

Physique quantique avancée I

G. Pasa

Notes prises au cours du prof. H. Kunz
durant le semestre d'hiver EPFL 1994

15 novembre 2018

Table des matières

1	Lien entre classique et quantique	1
1.1	Dérivation de l'équation de Schrödinger par Schrödinger	1
1.2	Équation de Hamilton-Jacobi	3
1.2.1	Interprétation géométrique	4
1.3	Optique géométrique et optique ondulatoire	5
1.4	Mécanique classique et mécanique quantique	7
1.5	Dynamique semi-classique	8
1.6	Méthode WKB	10
1.7	Application aux états liés	14
1.8	Généralisations	16
1.9	Exercices	21
2	Le théorème adiabatique	23
2.1	Introduction	23
2.2	Théorème adiabatique (Born,Fock)	24
2.3	La phase géométrique (ou phase de Berry)	26
2.4	Dégénérescence des niveaux en fonction de paramètres	28
3	Théorie des collisions	30
3.1	Potentiel central	30
3.2	Examen détaillé de la collision	31
3.3	Section efficace	33
3.4	Diffusion quantique	35
3.5	Équation intégrale pour la diffusion	37
3.6	Théorie de perturbation	39
3.7	Ondes classiques	41
3.8	Potentiel central (à symétrie sphérique)	43
3.9	Relation entre déphasage et potentiel	48
3.10	Dépendance du déphasage dans les paramètres du potentiel	49
3.11	Diffusion à basse énergie et longueur de diffusion	50
3.12	Les résonances	52
3.13	Résonances et états métastables	55
3.14	Potentiel coulombien	56
3.15	Diffusion de particules identiques, effets de la statistique	57
3.16	Matrice S	59
3.17	Exercices	60

A Solutions des exercices	61
A.1 Lien entre la mécanique classique et la mécanique quantique	61
A.2 Le théorème adiabatique	76
A.3 Théorie classique des collisions	76
B Résultats divers	80
B.1 Brachistochrone	80
B.2 Autre dérivation de l'équation de Hamilton-Jacobi	83
B.3 Encore une dérivation de l'équation de Hamilton-Jacobi	85
Index	86

Chapitre 1

Lien entre mécanique classique et mécanique quantique

1.1 Dérivation de l'équation de Schrödinger par Schrödinger

En mécanique classique, un système conservatif est décrit par son hamiltonien

$$H = T + V(q), \quad \text{où } T = \frac{p^2}{2m}$$

Selon le principe de Maupertuis, les trajectoires entre deux états q_0 et q_1 seront celles qui rendent extrémale l'intégrale

$$2 \int_{q_0}^{q_1} T dt$$

donc telles que

$$\delta \left(2 \int_{q_0}^{q_1} T dt \right) = 0.$$

Si ds est l'élément de longueur le long de l'orbite,

$$2T = m \left(\frac{ds}{dt} \right)^2 \quad \text{et} \quad T = E - V$$

d'où

$$2T = \frac{ds}{dt} \sqrt{2m(E - V)}.$$

Ainsi, on peut écrire

$$\delta \left(\int_{q_0}^{q_1} ds \sqrt{2m(E - V)} \right) = 0.$$

Cette forme géométrique dit que la trajectoire physique suit des géodésiques.

On remarque une analogie avec le principe de Fermat en optique géométrique (remarqué par Hamilton). On y décrit la lumière par des rayons lumineux. Le *principe de Fermat* énonce que dans un milieu où la vitesse de la lumière est $u(q)$, les trajectoires seront telles que le temps de parcours entre deux points q_0 et q_1 est extrémal

$$\delta \left(\int_{q_0}^{q_1} \frac{ds}{u(q)} \right) = 0.$$

avec $\frac{ds}{u(q)}$ l'élément de temps. Le rapport $\frac{c}{u(q)}$ est l'indice de réfraction du milieu.

Ces deux principes sont très semblables et on peut les identifier si l'on parvient à lier les intégrands par

$$u(q) = \frac{c(E)}{\sqrt{2m(E - V(q))}}.$$

On peut alors se demander si la vitesse de la particule est la même que celle du signal lumineux (problème : $v \propto \sqrt{E}$, et $u \propto \frac{1}{\sqrt{E}}$).

En fait, $u(q)$ représente la vitesse de phase. La vitesse de groupe g est donnée par¹

$$\frac{1}{g} = \frac{d}{d\omega} \frac{\omega}{u(q)}$$

Selon la relation d'Einstein $E = \hbar\omega$ on a

$$\frac{1}{g} = \frac{d}{dE} \frac{E}{u(q)}$$

La vitesse de la particule est, quant à elle

$$v = \frac{1}{m} \sqrt{2m(E - V(q))}$$

ce qui nous mène à poser, pour compléter l'analogie,

$$g = v.$$

On en déduit alors

$$c(E) = E \quad \text{et} \quad u(q) = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V)}}.$$

Ainsi $n = n(q, \omega)$ qui dépend de ω et représente un milieu dispersif.

De Broglie pense que comme il existe une optique géométrique qui correspond à la mécanique classique, et comme il y a une optique ondulatoire, il doit y correspondre une mécanique ondulatoire

optique géométrique	\longleftrightarrow	mécanique classique
λ très petit $\uparrow \quad \downarrow$		$\downarrow \quad \uparrow$
optique ondulatoire	\longleftrightarrow	mécanique ondulatoire

et il propose la relation

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

avec $E = \hbar\omega$.

La mécanique ondulatoire serait une généralisation de la mécanique classique. Celle-ci serait alors la limite de la mécanique ondulatoire pour les courtes longueurs d'ondes.

Si λ est la longueur d'onde

$$\frac{\lambda}{2\pi} = \frac{\omega}{u} = \frac{\hbar}{mv}$$

1. Alors que la vitesse de phase v_ϕ indique le taux de variation de la phase $\phi = kx - \omega t$ et vaut

$$v_\phi = \frac{\omega}{k},$$

la vitesse de groupe indique la vitesse de propagation du train d'onde au cours du temps et est donnée par

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}.$$

et si a est une longueur caractéristique

$$\frac{\lambda}{2\pi a} = \frac{\hbar}{mva}.$$

Dans le modèle de Bohr de l'atome, on a

$$mva = n\hbar, \quad n \in \mathbb{N}$$

on obtient

$$\frac{\lambda}{a} = \frac{2\pi}{n} \ll 1, \quad \text{pour } n \gg 1.$$

Pour les grands nombres quantiques on retrouve la mécanique classique, alors que pour $n = 1, 2, 3$, on est dans le domaine de la mécanique ondulatoire (a de l'ordre de \AA)

$$\frac{\lambda}{a} \simeq 1, \quad \text{pour } n = 1, 2, 3.$$

L'équation stationnaire de fréquence ω dans un milieu isotrope, avec ψ l'amplitude de l'onde s'écrit

$$-\Delta\psi + \frac{\omega^2}{u(q)^2}\psi = 0.$$

Par la relation 1 $E = \hbar\omega$ et par la relation 2 $u^2 = \frac{E^2}{2m(E-V)}$ on obtient

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + (E - V(q))\psi = 0.}$$

C'est l'équation de Schrödinger stationnaire.

Pour obtenir l'équation dynamique, on peut commencer par décomposer ψ en modes propres (série de Fourier)

$$\psi = \sum_k e^{i\omega_k t} c_k.$$

Puis on constate que ω_k est associé à l'opérateur $\frac{1}{i}\partial_t$ et ainsi $E = \frac{\hbar}{i}\partial_t$. On obtient de cette façon l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(q)\right]\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi.}$$

1.2 Équation de Hamilton-Jacobi

Pour un système hamiltonien, en mécanique classique, on définit l'action

$$S(q_0, q_1, t) = \int_0^t \mathcal{L}(q(t'), \dot{q}(t'), t') dt'$$

où \mathcal{L} est le lagrangien du système $\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) = T(\dot{q}) - V(q, t)$.

L'intégrale est prise le long de la trajectoire réelle avec q_0 et $q_1 = q_t$ fixés.

Calculons

$$\begin{aligned} dS &= \int_0^{t+dt} ds \mathcal{L}(q_s + dq_s, \dot{q}_s + d\dot{q}_s) - \int_0^t ds \mathcal{L}(q_s, \dot{q}_s) \\ &= dt \mathcal{L}(q_t, \dot{q}_t) + \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j}(t+dt) dq_j(t+dt) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j}(0) dq_j(0) \right) \\ &\quad + \int_0^t \sum_j \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} - \frac{\partial}{\partial s} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \right) dq_j(s) \end{aligned}$$

où la dernière intégrale s'annule à cause des équations d'Euler-Lagrange.

Posons $p_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j}$. La position sur le chemin varié $q + dq$ en $t + dt$ diffère de la position sur chemin q au temps t par

$$dq_t = q(t + dt) + dq(t + dt) - q(t) = dq(t + dt) + \dot{q}dt$$

de sorte que

$$dq(t + dt) = dq_t - \dot{q}dt$$

on a alors

$$dS = dt \left[\mathcal{L} - \sum_j p_j \dot{q}_j \right] + \sum_j \left(dq_j p_j - dq_j^0 p_j^0 \right).$$

Or $\mathcal{L} - \sum_j p_j \dot{q}_j = \mathcal{H}$ est l'hamiltonien. Ainsi

$$dS = -\mathcal{H}dt + \sum_j \left(dq_j p_j - dq_j^0 p_j^0 \right).$$

Comme $S = S(q, q^0, t)$ on en déduit que

$$\begin{cases} -\frac{\partial S}{\partial t} &= \mathcal{H} \\ \frac{\partial S}{\partial q_j} &= p_j \\ \frac{\partial S}{\partial q_j^0} &= -p_j^0 \end{cases}$$

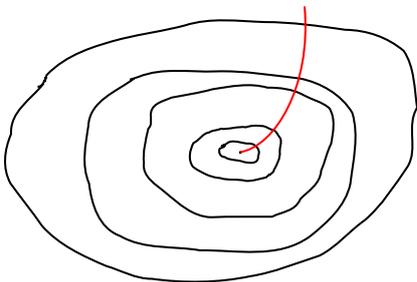
En considérant que

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(q), \quad \text{avec} \quad p^2 = \sum_j p_j^2,$$

on obtient l'équation de Hamilton-Jacobi

$$\boxed{-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} \sum_j \left(\frac{\partial S}{\partial q_j} \right)^2 + V(q).}$$

1.2.1 Interprétation géométrique



Considérons dans l'espace les surfaces $S(q, t) = \text{cste}$ et supposons qu'au temps $t = 0$ elles se concentrent sur un point q_0 . On aura toujours que la normale à ces surfaces sera $\vec{p} = \nabla S$.

