p < \hbar \ell/b$ , l'énergie est insuffisante pour passer cette barrière de potentiel et donc ressentir l'effet du potentiel  $V$ .  $r$  reste toujours supérieur à  $b$  et il n'y a pas de déphasage lors de l'évolution ( $\delta_{\ell}(k) = 0$  pour  $k < \ell/b$ ). Tout se passe comme si  $V$  était nul. Seul  $\delta_0(k)$  est non nul et dépend de  $V$  car le terme centrifuge est alors nul.
2. Moralité : à basse énergie, seules les collisions dans l'onde  $s$  contribuent à la section efficace, ou au déphasage collisionnel. La portée typique d'un potentiel inter-atomique est de l'ordre du dixième de nanomètre :  $b \simeq 0,1$  nm, donc la limite des basses énergies correspond à une température  $T < 1$  K (en prenant la masse du rubidium). Cela signifie que la plupart des situations étudiées en physique des atomes froids correspondent bien à cette limite.
3. Dans cette limite, on ne garde que le terme  $\ell = 0$  dans la somme. Comme par ailleurs,  $P_0(\cos \theta) = 1$  pour tout  $\theta$ , on a en utilisant la variante (8) de (7) :

$$f(k, \theta) = f(k) = \frac{1}{k \cotg[\delta_0(k)] - ik}. \quad (11)$$

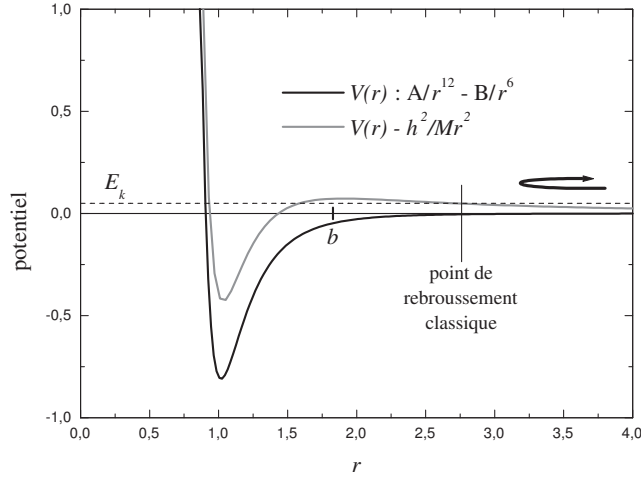


FIGURE 2 – Potentiel d’interaction  $V(r)$  et potentiel  $V_{\text{eff}}(r)$  modifié par le terme centrifuge. Ce terme crée une barrière de potentiel vers  $r = b$ , dont la hauteur est de l’ordre de  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)/(Mb^2)$ .

$f$  ne dépend plus que de l’énergie (ou de  $k$ ). Lorsque  $k \rightarrow 0$ , cette expression devient

$$f(k) \underset{k \rightarrow 0}{\simeq} -\frac{a}{1 + ika}.$$

Notamment, si  $a$  diverge,  $f$  reste finie et vaut  $f(k) \simeq i/k$ . La section efficace correspondante pour des bosons vaut

$$\sigma_b(k) = \frac{8\pi a^2}{1 + k^2 a^2}.$$

Elle tend vers  $8\pi a^2$  à basse énergie pour  $a$  fini, sinon elle vaut  $8\pi/k^2$  lorsque  $a$  diverge.

4. À la limite  $k \ll b^{-1}$  et  $kr \gg 1$ , on a  $\delta_0(k) \simeq -ka$  et on peut écrire

$$u_{k,0}(r) \simeq v_{k,0}(r) = e^{i\delta_0(k)} \sin[kr + \delta_0(k)] \simeq e^{-ika} \sin[k(r - a)] \simeq k(r - a).$$

On en déduit que la longueur de diffusion correspond **au premier zéro** du prolongement sinusoidal  $v_k$  de la fonction d’onde, à la limite  $k \rightarrow 0$ .

