

## 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 barocentriques :

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

$\hat{\mathbf{p}}_1$  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 flu incident. L'e pression du flu 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 flu incidents et diffusés sont proportionnels au 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'a e  $\mathbf{n}$  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 flu 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 deu 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  $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = k(\mathbf{n}' - \mathbf{n})$  :

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

soit

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

C'est bien à cette e pression que l'on arrive pour un potentiel carré à la limite des faibles potentiels  $k_0b \rightarrow 0$ , 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 Schrodinger 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 pol nôme. On doit donc avoir  $u_{k, l, m} = 0$  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 s métriser (pour des bosons) ou antis métriser (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 pol nôme  $P_\ell$  a la parité de  $\ell$ , de sorte que  $P_\ell[\cos(\pi - \theta)] = P_\ell(-\cos \theta) = (-1)^\ell P_\ell(\cos \theta)$ . 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

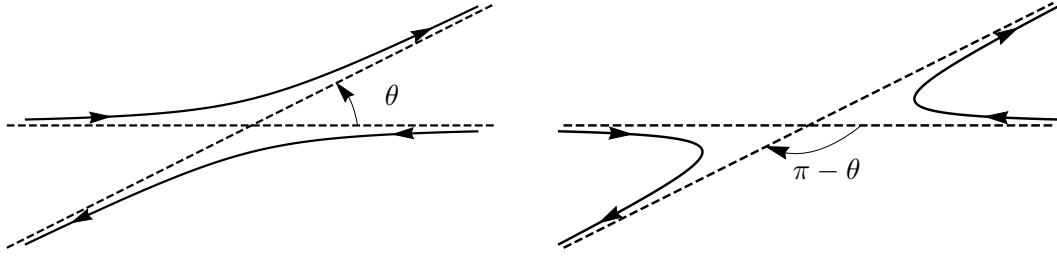


Figure 1 Deux processus aboutissant au même état final pour des particules identiques.

(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'à distances intermédiaires c'est la partie attractive de  $V$  qui domine. Par conséquent, le potentiel possède à présent un minimum 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) :

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

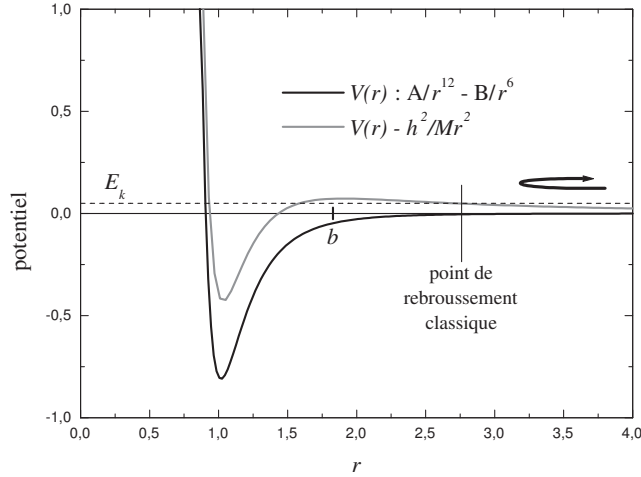


Figure 2 Potentiel d'interaction  $V(r)$  et potentiel  $V_{\text{eff}}(r)$  modifié par le terme centrifuge. Ce terme crée une barrière de potentiel vers  $r = b$ , dont la hauteur est de l'ordre de  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)/(Mb^2)$ .

$f$  ne dépend plus que de l'énergie (ou de  $k$ ). Lorsque  $k \rightarrow 0$ , cette pression 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 Schrodinger 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  $+\infty$  :

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

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  $kr \ll 1$ .

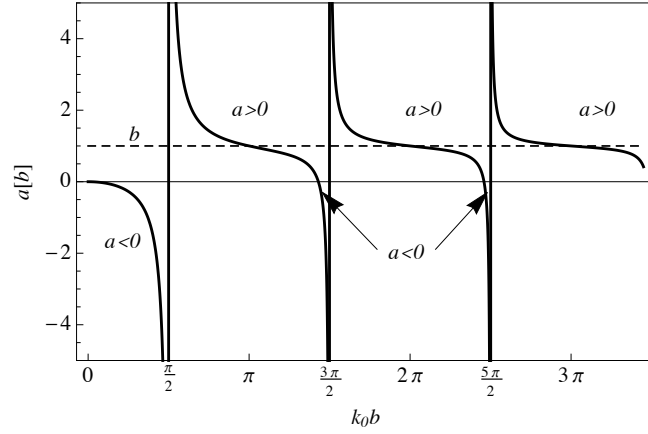


Figure 3 Longueur de diffusion pour un puits carré, en unités de  $b$  et en fonction de  $k_0 b$ .

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 éro. Il n' 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 Schrodinger 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

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



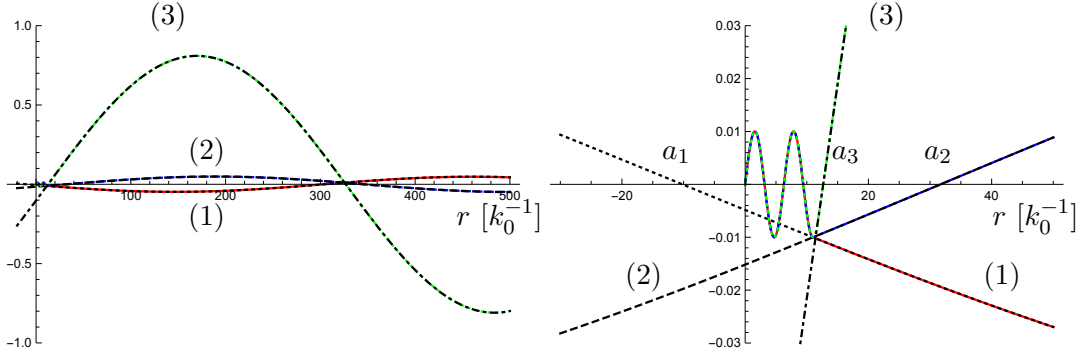


Figure 4 Allure de la fonction d'onde  $u_k$  (en couleur) et de son prolongement  $v_k$  (pointillés noirs), pour  $k = k_0/100$  et pour un puits de largeur fixe par (1)  $k_0 b = 6.97\pi/2$  (en bleu), (2)  $k_0 b = 7.03\pi/2$  (en rouge) et (3)  $k_0 b = 7.6\pi/2$  (en vert). À gauche : vue d'ensemble 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 Schrodinger 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  $r_e = b!$