Les trajectoires partant de q_0 sont les courbes perpendiculaires à ces surfaces.

Analogie optique

Si les surfaces à S constante représentent les surfaces d'onde, S détermine les trajectoires et inversement, la donnée d'un faisceau de trajectoires donne S .

Dans le cas d'un système conservatif (E est conservée)

$$S = \sum_{j=1}^N \int_0^t p_j dq_j - Et$$

ce que l'on écrit plus brièvement

$$S = \int_0^t pdq - Et.$$

1.3 Optique géométrique et optique ondulatoire

Une équation d'onde est de la forme

$$\frac{1}{c(q)^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi - \Delta \psi = 0$$

où $c(q)$ est la vitesse de l'onde dans un milieu isotrope, au point q .

Posons $\psi = ae^{iI}$ avec $a = a(\vec{r}, t)$ l'amplitude de l'onde et $I = I(\vec{r}, t)$ l'eikonale.

L'optique géométrique devrait correspondre aux courtes longueurs d'ondes par rapport aux dimensions caractéristiques du milieu, c'est-à-dire par rapport aux longueurs sur lesquelles $c(q)$ varie substantiellement.

La phase I varie rapidement (de 2π sur une longueur d'onde) comme fonction de \vec{r} et t , tout en ayant une grande valeur. L'amplitude a varie lentement. Avec l'indice de réfraction n on a

$$\begin{aligned} (1) \quad n^2(r) \left[\bar{\psi} \partial_t^2 \psi + \psi \partial_t^2 \bar{\psi} \right] &= \bar{\psi} \operatorname{div} \nabla \psi + \psi \operatorname{div} \nabla \bar{\psi} \\ (2) \quad n^2(r) \left[\bar{\psi} \partial_t^2 \psi - \psi \partial_t^2 \bar{\psi} \right] &= \bar{\psi} \operatorname{div} \nabla \psi - \psi \operatorname{div} \nabla \bar{\psi} \end{aligned}$$

soit

$$\begin{aligned} (1) \quad n^2(r) \left[\partial_t^2 |\psi|^2 - 2|\partial_t \psi|^2 \right] &= \Delta |\psi|^2 - 2|\nabla \psi|^2 \\ (2) \quad n^2(r) \partial_t (\bar{\psi} \partial_t \psi - \psi \partial_t \bar{\psi}) &= \operatorname{div} [\bar{\psi} \nabla \psi - \psi \nabla \bar{\psi}] \end{aligned}$$

où l'on a utilisé l'identité $\bar{\psi} \operatorname{div} \nabla \psi = \operatorname{div} (\bar{\psi} \nabla \psi) - \nabla \bar{\psi} \nabla \psi$. On a ainsi

$$\begin{aligned} (1) \quad n^2(r) \left[\partial_t^2 a - 2[(\partial_t a)^2 + a^2 (\partial_t I)^2] \right] &= \Delta a^2 - 2[(\nabla a)^2 + a^2 (\nabla I)^2] \\ (2) \quad \partial_t \left[a^2 n^2(r) - \partial_t I \right] + \operatorname{div} (a^2 \nabla I) &= 0 \end{aligned}$$

On remarque alors que (2) a la forme d'une équation de conservation

$$\partial_t \rho + \operatorname{div} (\rho \vec{v}) = 0$$

où $\rho = a^2 n^2(r) - \partial_t I$.

La limite géométrique correspond alors à considérer ∇a , Δa^2 , $\partial_t^2 a^2$ et $\partial_t a$ petits comparés à $\partial_t I$, ∇I , et I .

Les équations de l'optique géométrique sont alors

$$\begin{aligned} (\nabla I)^2 &= n^2(r) (\partial_t I)^2 \\ \operatorname{div} (a^2 \nabla I) &= 0. \end{aligned} \tag{1.1}$$

La première équation est l'équation eikonale et la deuxième, l'équation de conservation de l'intensité.

Soit une onde monochromatique de pulsation sans dimension $\omega = \frac{2\pi}{\lambda}b$ et où λ est la longueur d'onde dans le vide

$$I(r, t) = \omega(J(r) - t), \quad \partial_t I = -\omega$$

La première équation s'écrit

$$n^2(r)(-2\omega^2) = \Delta a^2 - 2[(\nabla a)^2 + \omega^2(\nabla J)^2]$$

On obtient alors les équations

$$\boxed{\begin{aligned} \omega^2 n^2(r) &= (\nabla J)^2 \\ \operatorname{div}(a^2 \nabla I) &= 0. \end{aligned}} \quad (1.2)$$

Interprétation géométrique

Appelons surfaces d'ondes les surface $J(r) = \text{cste}$. Alors ∇J est une normale à la surface en r .

Soit $\vec{m}(r)$ la normale, normée, de cette surface d'onde $\vec{m}^2(r) = 1$, et solution de l'équation eikonale

$$\nabla J = \omega n(r) \vec{m}(r).$$

On va appeler *rayons optiques* les courbes orthogonales à ces surfaces d'ondes.

L'intensité de l'onde est $\rho(r) = a^2(r)n^2(r)\omega$ et le courant conservé

$$\begin{aligned} \vec{j} &= \rho(r)u(r)\vec{m}(r) \\ &= a^2 \nabla I \end{aligned}$$

Ainsi on a propagation de l'énergie dans la direction $\vec{m}(r)$ avec la vitesse $u(r)$.

Équation des trajectoires des rayons

Soit s l'abscisse curviligne le long de la trajectoire. On a

$$\frac{d\vec{r}}{ds} = \vec{m}(\vec{r}(s))$$

L'équation eikonale devient

$$\nabla J(r(s)) = n(r(s)) \frac{d\vec{r}}{ds}$$

de sorte que

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \left[n(r) \frac{d\vec{r}}{ds} \right] &= \nabla \frac{d}{ds} J(r(s)) \\ &= \nabla \left[\nabla J \cdot \frac{d\vec{r}}{ds} \right] \\ &= \nabla \left[n(r) \left(\frac{d\vec{r}}{ds} \right)^2 \right] \end{aligned}$$

soit

$$\boxed{\frac{d}{ds} \left[n(r) \frac{d\vec{r}}{ds} \right] = \nabla n(r)}$$

c'est l'équation des trajectoires. On peut obtenir également cette équation avec les équations d'Euler en partant du principe de Fermat

$$\delta \int_{s_0}^{s_1} n(r(s)) ds = 0.$$

On note que sur la trajectoire réelle, la longueur optique

$$\begin{aligned} \int_{s_0}^{s_1} n(r(s)) ds &= \int_{s_0}^{s_1} n(r(s)) \frac{d\vec{r}}{ds} \cdot \frac{d\vec{r}}{ds} ds \\ &= \int_{s_0}^{s_1} n(r(s)) \vec{m}(r(s)) \cdot d\vec{r} \\ &= \int_{r_0}^{r_1} \nabla J \cdot d\vec{r} \\ &= J(r_1) - J(r_0) \end{aligned}$$

Ainsi

$$\int_{s_0}^{s_1} n(r(s)) ds = J(r_1) - J(r_0)$$

est la différence de phase.

Équation de continuité

L'équation de continuité affirme

$$\text{div}(a^2 \nabla J) = 0.$$

Prenons un faisceau de trajectoires et appliquons Gauss à un tube formé par ces faisceaux, on obtient l'équation de transport de l'optique

$$\rho(r_1) dS_1 = \rho(r_2) dS_2 \quad \Leftrightarrow \quad \rho(r_1) = \rho(r_2) \frac{dS_2}{dS_1}$$

où $\rho(r) = a^2(r)n(r)\omega$.

Si les rayons tendent à se concentrer en r_1 , alors $\frac{dS_2}{dS_1} \gg 1$ et l'intensité ρ sera très grande en r_1 .

De tels endroits s'appellent *foyers* et le lieu des foyers définit une surface appelée *surface caustique*.

Il faut toutefois garder à l'esprit que si l'intensité est grande et varie vite, notre approximation géométrique est inconsistante, même si les longueurs d'ondes sont courtes.

On ne peut donc pas négliger le caractère ondulatoire près des caustiques. On atteint ici un problème difficile, à savoir les interférences près des caustiques.

1.4 Mécanique classique et mécanique quantique

Dans l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi$$

posons

$$\psi(r, t) = a(r, t) e^{i\frac{S(r,t)}{\hbar}}.$$

En parcourant à nouveau les mêmes opérations que dans le cas optique, on obtient, avec $\rho = |\psi|^2 = a^2$

$$-\frac{\partial}{\partial t} S = \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} \quad (1.3)$$

$$\partial_t \rho + \text{div} \left(\rho \frac{\nabla S}{m} \right) = 0 \quad (1.4)$$

L'équation 1.4 est une équation de continuité. Dans la limite $\hbar \rightarrow 0$, l'équation 1.3 devient l'équation de Hamilton-Jacobi de la mécanique classique. Ainsi

$$S(r, t) = \int L dt$$

est l'action classique, interprétée maintenant comme associée à une surface d'onde et les trajectoires sont les rayons orthogonaux à cette surface. La deuxième équation s'interprète comme l'équation de continuité d'un fluide de densité ρ et de vitesse $\vec{v} = \frac{\nabla S}{m} = \frac{\vec{p}}{m}$.