5. **Potentiel carré.** Ce cas d’école permet de calculer explicitement la longueur de diffusion. On vient de montrer qu’à la limite  $r \gg b$ , lorsque l’on a aussi<sup>1</sup>  $kr \ll 1$ , on a  $u_k(r) \propto r - a$ .

On considère un potentiel carré  $V_0 = \pm \hbar^2 k_0^2/M$  de portée  $b$ , avec un mur répulsif en  $r = 0$  de telle sorte que  $u_k(0) = 0$ . On cherche à calculer  $a$  en fonction de  $k_0$  et  $b$ .

**Cas  $V_0 > 0$ .** Il faut résoudre l’équation de Schrödinger domaine par domaine et écrire la continuité de  $u_k/u'_k$  en  $b$ , dans la limite  $k \ll k_0$  et  $k \ll 1/b$ .

$$\begin{cases} r < b & u''_k + k^2 u_k = k_0^2 u_k, \quad \text{soit } u''_0 = k_0^2 u_0. \\ r > b & u''_k + k^2 u_k = 0, \quad \text{soit } u''_0 = 0. \end{cases}$$

On obtient en utilisant les conditions aux limites en 0 et en  $+\infty$  :

$$\begin{cases} r < b & u_0(r) = A \operatorname{sh}(k_0 r), \\ r > b & u_0(r) = B(r - a). \end{cases}$$

1. Dans les domaines de température ou d’énergie considérés  $k \ll b^{-1}$ , on peut en fait avoir à la fois  $r \gg b$  et  $kr \ll 1$ .

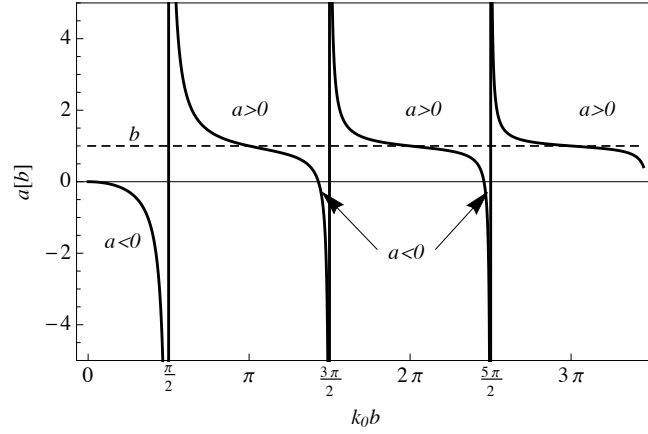


FIGURE 3 – Longueur de diffusion pour un puits carré, en unités de  $b$  et en fonction de  $k_0 b$ .

La continuité de  $u_0/u'_0$  en  $b$  s'écrit

$$\frac{1}{k_0} \text{th}(k_0 b) = b - a \quad \text{et donc} \quad a = b \left[ 1 - \frac{\text{th}(k_0 b)}{k_0 b} \right].$$

$\text{th}(k_0 b)$  est toujours inférieur à  $k_0 b$  et donc  $a > 0$ . Si le potentiel tend vers un Dirac, soit  $k_0 \rightarrow \infty$  et  $b \rightarrow 0$  avec  $k_0^2 b^3$  constant (intégration de  $V$  dans l'espace),  $k_0 b$  tend vers l'infini donc  $a \sim b$  et  $a$  tend vers zéro. Il n'y a donc pas de diffusion par un potentiel  $\delta$  positif.

N.B. A la limite des faibles potentiels  $k_0 b \rightarrow 0$ , la longueur de diffusion devient  $a \simeq k_0^2 b^3 / 3$ , soit

$$a \simeq \frac{M}{4\pi\hbar^2} \int d^3 r V(r).$$

6. **Cas  $V_0 < 0$ .** On résout de même :

$$\begin{cases} r < b & u_0'' = -k_0^2 u_0, \quad \text{soit } u_0 = A \sin(k_0 r). \\ r > b & u_0'' = 0, \quad \text{soit } u_0 = B(r - a). \end{cases}$$

La continuité de  $u_0/u'_0$  en  $b$  s'écrit

$$\frac{1}{k_0} \text{tg}(k_0 b) = b - a \quad \text{et donc} \quad a = b \left[ 1 - \frac{\text{tg}(k_0 b)}{k_0 b} \right].$$

Cette fois, le signe de  $a$  dépend de  $k_0 b$  et  $a$  peut même diverger lorsque  $k_0 b = \pi/2 + q\pi$  où  $q$  est entier (voir figure 3).  $a$  est négatif pour  $k_0 b < \pi/2$ , puis est positif pour la plupart des valeurs de  $k_0 b$ , sauf au voisinage des divergences juste en-dessous de  $\pi/2 + q\pi$ . L'allure des fonctions  $u_k$  et  $v_k$  est donnée sur la figure 4 pour trois valeurs de  $k_0 b$ , proches ou éloignées d'une divergence. Les divergences de  $a$  correspondent à l'apparition d'un nouvel état lié dans le potentiel carré. En effet, résolvons l'équation de Schrödinger pour  $V(r)$  avec une énergie négative  $-\hbar^2 k^2 / M$  (état lié,  $0 < k < k_0$ ) :

$$\begin{cases} r < b & -u'' - k_0^2 u = -k^2 u, \quad \text{soit } u = A \sin(\sqrt{k_0^2 - k^2} r) \\ r > b & -u'' = -k^2 u, \quad \text{soit } u = B e^{-kr} \end{cases}$$

La continuité de  $u/u'$  en  $b$  s'écrit

$$\frac{1}{\sqrt{k_0^2 - k^2}} \text{tg} \left[ \sqrt{k_0^2 - k^2} b \right] = -\frac{1}{k} \quad \text{et donc} \quad k \text{tg} \left[ \sqrt{k_0^2 - k^2} b \right] = -\sqrt{k_0^2 - k^2}$$



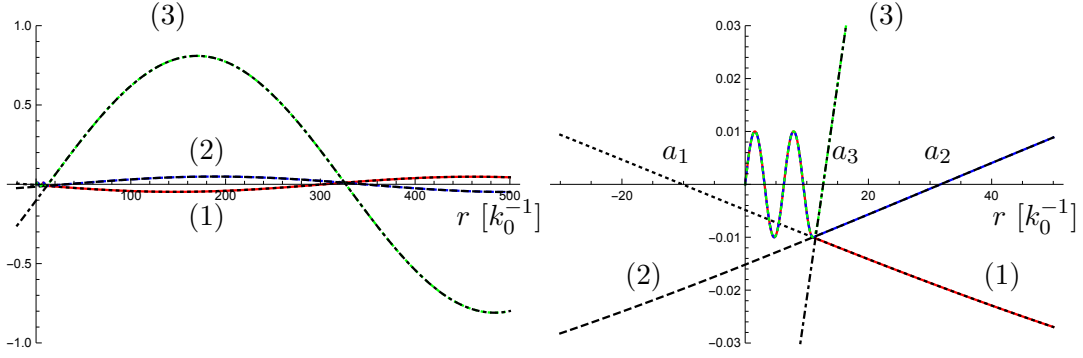


FIGURE 4 – Allure de la fonction d’onde  $u_k$  (en couleur) et de son prolongement  $v_k$  (pointillés noirs), pour  $k = k_0/100$  et pour un puits de largeur fixé par (1)  $k_0 b = 6.97\pi/2$  (en bleu), (2)  $k_0 b = 7.03\pi/2$  (en rouge) et (3)  $k_0 b = 7.6\pi/2$  (en vert). À gauche : vue d’ensemble à grande distance. À droite : zoom autour de  $r = 0$ . La longueur de diffusion correspond à l’intersection du prolongement  $v_k$  avec l’axe horizontal.  $a_1$  est très grande et négative dans le cas (1) où  $k_0 b$  est juste en dessous de  $7\pi/2$ , très grande et positive dans le cas (2) où  $k_0 b$  est juste au-dessus de  $7\pi/2$  (un nouvel état lié vient donc d’apparaître), et  $a_3$  est très proche de  $b$  dans le cas (3) où  $k_0 b$  est éloigné de  $\pi/2 + n\pi$ . Les fonctions d’onde sont normalisées pour avoir la même amplitude dans la zone  $r < b$ .