Remarque 1

En venant de la mécanique quantique, on arrive, quand $\hbar \rightarrow 0$, vers la mécanique classique d'un faisceau de particules.

Cas stationnaire

Avec l'action

$$S = -Et + W$$

et la longueur d'onde de de Broglie

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V(r))}}$$

alors

$$(\nabla W)^2 = \frac{\hbar^2}{\lambda^2} \left(1 + \lambda^2 \frac{\Delta \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} \right)$$

La limite classique s'obtient avec

$$\lambda^2 \frac{\Delta \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} \ll 1$$

et donc $\frac{\lambda}{b} \ll 1$.

En outre, il faut également que $\rho \neq 0$ et ρ ne doit pas varier trop vite (il ne faut pas être dans un régime de caustiques). Dans le cas d'un régime de caustiques, l'approximation ne fonctionne pas.

Problème semi-classique

On obtient une étude semi-classique en prenant \hbar petit. La question revient à se demander si l'on peut exprimer les niveaux d'énergie à l'aide de grandeurs classiques.

1.5 Dynamique semi-classique

Considérons un faisceau de trajectoires. La mécanique quantique introduit l'incertitude

$$\Delta p \Delta q \geq \hbar,$$

une impossibilité de déterminer q et p très précisément.

Construisons un état ϕ , un paquet d'onde, initialement centré en (P_0, Q_0) , avec une incertitude minimale.

Si

$$\langle A \rangle = \int \phi^* A \phi$$

on veut

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= P_0 & (\Delta p)^2 &= \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \\ \langle q \rangle &= Q_0 & (\Delta q)^2 &= \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2 \end{aligned}$$

avec

$$\Delta p \Delta q = \hbar.$$

Le paquet d'onde va évoluer au temps t

$$\psi_t = e^{-i\frac{\hbar}{\hbar}t} \phi.$$

Est-ce que ψ_t sera centré autour de la trajectoire classique si \hbar est petit ?

Soit

$$\langle p \rangle_t = P_t, \quad \langle q \rangle_t = Q_t$$

et (P_t, Q_t) qui représente les trajectoires classiques, avec $\Delta p \Delta q$ pas trop grand.

Heisenberg a montré que pour l'oscillateur harmonique le résultat est vérifié avec la même dispersion. Mais c'est un cas particulier. Dans le cas général, il y a une dispersion du paquet d'onde (qui reste négligeable pour des temps petits).

On appelle *états cohérents*, les états préparés avec l'incertitude minimale, qui ne se disperse pas. Prenons

$$\phi(q) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}} \sqrt{a}} \exp \left[-\frac{1}{4\hbar} \frac{b}{a} (1 - Q)^2 + i \frac{P}{\hbar} (q - Q) \right]$$

une fonction d'onde gaussienne, avec $\{a, b\} \subset \mathbb{C}$ tels que

$$\Re\left(\frac{b}{a}\right) = \frac{1}{|q|^2}.$$

Ce sont des états normés

$$\int |\phi|^2 dq = 1, \quad \langle q \rangle = Q, \quad \Delta q = \sqrt{\hbar}|a|, \quad \Delta p = \frac{\sqrt{\hbar}}{2}|b|.$$

Si a et b sont réels

$$\Delta p \Delta q = \frac{\hbar}{2}.$$

Dans les deux représentations ($q \xleftrightarrow{\text{T.F.}} p$) on a une gaussienne, donc on localise de la meilleure manière possible en p et en q .

ϕ dépend de (P, Q) et (a, b) . Prenons pour état initial $\psi_0 = \phi_0$ avec les paramètres (P_0, Q_0) et (a_0, b_0) . Si on regarde P et Q comme classiques, est-ce que le paquet d'onde va rester une gaussienne qui se déplace suivant une trajectoire classique ?

On va comparer ψ_t avec la fonction d'onde ϕ_t qui est l'état cohérent au temps t avec les paramètres (P_t, Q_t) où les paramètres P_t et Q_t sont les solutions des équations de Hamilton avec les conditions initiales P_0 et Q_0 et des paramètres a_t et b_t qui caractérisent la dispersion à déterminer. On a le théorème suivant

Théorème 1.1

Si

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

et si V est assez lisse, et avec

$$\psi_t(a) - e^{i\frac{S(a)}{\hbar}} \phi_t(a) = r_t(a)$$

(où S est l'action classique $S = \int_0^t \mathcal{L}(q, \dot{q}) d\tau$), si a_t et b_t satisfont les équations entièrement

classiques

$$\begin{cases} a_t &= \frac{\partial Q_t}{\partial Q_0} a_0 + \frac{i}{2} \frac{\partial Q_t}{\partial P_0} b_0 \\ b_t &= \frac{\partial P_t}{\partial P_0} b_0 - 2i \frac{\partial P_t}{\partial Q_0} a_0 \end{cases}$$

alors pour tout temps $0 < t < T$

$$\|r_t\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |r_t(q)|^2 dq = o(\sqrt{\hbar}, T)$$

Les valeurs qui interviennent dans a_t et b_t sont reliées aux secondes dérivées de l'action. On mesure l'effet des chemins voisins $Q_t(P_0, Q_0)$ et $P_t(P_0, Q_0)$. Autrement dit, dans tout intervalle de temps fini, l'état reste localisé autour de la trajectoire classique, si $\hbar \rightarrow 0$.

Mais a_t et b_t sont complexes, en général, et donc

$$\Delta p_t \Delta q_t > \frac{\hbar}{2}$$

et on a une dispersion du paquet d'onde.

Les valeurs de \hbar et T sont reliées si $\hbar \searrow$ et $T \nearrow$.

Idée de la preuve

Dans l'hamiltonien quantique, on écrit

$$H = -\frac{(P + p - P)^2}{2m} + V(Q + q - Q)$$

et on développe en $p - P$ et $q - Q$ au second ordre. On obtient l'oscillateur harmonique. On prend P et Q égaux à P_t et Q_t et on calcule l'erreur faite dans la dynamique. On linéarise l'hamiltonien quantique autour du classique.

1.6 Méthode WKB

L'équation de Schrödinger en 1-dim, dans le cas stationnaire, s'écrit

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V(x)\psi = E\psi$$

Dans l'approximation classique, en posant

$$\psi(x) = \sqrt{\rho(x)} e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}$$

Ainsi les états stationnaires sont décrits par

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 &= 2(E - V(x)) \\ \partial_x \left[\rho(x) \frac{\partial S}{\partial x} \right] &= 0 \end{aligned}$$

La première équation étant l'équation de Hamilton-Jacobi, et la seconde, l'équation de continuité.

On déduit de la seconde équation

$$\rho(x) = \frac{\text{cste}}{\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)}$$

et si $p(x) = \sqrt{2(E - V(x))}$, alors $p(x) = \frac{\partial S}{\partial x}$. Ainsi

$$\psi_+(x) = \frac{\text{cste}}{\sqrt{p(x)}} e^{i \int_{x_0}^x \frac{p(x')}{\hbar} dx'}$$

On a encore la solution $-p(x) = \sqrt{2(E - V(x))}$ avec

$$\psi_-(x) = \frac{\text{cste}}{\sqrt{-p(x)}} e^{-i \int_{x_0}^x \frac{p(x')}{\hbar} dx'}$$

La solution semi-classique générale s'écrit alors

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} e^{i \int p dq} + \frac{B}{\sqrt{-p(x)}} e^{-i \int p dq}$$

Remarque 2

1. Si $E > V(x)$, alors $p(x)$ est réel et peut s'interpréter comme l'impulsion classique, car en mécanique classique

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \geq V(x).$$

Or, en mécanique quantique, on peut avoir $E < V(x)$, des régions classiquement interdites. Dans ces cas, on a $p(x) = i \sqrt{2(E - V)}$ et la solution devient

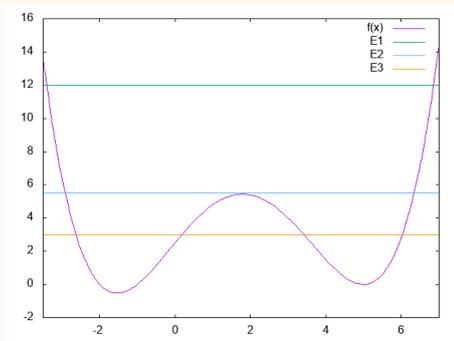
$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int |p| dq} + \frac{B}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int |p| dq}$$

Ce sont des solutions qui croissent et décroissent exponentiellement (effet tunnel).

2. L'approximation est bonne si $p(x) = \frac{1}{\lambda(x)}$, et $\lambda(x)$ est petit par rapport à la longueur sur laquelle V varie et λ varie lentement.

Les points délicats sont ceux pour lesquels $p(x) = 0$ et donc $\psi(x) \rightarrow \infty$, c'est-à-dire, pour lesquels $V(x) = E$ (ce sont les points tournants, assimilés aux caustiques). En ces points, l'approximation ne tient plus.

3. **Analogie avec les caustiques.**



Soit un potentiel $V(x)$ comme sur la figure. La particule classique évolue entre les *points tournants* qui sont les intersections des niveaux d'énergie (p.ex. E_1) et le potentiel. Par exemple, pour l'énergie E_1 , il y a deux points tournants entre lesquels évolue la particule classique. Au-delà de ces points tournants, ψ décroît exponentiellement, c'est le domaine de l'effet tunnel.

En E_3 la particule se trouve dans les deux cuves (elle effectue des sauts d'une cuve à l'autre). Aux points tournants, on a en général des zéros simples (cas de E_1 et E_3 et les deux intersections extrêmes de E_2), mais exceptionnellement, il peut y avoir des zéros doubles de $E - V(x)$ (comme dans le cas E_2 , entre les cuves).

Autour d'un point tournant a (zéro simple) on linéarise le potentiel

$$p^2(x) = c(x - a), \quad c > 0, \quad c = -V'$$

et l'équation de Schrödinger devient

$$\frac{\hbar^2}{2}\psi'' + c(x - a)\psi = 0.$$

4. L'équation d'Airy $u'' + btu = 0$ a pour solution

$$u = \sqrt{t} J_{\pm\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\sqrt{bt^{\frac{3}{2}}}\right)$$

où $J_\nu(z)$ est la fonction de Bessel d'ordre ν .

Près de a , on a

$$S(x) = \int_a^x p(t)dt = \frac{2}{3}(x - a)^{\frac{3}{2}}\sqrt{c}.$$

La solution générale du côté de la région classiquement permise du point tournant est alors

$$\psi(x) \simeq \sqrt{\frac{z_a(x)}{p(x)}} \left[A J_{\frac{1}{3}}(z_a(x)) + B J_{-\frac{1}{3}}(z_a(x)) \right]$$

La solution générale dans la région classiquement interdite du point tournant est

$$\psi(x) \simeq \sqrt{\frac{z_a(x)}{p(x)}} \left[A' I_{\frac{1}{3}}(z_a(x)) + B' K_{\frac{1}{3}}(z_a(x)) \right]$$

avec

$$z_a(x) = \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(t)dt \right|, \quad p(t) = \sqrt{2(E - V(t))}.$$

Près des points tournants (racines simples ou multiples de $E - V(x)$) l'approximation semi-classique n'est plus valable. Il faut remplacer l'équation de Schrödinger au voisinage du point par l'équation d'Airy

$$\frac{\hbar}{2}\psi'' + c(x - a)\psi = 0$$

qui est de la forme $-W'' + xW = 0$. En représentation p

$$W(x) = \int dp e^{ipx} \bar{W}(p).$$

L'équation d'Airy devient alors

$$(p^2 + i\frac{\partial}{\partial p})\bar{W} = 0 \Leftrightarrow \bar{W}' = -\frac{p^2}{i}\bar{W}$$

que l'on résout immédiatement

$$\bar{W} = ce^{\frac{i}{3}p^3}$$

et on trouve finalement

$$W(x) = c \int dp e^{i(p x + \frac{1}{3} p^3)}$$

Les fonctions de Airy sont

$$A(\pm x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{t^3}{3} \pm xt\right) dt$$

$$B(\pm x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\frac{1}{3}t^3 \pm xt} + \sin\left(\frac{t^3}{3} \pm xt\right) dt$$

On exprime les fonctions de Airy à l'aide des fonctions de Bessel, avec $z = \frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}$

$$A(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{x}{3}} K_{\frac{1}{3}}(z(x)), \quad A(-x) = \frac{1}{3} \sqrt{x} \left(J_{\frac{1}{3}}(z) + J_{-\frac{1}{3}}(z) \right)$$

$$B(x) = \sqrt{\frac{x}{3}} \left[I_{-\frac{1}{3}}(z) + I_{\frac{1}{3}}(z) \right], \quad B(-x) = \sqrt{\frac{x}{3}} \left[J_{-\frac{1}{3}}(z) - J_{\frac{1}{3}}(z) \right]$$

On écrit les solutions de l'équation de Schrödinger :

$$\text{région permise : } \psi = \sqrt{\frac{z_a(x)}{p(x)}} \left[A J_{\frac{1}{3}}(z_a(x)) + B J_{-\frac{1}{3}}(z_a(x)) \right]$$

$$\text{région interdite : } \psi = \sqrt{\frac{z_a(x)}{p(x)}} \left[A' I_{\frac{1}{3}}(z_a(x)) + B' K_{\frac{1}{3}}(z_a(x)) \right]$$

avec

$$z_a(x) = \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(t) dt.$$

ces solutions sont bonnes près des points tournants, mais lorsque l'on s'éloigne des points tournants $|x - a| > \hbar^{\frac{1}{3}}$, donc $z_a \gg 1$. On utilise alors les formules asymptotiques pour $z_a \rightarrow \infty$

$$I_\nu(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} e^z$$

$$K_\nu(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} e^{-z}$$

$$J_\nu(z) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2}\nu\right)$$

Il en résulte que du côté autorisé du point tournant

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[A e^{\frac{i}{\hbar}|S(x)|} + B e^{-\frac{i}{\hbar}|S(x)|} \right]$$

et du côté interdit

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[A' e^{\frac{1}{\hbar}|S(x)|} + B' e^{-\frac{1}{\hbar}|S(x)|} \right]$$

avec $S(x) = \int_0^x p(t) dt$.

On obtient de cette manière les solutions pour trois régions (point tournant, côté interdit et côté autorisé). Il reste à recoller ces solutions, donc à traiter correctement le point tournant.

Airy a résolu le problème de l'arc-en-ciel (linéarisation autour du point tournant). Dans ce but, on cherche les relations entre les coefficients de la fonction du côté interdit et ceux de la fonction du côté autorisé du point tournant. On utilise à cette fin la continuité de $\psi(x)$ et de $\psi'(x)$ en $x = a$. Avec

$$p(x) \simeq \sqrt{|x - a|}, \quad z \simeq |x - a|^{\frac{3}{2}} \Rightarrow z^{\frac{2}{3}} \simeq |x - a|.$$

Comme pour de petits z

$$J_\nu(z) \simeq \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^\nu$$

$$I_\nu(z) \simeq \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^\nu$$

$$K_\nu(z) \simeq \frac{\pi}{2 \sin(\pi\nu)} [I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)]$$

on a

$$\text{côté autorisé : } \psi(x) = \left[\frac{A}{\Gamma(\frac{4}{3})} \left(\frac{z}{2}\right)^{\frac{1}{3}} + \frac{B}{\Gamma(\frac{2}{3})} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\frac{1}{3}} \right] z^{\frac{2}{3}}$$

$$\text{côté interdit : } \psi(x) = \left[\frac{1}{\Gamma(\frac{4}{3})} \left(A' - \frac{B'\pi}{\sqrt{3}}\right) \left(\frac{z}{2}\right)^{\frac{1}{3}} + \frac{B'\pi}{\sqrt{3}\Gamma(\frac{2}{3})} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\frac{1}{3}} \right] z^{\frac{2}{3}}$$

où l'on a remplacé $|x - a|$ par $z^{\frac{2}{3}}$ et $\sin(\frac{\pi}{3})$ par $\frac{\sqrt{3}}{2}$, ce qui conduit aux formules de connexions

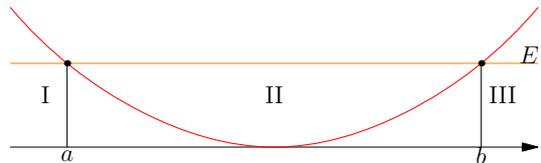
$$A = -A' + \frac{B'\pi}{\sqrt{3}}$$

$$B = \frac{B'\pi}{\sqrt{3}}$$

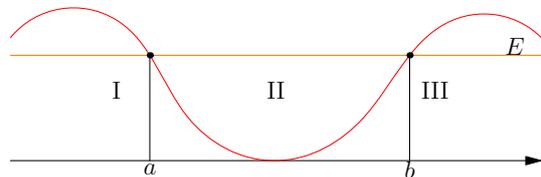
1.7 Application aux états liés

Supposons qu'il n'y a que deux points tournants en $a < b$.

cas 1) C'est le cas de l'oscillateur harmonique avec un spectre discrets d'états liés



cas 2) C'est la cas d'un puit de profondeur finie, avec une spectre discret (états liés) $E < 0$ et un spectre continu (états de diffusion) d'énergie $E > 0$.



Classiquement, dans les deux cas, le mouvement est périodique entre les points a et b et la trajectoire est fermée.

Comme

$$\left| \int_a^x p(t) dt \right| \rightarrow \infty, \quad \text{si } |x| \rightarrow \infty$$

il faudra prendre des solutions exponentiellement décroissantes à l'infini (états liés).

$x < a$:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{z_a}{p}} B' K_{\frac{1}{3}}(z_a(x))$$

dans la région I.

$x > b$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{z_b}{p}} B'' K_{\frac{1}{3}}(z_b(x))$$

dans la région III.

Dans la région II, classiquement permise, on a une combinaison de $J_{\frac{1}{3}}$ et de $J_{-\frac{1}{3}}$ et en utilisant la formule de connexion :

$$\text{en } a : \quad \psi(x) = \frac{B' \pi}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{z_a}{p}} \left[J_{\frac{1}{3}}(z_a) + J_{-\frac{1}{3}}(z_a) \right]$$

$$\text{en } b : \quad \psi(x) = \frac{B'' \pi}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{z_b}{p}} \left[J_{\frac{1}{3}}(z_b) + J_{-\frac{1}{3}}(z_b) \right]$$

Les solutions doivent se confondre en II. On développe asymptotiquement les fonctions de Bessel. Ainsi

$$(*) : \quad B' \left[\cos\left(z_a - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{6}\right) + \cos\left(z_a - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{6}\right) \right] = B'' \left[\cos\left(z_b - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{6}\right) + \cos\left(z_b - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{6}\right) \right]$$

avec

$$z_a = \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(t) dt, \quad z_b = \frac{1}{\hbar} \int_x^b p(t) dt, \quad \text{et} \quad z_a + z_b = \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(t) dt.$$

Pour vérifier la relation (*), il faut que

$$z_a + z_b - \frac{\pi}{2} = n\pi, \quad n \in \mathbb{Z}^*$$

$$B' = (-1)^n B''$$

Il en découle que

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(t) dt = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$$

qui est une condition de quantification des états.