Imaginons que le puits a une profondeur donnée et que sa largeur varie à partir de  $b = 0$ . Lorsque  $b$  tend vers zéro, on devrait avoir  $kb\sqrt{k_0^2 - k^2} = -\sqrt{k_0^2 - k^2}$  ce qui est impossible,  $k$  et  $b$  étant positifs. Il n’y a donc initialement pas d’état lié. Des états liés apparaissent lorsqu’il existe une solution avec une énergie arbitrairement proche de zéro (on prend  $k \rightarrow 0$  dans l’équation ci-dessus), c’est-à-dire si  $\text{tg}(k_0 b) \rightarrow \infty$ . Il y a donc un état lié pour  $\pi/2 < k_0 b < 3\pi/2$ , deux états liés pour  $3\pi/2 < k_0 b < 5\pi/2$ , etc. Lorsqu’un état lié est près d’apparaître,  $a$  est très grande et négative; lorsqu’un état lié vient d’apparaître,  $a$  est très grande et positive. Dans cette limite,  $\sigma = 8\pi/k^2$ .

N.B. A la limite des faibles potentiels  $k_0 b \rightarrow 0$ , la longueur de diffusion devient  $a \simeq -k_0^2 b^3/3$ , soit comme précédemment

$$a \simeq \frac{M}{4\pi\hbar^2} \int d^3r V(r).$$

**Portée effective.** Regardons plus précisément ce qui se passe lorsque  $k_0 b = \pi/2 + n\pi$  et  $k$  tend vers 0 sans être strictement nul. On a alors  $\kappa = \sqrt{k_0^2 + k^2} \simeq k_0 + k'$  où  $k' = k^2/(2k_0)$ . Il faut résoudre l’équation de Schrödinger et écrire la condition de continuité :

$$\begin{cases} r < b & u_k'' + k^2 u_k = -k_0^2 u_k, \quad \text{soit } u_k(r) = A \sin[(k_0 + k')r] \\ r > b & u_k'' + k^2 u_k = 0, \quad \text{soit } u_k(r) = B \sin[kr + \delta_0(k)] \end{cases}$$

en utilisant les conditions aux limites en 0 et  $+\infty$ . La condition de continuité de  $u_k'/u_k$  en  $b$  s’écrit :

$$(k_0 + k') \text{tg}[kb + \delta_0(k)] = k \text{tg}(k_0 b + k'b) = -k \cotg(k'b) \simeq -\frac{2k_0}{kb}.$$

Le membre de droite diverge pour  $k \rightarrow 0$ . Il faut donc que le membre de gauche  $(k_0 + k') \text{tg}[kb + \delta_0(k)] \simeq k_0 \text{tg}[kb + \delta_0(k)]$  diverge également, ce qui implique que  $\delta_0(k) = \pi/2 + n'\pi + \varepsilon$  avec  $\varepsilon \ll 1$ . La condition de continuité devient :

$$-\frac{2k_0}{kb} \simeq -k_0 \cotg(kb + \varepsilon) \simeq -\frac{k_0}{kb + \varepsilon}, \quad \text{soit} \quad \varepsilon = -kb/2.$$

En reportant le déphasage  $\delta_0(k) = \pi/2 + n'\pi - kb/2$  dans l'expression (11) de l'amplitude de diffusion, il vient

$$f(k) \simeq \frac{1}{k \cotg[\pi/2 + n'\pi - kb/2] - ik} = \frac{1}{k \tg[kb/2] - ik} \simeq \frac{1}{bk^2/2 - ik} = \frac{-1}{0 - \frac{1}{2}bk^2 + ik}.$$

On trouve donc que la portée effective du puits carré vaut  $r_e = b!$