On appelle *action* l'intégrale

$$I(E) = \oint p dq$$

sur les trajectoires périodiques. Dans notre cas

$$I(E) = 2 \int_a^b p(q) dq.$$

On obtient ainsi la condition de quantification

$$I(E_n) = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) = \oint p dq \Big|_{H=E}$$

qui est la règle de quantification de *Bohr-Sommerfeld*.

L'action est une grandeur naturelle, car elle est conservée et c'est aussi une grandeur dynamique (on l'appelle alors *variable d'action*) à laquelle on associe une variable canoniquement conjuguée, ϕ , la *variable d'angle*

$$\begin{cases} \dot{I} &= 0 \\ \dot{\phi} &= \frac{\partial H}{\partial I} = \omega(I) \end{cases}$$

utilisable dans un petit nombre de cas.

Remarque 3

On a raisonné jusqu'ici avec \hbar petit. Si on considère des potentiels qui croissent à l'infini, $I(E)$ devient grand et la condition de validité reste

$$\frac{I(E)}{\hbar} \gg 1,$$

soit

1. E fixé, \hbar petit.
2. \hbar fixé, E grand.

Ainsi la condition de quantification de Bohr-Sommerfeld reste valable dans le cas où \hbar est fixé et où l'on s'intéresse aux grandes énergies E_n , c'est-à-dire aux grands nombres quantiques.

Plus généralement, à 1 dimension, on obtiendra les niveaux d'énergie par la formule semi-classique

$$I(E) = \oint p dq = 2\pi\hbar\left(n + \frac{\nu}{4}\right)$$

le nombre ν prenant les valeurs 0, 1, 2, 3 est le nombre de points tournants (mod 4) rencontrés par la trajectoire périodique. n est le nombre de zéros de la fonction d'onde.

1.8 Généralisations

Soit le problème à n dimensions

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V\right)\psi = E\psi. \tag{1.5}$$

On suppose qu'il existe un système de coordonnées $\{q_i\}_{i=1}^n$ tel que dans ces coordonnées on puisse choisir des ψ de la forme

$$\psi = \prod_{i=1}^n \psi_i(q_i)$$

(et $H = \sum_i h_i(q_i, p_i)$) de façon à satisfaire l'équation (1.5) et si les $\phi_i(q_i)$ satisfont une équation du type de Sturm-Liouville

$$a\phi'' + b\phi' + c\phi = 0$$

que l'on peut ramener à l'équation de Schrödinger en posant $\phi = fg$ et en choisissant g tel que l'équation pour j ne contienne plus f'

$$-f'' + wf = 0.$$

Exemple 1

1. Pour une particule libre en 2 dimensions, on a

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} - (\lambda + \lambda')\right]\psi = 0.$$

Cette équation peut se mettre sous la forme

$$(A + B)\psi = 0$$

avec $A(x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \lambda$ et $B(y) = \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \lambda'$. En posant $\psi = \phi_1(x)\phi_2(y)$ on obtient l'équation

$$\phi_2(A\phi_1) + \phi_1(B\phi_2) = 0$$

Les fonctions ϕ_1 et ϕ_2 qui vérifient

$$A\phi_1 = 0 \quad \text{et} \quad B\phi_2 = 0$$

forment des solutions du problème initial.

Dans notre cas $-E = \lambda + \lambda'$ et dans le carré unité ± 1 , on aura

$$\phi(x, y) = f(x)g(y) \quad \begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) - \lambda f(x) = 0 \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} g(y) - \lambda g(y) = 0 \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} f(\pm 1) = 0 \\ g(\pm 1) = 0 \end{cases}$$

et

$$\begin{cases} \lambda = -\frac{(n\pi)^2}{2} \\ \lambda' = -\frac{(n'\pi)^2}{2} \end{cases}$$

2. On traite de même la particule libre dans le disque, en coordonnées polaires.
3. La particule dans un potentiel central de la forme $V = V(r)$, en coordonnées sphériques (r, θ, ϕ)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\theta, \phi} + h_r + V$$

avec une fonction d'onde

$$\psi = f(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

où Y_{lm} sont les harmoniques sphériques

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = e^{im\phi}P_l^m(\cos(\theta)).$$

On obtient alors une équation radiale pour $f(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}f'' + U_l(r)f(r) = Ef(r), \quad U_l(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}.$$

On est ainsi ramenés à un problème de Schrödinger à 1 dimension sur le demi-axe $r \in [0, \infty[$. On exige $f(r) \rightarrow 0$ lorsque $r \rightarrow \infty$, mais il y a une singularité à l'origine.

Prenons les variables adimensionnelles

$$\epsilon^2 = \frac{\hbar^2}{ma^2V_0}, \quad V(r) = V_0U\left(\frac{r}{a}\right)$$

Alors le problème devient

$$-\frac{\epsilon^2}{2}y'' + U_l(r)y = Ey, \quad y = y(r) = f(r)$$

et

$$U_l = U(r) + \frac{\epsilon^2}{2r^2}l(l+1).$$

On effectue le changement de variable $r = e^z$, $-\infty < z < \infty$. L'équation devient

$$-\frac{\epsilon^2}{2}\psi'' + w_l(z)\psi = 0$$

où

$$w_l(z) = e^{2z} \left[U(e^z) + \frac{\epsilon^2}{2} \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 e^{-2z} - E \right].$$

On s'est ainsi ramené à un problème sur tout l'axe. On exige maintenant $\psi(-\infty) = 0$ (qui correspond à $y(0) = 0$).

Si $r_0 = e^{z_0}$ représente le point tournant le plus proche de l'origine, pour $0 < r < r_0$ ($-\infty < z < z_0$)

$$\psi(z) = \sqrt{\frac{S_{z_0}(z)}{p(z)}} B' K_{\frac{1}{3}}(S_{z_0}(z))$$

et dans la région autorisée ($r > r_0$)

$$\psi = \sqrt{\frac{S_{z_0}(z)}{p(z)}} \left[A J_{\frac{1}{3}}(S_{z_0}(z)) + B J_{-\frac{1}{3}}(S_{z_0}(z)) \right]$$

avec

$$S_{z_0}(z) = \left| \int_{z_0}^z dz' w(z) \right| m \quad p(z) = \sqrt{|w(z)|}.$$

avec les formules de connexions

$$A = \frac{B' \pi}{\sqrt{3}}, \quad B = \frac{B' \pi}{\sqrt{3}}.$$

Revenons aux variables originales. On aura

$$S_{z_0} = \left| \int_{r_0}^r dr' p(r') \right| = z_{r_0}$$

avec

$$p(r) = \sqrt{2(E - V_l(r))}, \quad \text{où} \quad V_l(r) = U(r) + \frac{L^2}{2r^2}$$

et le moment angulaire effectif $L = \epsilon(l + \frac{1}{2})$.

$p(r)$ est l'impulsion radiale classique et si L est le moment angulaire, la solution est donc

$$\begin{aligned} 0 < r < r_0 : \quad f(r) &= \sqrt{\frac{z_{r_0}(r)}{p(r)}} B' K_{\frac{1}{3}}(z_{r_0}) \\ r > r_0 : \quad f(r) &= \sqrt{\frac{z_{r_0}(r)}{p(r)}} \frac{B' \pi}{\sqrt{3}} \left[J_{\frac{1}{3}}(z_{r_0}) + J_{-\frac{1}{3}}(z_{r_0}) \right] \end{aligned}$$

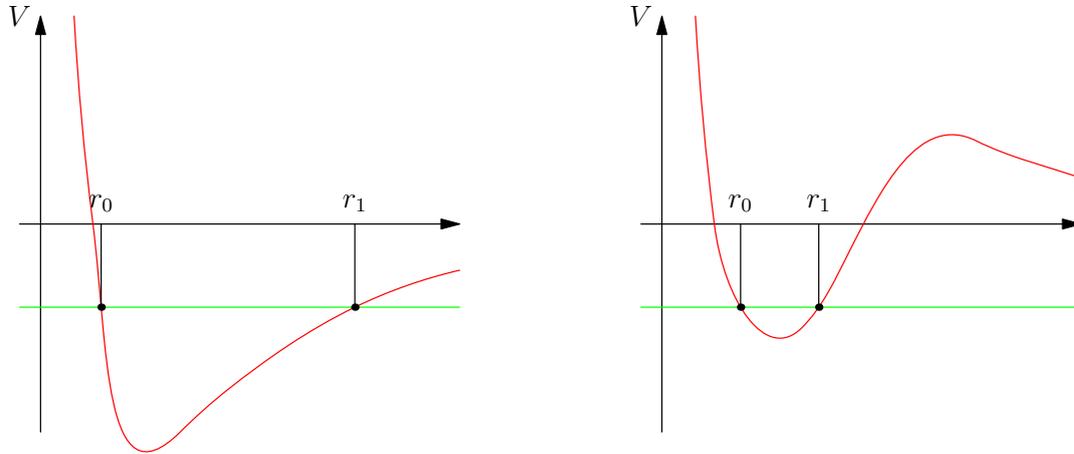
Ce sont les formules que l'on aurait obtenues sur le demi-axe, si l'on ne se souciait pas du problème de la singularité en $r = 0$, mais à la différence importante près que L^2 , au lieu d'être donné par $\epsilon^2 l(l + 1)$, est à remplacé par $\epsilon^2(l + \frac{1}{2})^2$.

On déduit alors une règle

Règle Travailler sur le demi-axe comme sur l'axe complet, mais en remplaçant $l(l + 1)$ par $(l + \frac{1}{2})^2$.

Règles de quantification semi-classiques pour un potentiel central

Considérons le cas de deux points tournants, situés en r_0 et r_1 , avec $r_0 < r_1$.



Alors

$$I_r = 2 \int_{r_0}^{r_1} p(r) dr = 2 \int_{r_0}^{r_1} dr \sqrt{2(E - V_l(r))}$$

où

$$V_l(r) = V(r) + \frac{L^2}{2r^2}, \quad L = \epsilon(l + \frac{1}{2})$$

et I_r est l'action radiale classique. Les niveaux d'énergie sont définis par

$$I_r(E) = 2\pi\epsilon(n + \frac{1}{2}),$$

et en unités physiques, on obtient la règle de Bohr.

$$I_r(E) = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2})$$

Dans le cas particulier de l'atome d'hydrogène

$$V = -\frac{Ze^2}{r}$$

et on prend

$$\hbar^2 = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad V_0 = \frac{me^4}{\hbar^2}, \quad \epsilon = \frac{1}{Z}.$$

Le régime semi-classique correspond à $Z \gg 1$.

L'énergie de Coulomb

$$E = \frac{Z^2}{2(n + l + 1)^2}$$

est exact.

Se pose alors la question de comment généraliser ceci.

Actuellement, le seul cas que l'on sait généraliser est celui où le système classique a un mouvement quasi-périodique. Or ceci est un cas rare.

En général, le mouvement classique est chaotique. D'où la question de savoir comment quantifier un système classiquement chaotique (c'est là un problème non résolu, le chaos quantique).

Un système classique est dit de mouvement *quasi-périodique* s'il est intégrable.

On peut montrer que dans un système à n variables q_i , s'il existe n constantes du mouvement $f_j(q)$, $j = 1, \dots, n$, indépendantes et telles que $\{f_i, f_j\} = 0$, alors il existe des variables canoniques d'angle et d'action (ϕ_i, I_i) qui remplacent (q_i, p_i) telles que l'hamiltonien soit une fonction des actions (impulsions) uniquement

$$H = H(I_1, \dots, I_n).$$

Les équations du mouvement sont alors

$$\begin{cases} \dot{I}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = 0 \\ \dot{\phi}_i = \frac{\partial H}{\partial I_i} = \omega_i(I_1, \dots, I_n). \end{cases}$$

Ainsi les actions sont les constantes du mouvement et

$$\begin{cases} I_i(t) = I_i(0) \\ \phi_i(t) = \omega_i t + \phi_i(0). \end{cases}$$

Les mouvements sont des tores. Une observable au temps t sera

$$\begin{aligned} A(t) &= A(p(t), q(t)) = A(I_1, \dots, I_n, \phi_1(t), \dots, \phi_n(t)) \\ &= A(I_1, \dots, I_n; \omega_1 t + \phi_1^0, \dots, \omega_n t + \phi_n^0) \end{aligned}$$

Une observable est une fonction quasi-périodique de fréquences $(\omega_1, \dots, \omega_n)$. C'est une fonction périodique si les fréquences sont commensurables.

Exemple 2

Comme fonction quasi-périodique, on a les fonctions de la forme

$$f(t) = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} e^{i(n_1 \omega_1 t + n_2 \omega_2 t)}.$$

Si

$$\frac{\omega_1}{\omega_2} = \frac{p}{q}$$

est rationnel, la fonction f est périodique, sinon la fonction est proprement quasi-périodique.

Dans le cas où $H = H(I_1, \dots, I_l)$, les énergies quantiques sont données par

$$E_{n_1, \dots, n_l} = H\left(2\pi\hbar\left(n_1 + \frac{\nu_1}{4}\right), \dots, 2\pi\hbar\left(n_l + \frac{\nu_l}{4}\right)\right)$$

c'est-à-dire en remplaçant les actions classiques dans l'hamiltonien, par leur valeur quantifiées

$$I_j = 2\pi\hbar\left(n_j + \frac{\nu_j}{4}\right), \quad \text{avec } \nu_j = 0, 1, 2, 3 \text{ indice de Maslov.}$$

Notons que les énergies sont labellées par l nombres quantiques. Si le système est non-intégrable, il n'y a pas de réponse connue.

Exemple 3

Tous les systèmes séparables sont intégrables

1. Tous les problèmes à potentiel central.
2. L'oscillateur harmonique à N -dimensions (couplés).
3. Problèmes à 3 corps (2 fixes et 1 mobile) interaction en $\frac{1}{r}$.

4. Modèle de Calogero $J = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i \neq j} \frac{g}{|x_i - x_j|^2}$

Systèmes non-intégrables

1. L'atome d'hélium $H = \sum_{i=1}^2 \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{2}{|r_i|} \right) + \frac{1}{|r_1 - r_2|}$

2. L'atome d'hydrogène dans un champ magnétique B . L'hamiltonien est

$$H = \frac{1}{2}(\vec{p} - \vec{A})^2 - \frac{1}{r},$$

avec $\vec{A} = (-\frac{B}{2}y, \frac{B}{2}x, 0)$, ce qui donne

$$H = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r} + \frac{B}{2}L_z + \frac{1}{2}\left(\frac{B}{2}\right)^2(x^2 + y^2).$$

Si l'on néglige le dernier terme, on peut diagonaliser l'hamiltonien. Le terme de Zeeman $\frac{B}{2}L_z$ commute avec l'hamiltonien non perturbé.

Le dernier terme (diamagnétique) peut être traité en perturbation, tant que

$$\int (x^2 + y^2)|\psi_{nlm}|^2 d^3r$$

est petit. Or $\langle x^2 + y^2 \rangle_{nlm}$ est petit pour les énergies proches du fondamental ($B \ll 10^4$ Gauss, soit $n \ll 5$).

Plus récemment, on a pu exciter l'atome dans des états avec $n \approx 10 - 25$, d'énergie très proches du seuil d'ionisation. Dans ces circonstances, $\langle x^2 + y^2 \rangle$ est grand et l'effet du terme diamagnétique aussi. La théorie de perturbation ne fonctionne plus.

En fait, les niveaux étant très rapprochés, on est très proches de la limite semi-classique.

Or classiquement, à ces énergies, les orbites vont très loin du noyau et sont chaotiques pour la plupart (chaos quantique). Il y a des expériences et surtout des solutions numériques.

1.9 Exercices

1. Résoudre l'équation de Hamilton-Jacobi dans le cas d'une particule libre à 1 dimension.
2. Idem pour le cas d'une particule libre en n dimensions.
3. Idem pour l'oscillateur harmonique en 1 dimension.
4. Idem pour un potentiel central $V = V(r)$, où $r = |\vec{r}|$ (utiliser les coordonnées sphériques).
5. Idem pour un potentiel de Coulomb avec un champ électrique $V(r) = \frac{a}{r} + bz$ en 3 dimensions (utiliser les coordonnées paraboliques (ξ, η, ϕ) définies à partir des coordonnées cylindriques par

$$\begin{cases} \rho & = \sqrt{\xi\eta}, \quad (\xi, \eta > 0) \\ z & = \frac{1}{2}(\xi - \eta) \end{cases}$$

L'énergie cinétique en coordonnées cylindriques est donnée par

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{\rho}^2 + \rho^2\dot{\phi}^2 + \dot{z}^2).$$

6. Par le principe de Fermat, établir la loi de Snell-Descartes.
7. Considérer l'oscillateur harmonique

$$H = \frac{p^2}{2m} + m\omega^2 q^2.$$

Calculer le propagateur $U(x, t|x_0, t_0) = \langle x|e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|x_0\rangle$, avec la condition initiale $U(x, 0|x_0, 0) = \delta(x - x_0)$, et exprimer le résultat en termes classiques.

(Considérer le propagateur dans la représentation p

$$U(x, t|x_0, 0) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{i\frac{px}{\hbar}} a(p, t)$$

et pour a faire un Ansatz semi-classique).

8. Dériver l'équation de la trajectoire d'un rayon lumineux à l'aide du principe de Fermat (équivalent des équations d'Euler-Lagrange).

9. **oscillateur harmonique**

(a) Calculer les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique par WKB.

(b) idem pour l'oscillateur anharmonique $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \lambda x^4$ à grande énergie, à l'aide de la formule semi-classique.

10. **Mur et champ électrique** Soit le potentiel $V(x) = gx$ pour $x > 0$ et $V(x) = \infty$ sinon. Calculer les niveaux d'énergie par WKB.

11. **Double puits** Soit un potentiel $V(x) = V(-x)$ pair possédant deux minima en $\pm c$ de profondeur V_0 . On peut se ramener, par symétrie, à l'équation de Schrödinger sur le demi-axe positif, avec les conditions aux limites $\psi'(0) = 0$ ou $\psi(0) = 0$ suivant que ψ est paire ou impaire respectivement.

L'état fondamental ψ_0 est pair (car l'hamiltonien est pair et il commute avec l'opérateur parité).

Le premier état excité est alors impaire (car il doit posséder un zéro et que ψ est soit paire, soit impaire).

(a) Calculer E_0 en limite semi-classique.

(b) Montrer l'égalité

$$E_1 - E_0 = 2\hbar\omega(I)e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^a p(q) dq}$$

avec $p(q) = \sqrt{2m|V(q) - E_0|}$ et où $\omega(I)$ est la fréquence du mouvement classique entre les points tournants (a, b) (quand $E_0 \simeq V_0$, alors $\omega \simeq \sqrt{V'''(c)}$).

(Indications :

(a) Écrire les fonctions d'onde dans les différentes régions $I = (0, a)$, $II = (a, b)$, $III = (b, \infty)$)

(b) Déterminer les coefficients dans la région I en fonction des coefficients dans III .

(c) Imposer les conditions aux limites et utiliser le fait que \hbar est petit.

(d) Passer des actions aux énergies.

)

Chapitre 2

Le théorème adiabatique

2.1 Introduction

On rencontre assez souvent des situations dans lesquelles l'hamiltonien d'un système dépend du temps $H(\frac{t}{T})$, avec T un temps caractéristique et l'échelle de variation.

Cette dépendance du temps peut provenir du fait que l'hamiltonien dépend de certains degrés de liberté couplés à d'autres représentés par des paramètres dans l'hamiltonien $(R_1(\frac{t}{T}), \dots, R_k(\frac{t}{T}))$ et souvent ces autres degrés de liberté varient lentement. C'est ce que l'on appelle une variation adiabatique des paramètres ($T \gg 1$).

Exemple 1

Des particules légères (électrons) en interaction avec des particules lourdes (noyaux) sont un exemple de système adiabatique, dans lequel les positions des noyaux $R_i(\frac{t}{T})$ jouent le rôle des paramètres qui varient lentement.

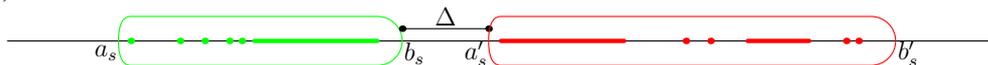
Soit $s = \frac{t}{T}$ et $\epsilon = \frac{1}{T} \ll 1$, sans dimension. L'équation de Schrödinger pour l'opérateur d'évolution U s'écrit

$$i\epsilon \frac{d}{ds} U(s) = H(s)U(s)$$

avec $U(0) = 1$. Il s'agit de décrire les solutions de cette équation pour ϵ petit. On va construire une bonne approximation de U , pour $\epsilon \ll 1$, sous certaines hypothèses sur $H(t)$ (très faibles, mais importantes).

Pour un temps s fixé, l'hamiltonien $H(s)$ a un spectre $\sigma(s)$ de valeurs propres et de continu.

Supposons que l'on puisse le décomposer en deux (ou plusieurs) parties disjointes et supposons que le spectre $(a_s, b_s) \cap (a'_s, b'_s)$ soit toujours vide, lorsque s varie (on dit que la distance Δ , le gap, est toujours non nulle) avec $0 \leq s \leq 1$.



Il existe toujours des gaps entre cette partie du spectre et le reste. Le cas le plus fréquemment discuté est celui où il n'y a que des valeurs propres $e_1(s) \leq \dots \leq e_k(s)$.

Si l'on s'intéresse à un groupe de valeurs propres (e_1, \dots, e_j) , l'hypothèse essentielle est que ces valeurs propres ne vont jamais en croiser d'autres lorsque s varie.

À ces valeurs propres est associé un projecteur $P(s) = \sum_{k=1}^j |e_k\rangle \langle e_k|$. On peut associer, plus généralement, un projecteur à une région du spectre. Rappelons que $P^2 = P = P^\dagger$.

Si l'on part d'un état ψ_0 , dont l'énergie est initialement dans l'intervalle $]a_0, b_0[$, on peut prouver que si la variation de $H(t)$ est lente, au temps t , l'énergie sera dans $]a_t, b_t[$ avec une grande probabilité.

Donc, si ψ_0 est dans le sous-espace déterminé par $P(0)$, i. e. $P(0)\psi_0 = \psi_0$, alors ψ_t sera tel que $P(t)\psi_t \simeq \psi_t$ où

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (\phi, \psi_t) = 0, \quad \text{si } \phi = (1 - P(t))\psi.$$

2.2 Théorème adiabatique (Born,Fock)

Théorème 2.1 (théorème adiabatique)

Si $H(t) \in C^2$, il existe un opérateur d'évolution adiabatique V_t tel que

1. $U_t = V_t(1 + o(\epsilon t))$
2. V_t jouit de la propriété $V_t P(0) = P(t)V_t$. Donc, si $P(0)\psi_0 = \psi_0$, alors $\psi_t = V_t\psi_0 \Rightarrow P(t)\psi_t = \psi_t$.
3. V_t est solution de l'équation

$$i\epsilon \frac{dV}{dt} = \left(H + i\epsilon[\dot{P}, P] \right) V, \quad \text{avec } V_0 = 1.$$

Remarque 1

Les points 1 et 2 disent bien que

$$\begin{aligned} \psi_0 &= P(0)\psi_0 \\ U_t\psi_0 &= V_t P(0)\psi_0 + o(\epsilon t) = P(t)V_t\psi_0 + o(\epsilon t) \end{aligned}$$

donc si

$$\phi = (1 - P(t))\psi$$

alors

$$|(\phi, U_t\psi_0)|^2 = o(\epsilon^2 t^2).$$

La probabilité de transition hors du sous-espace $P(t)$ est petite. Si $H(t)$ est analytique, on peut montrer que cette probabilité de transition est de l'ordre

$$|(\phi, U_t\psi_0)|^2 \leq \text{cste} \cdot e^{-\frac{\Delta}{\epsilon}}$$

et est extrêmement petite, où Δ est le gap.

Exemple 2 (simple)

Un spin $\frac{1}{2}$ (ou un quelconque système à 2 niveaux) dans un champs magnétique dépendant du temps. En utilisant les matrices de Pauli $\vec{\sigma}$, l'hamiltonien s'écrit

$$H(t) = \vec{B}(t) \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} B_3 & B_1 - iB_2 \\ B_1 + iB_2 & -B_3 \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres sont $\pm |\vec{B}(t)|$. La condition de gap (non croisement des valeurs propres) est que $B(t) \neq 0$ pour tout temps t .

Rappel Le condition 2 dit que

$$P(t) = V_t P(0) V_t^{-1}$$

donc

$$\dot{P} = \dot{V} V^{-1} P + P \dot{V} V^{-1} = [\dot{V} V^{-1}, P]$$

mais

$$\dot{P} = [[\dot{P}, P], P]$$

car $P\dot{P}P = 0$. En effet $P^2 = P$ donc $\dot{P} = P\dot{P} + \dot{P}P$ et

$$\dot{P}P = P\dot{P}P + \dot{P}P^2.$$

On obtient ainsi l'équation

$$[\dot{V} V^{-1} - [\dot{P}, P], P] = 0.$$

Donc, si

$$\dot{V} V^{-1} = \frac{1}{i\epsilon} H + [\dot{P}, P]$$

l'équation est satisfaite, car $[H, P] = 0$.

Voyons pourquoi l'équation (3) est plus simple que l'équation de Schrödinger initiale. Supposons que $P(t)$ soit un projecteur à 1 dimension correspondant à la valeur propre λ_t de H_t

$$H_t \psi_t = \lambda_t \psi_t, \quad P_t = |\psi_t\rangle \langle \psi_t|.$$

On cherche les vecteurs et valeurs propres en considérant le temps comme un paramètre.

Le théorème adiabatique dit que si on est en ψ_0 , alors au temps t on sera en ψ_t , avec une erreur d'autant plus petite que H_t dépend doucement de t (H_t analytique). λ_t n'est jamais dégénérée. On peut fixer la phase de ψ_0 , mais ensuite la phase de ψ_t est, elle, déterminée par la phase de ψ_0 (c'est l'invariance de jauge).

Soit

$$\psi_t = V_t \psi_0, \quad \psi_0 = P_0 \psi_0.$$

En vertu de (2) $\psi_t = P_t \psi_t$, alors

$$i\epsilon \dot{\psi} = (H + i\epsilon[\dot{P}, P])P\psi$$

soit

$$i\epsilon \dot{\psi} = \lambda_t \psi_t + i\epsilon \dot{P} \psi$$

car $P\dot{P}P = 0$. Ainsi

$$\psi_t = e^{\frac{1}{i\epsilon} \int_0^t \lambda_s ds} \phi_t$$

avec $\dot{\phi} = \dot{P}\phi$ et $\phi_0 = \psi_0$.

On déduit de ces dernières relations

$$(\phi, \dot{\phi}) = (\phi, \dot{P}\phi) = (P\phi, \dot{P}P\phi) = (\phi, P\dot{P}P\phi) = 0.$$

soit

$$(\phi, \dot{\phi}) = 0. \quad (*)$$

ϕ_t est donc un vecteur propre de H_t correspondant à la valeur propre λ_t , dont la phase est fixée par la relation (*).

Donc ϕ_t a une phase fixée et l'effet du système adiabatique se reflète dans le facteur de phase devant ϕ_t et nommé *phase dynamique*.

Si l'on avait un spectre discret avec des valeurs propres qui ne se croisent jamais $\lambda_j(t)$, on aurait initialement

$$\psi_0 = \sum_j a_j \phi_j(0), \quad H\phi_j(0) = \lambda_j \phi_j(0).$$

et au temps t

$$\psi_t = \sum_j a_j e^{i \int_0^t \lambda_j(s) ds} \phi_j(s) + o(\epsilon t)$$

avec $(\dot{\phi}_j, \phi_j) = 0$.

2.3 La phase géométrique (ou phase de Berry)

Supposons que l'hamiltonien dépende du temps par l'intermédiaire de paramètres $m(t) = (m_1(t), \dots, m_k(t))$. Supposons de plus que l'on parte d'un état propre $\psi(0)$ de valeur propre $\lambda(0)$ et qu'au temps $t = 1$, les paramètres aient repris leur valeur initiale (on a à faire à un cycle! $H(1) = H_0$).

Si l'évolution est adiabatique, le théorème dit qu'au temps $t = 1$ le système doit être dans le sous-espace correspondant à la valeur propre $\lambda(1) = \lambda_0$. Donc

$$\psi_1 = e^{i\delta_c} \psi_0$$

où δ_c est la *phase géométrique*.

Calcul de la phase Comme $\psi_1 = \phi_1$ et $\psi_0 = \phi_0$ et $(\phi_1, \phi_0) = e^{i\beta}$, soit f_t un vecteur propre de H_t

$$H_t f_t = \lambda_t f_t, \quad (f_t, f_t) = 1.$$

On cherche ϕ_t tel que $H_t \phi_t = \lambda_t \phi_t$ avec $(\phi, \dot{\phi}) = 0$.

Posons $\phi_t = e^{i\delta(t)} f_t$, alors

$$\dot{\phi} = i\dot{\delta}\phi + e^{i\delta}\dot{f}$$

et

$$(\phi, \dot{\phi}) = i\dot{\delta}(\phi, \phi) + (f, \dot{f}) = i\dot{\delta} + (f, \dot{f}) = 0$$

où l'on a utilisé $(\phi, \phi) = (f, f) = 1$. Ainsi

$$\dot{\delta} = \frac{1}{i}(f, \dot{f}) \Rightarrow \delta(t) = \frac{1}{i} \int_0^t (f_s, \dot{f}_s) ds.$$

En écrivant

$$f(t) = f(\vec{m}(t)), \quad \vec{m} = (m_1, \dots, m_k)$$

alors

$$\dot{f} = \dot{\vec{m}} \nabla_m f$$

donc

$$(f, \dot{f}) = \dot{\vec{m}}(f, \nabla_m f).$$

Soit $\vec{A} = \frac{1}{i}(f, \nabla_m f)$, alors \vec{A} est réel, car

$$(f, \nabla_m f) = -(\nabla_m f, f) = -(f, \nabla_m f)^*.$$

Soit γ le chemin suivi au cours du cycle dans l'espace des paramètres.

On a

$$\delta(1) = \int_0^1 \frac{1}{i}(f, \dot{f}) ds = \int_0^1 ds \dot{\vec{m}}(s) \cdot \vec{A} = \oint_{\gamma} d\vec{m} \cdot \vec{A} = \int_{\Sigma(\gamma)} d\vec{\sigma} \cdot \text{rot} \vec{A}$$

par le théorème de Stokes. La phase de f choisie n'intervient pas dans δ (un exemple de l'invariance de jauge).

Si $g = e^{i\chi} f$, on a

$$\nabla_m d = i\nabla_m \chi g + e^{i\chi} \nabla_m f$$

et

$$\begin{aligned} (g, \nabla_m g) &= i\nabla_m \chi (g, g) + (f, \nabla_m f) \\ &= i\nabla_m \chi + (f, \nabla_m f) \end{aligned}$$

Définissons le nouveau potentiel $\vec{A}' = \nabla_m \chi + \vec{A} = \frac{1}{i}(g, \nabla_m g)$, le rotationnel fait disparaître $\nabla_m \chi$.

La phase géométrique $\delta(\gamma)$ ne dépend pas de la vitesse avec laquelle les paramètres ont varié. Si l'hamiltonien est réel (pas de champs magnétique en général et pas de spin), on peut prendre des fonctions propres réelles. Il ne peut y avoir alors qu'un changement de signe

$$\delta(\gamma) = \begin{cases} 0 \\ \text{ou} \\ \pi \end{cases}$$

Si l'hamiltonien est complexe (comme en présence d'un champ magnétique) la phase peut ne pas être nulle.

Exemple 3

Prenons le cas du spin $\frac{1}{2}$ dans un champ magnétique (ou un quelconque système à deux niveaux)

$$H = \vec{h}(t) \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} h_3 & h_1 - ih_2 \\ h_1 + ih_2 & -h_3 \end{pmatrix}$$

où $\vec{\sigma}$ sont les matrices de Pauli et \vec{h} est un champs magnétique (les paramètres).

Si $h_2 = 0$, alors $H(t)$ est réel, mais si $h_2 \neq 0$, alors $H(t)$ est complexe. Les valeurs propres sont

$$\pm |\vec{h}(t)| = \pm \sqrt{h_1^2 + h_2^2 + h_3^2}.$$

Le théorème adiabatique est valable si $|\vec{h}| \neq 0$, pour $t \in [0, 1]$.

Les vecteurs propres normés sont

$$f_{\pm} = \begin{pmatrix} \pm \sqrt{|\vec{h}| \pm h_3} \\ \frac{h_1 + ih_2}{\sqrt{2|\vec{h}|(|\vec{h}| \pm h_3)}} \end{pmatrix}$$

Si $\frac{\vec{h}}{|\vec{h}|} = (\sin(\theta) \cos(\phi), \sin(\theta) \sin(\phi), \cos(\theta))$, alors

$$\delta = \frac{1}{2} \oint_{\gamma} d\gamma (1 \mp \cos(\theta))$$

et par Stokes

$$\delta = \pm \frac{1}{2} \int_{\Sigma(\gamma)} d\theta \sin(\theta) d\phi = \pm \frac{1}{2} \Omega(\gamma)$$

que l'on nomme la *phase de Berry*.

$\Omega(\gamma)$ est l'angle solide sous lequel on voit le chemin sur la sphère unité.

C'est un effet mesuré dans beaucoup de systèmes. Une des conséquences les plus subtiles a été mesurée dans des molécules. L'effet de cette phase est, en gros, de faire passer des spins entiers à demi-entier et inversement.

2.4 Dégénérescence des niveaux en fonction de paramètres

Sauf accident, les niveaux sont non dégénérés. Intuitivement, on penserait qu'il suffit de varier un paramètre pour créer une dégénérescence, mais c'est faux.

Si E_1 et E_2 sont des valeurs propres qui, pour certaines valeurs des paramètres, dégèrent $E_1^0 = E_2^0$, on peut se restreindre au sous-espace de dimension 2, correspondant aux vecteurs propres ψ_1 et ψ_2 . Dans ce sous-espace, l'hamiltonien est une matrice 2×2 . La matrice 2×2 autoadjointe la plus générale s'écrit

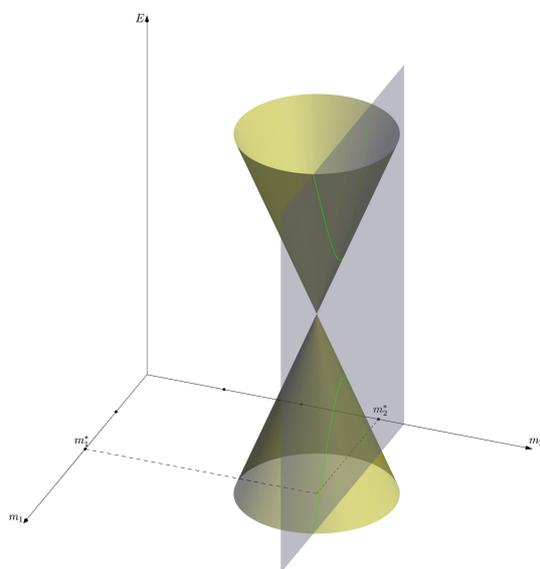
$$H = \vec{h} \cdot \vec{\sigma} + a 1_{2 \times 2}$$

de valeurs propres $a \pm |\vec{h}| = a \pm \sqrt{h_1^2 + h_2^2 + h_3^2}$.

Il y a deux cas possibles

1. L'hamiltonien original est réel (pas de champ magnétique), alors H est réel et donc $h_2 = 0$. H dépend de 2 paramètres (h_1, h_3) . Pour que la dégénérescence ait lieu, il faut varier les deux paramètres pour que $h_1 = h_3 = 0$. h_1 et h_3 dépendent des paramètres du problème initial \vec{m} . Pour que $h_1(\vec{m}) = h_3(\vec{m}) = 0$, il faut au moins $\vec{m} \in \mathbb{R}^2$.
2. Dans le cas d'un hamiltonien complexe, il faut varier 3 paramètres pour que $h_1 = h_2 = h_3 = 0$ (c'est le théorème de Wigner-Von Neumann).

Exemple 4 (à deux paramètres)



Prenons E défini par

$$E \simeq E_0 \pm \sqrt{(m_1 - m_1^*)^2 + (m_2 - m_2^*)^2}$$

E est un cône à deux nappes dans l'espace des paramètres (m_1, m_2) avec l'axe centré en $C = (m_1^*, m_2^*)$. En fixant un paramètre m_2 et en faisant varier l'autre, on obtient généralement deux branches d'hyperbole.

Soit $\psi(\vec{m})$ la fonction propre associée. On a vu que lorsque les paramètres tournaient autour du point C correspondant à $h_1 = h_3 = 0$

$$\psi = e^{i\delta} \psi, \quad \delta = \delta_{\text{boucle}} = \pi,$$

et donc $\psi \rightarrow -\psi$.

En chimie physique, les paramètres naturels sont les coordonnées des noyaux de certains atomes (\vec{R}).

Si \vec{r} sont les coordonnées des électrons, la fonction d'onde de la molécule est alors décrite par l'approximation adiabatique

$$\psi(\vec{r}, \vec{R}) \simeq \chi(\vec{R}) \phi(\vec{R}, \vec{r})$$

où $\chi(\vec{R})$ est la fonction d'onde des noyaux et $\phi(\vec{R}, \vec{r})$ est la fonction d'onde des électrons calculée en considérant les noyaux figés en \vec{R} .

S'il existe un \vec{R}^* pour lequel l'énergie électronique est dégénérée, alors si \vec{R} tourne autour de \vec{R}^* , la fonction d'onde $\phi(\vec{R}, \vec{r})$ va changer de signe. Mais $\psi(\vec{R}, \vec{r})$, étant univaluée, ne doit pas changer de signe. Il en découle que $\chi(\vec{R})$ change de signe quand \vec{R} effectue une boucle.

À une fonction d'onde qui change de signe dans une rotation de 2π est associée un moment angulaire (spin) demi-entier.

Exemple 5

Une molécule diatomique n'a qu'un seul paramètre, donc pas dégénérescence.

Une molécule triatomique a deux paramètres, donc une dégénérescence.

Dans le cas d'un triangle équilatéral, il y a des rotations lentes autour de cette configuration (vibrations des atomes).

En première approximation, on a un rotateur qui tourne. On a donc un hamiltonien $H \simeq L^2$, où L est le moment angulaire. Les énergies sont alors proportionnelles à J^2 , $E \simeq J^2$

Du fait du changement de signe, on doit avoir J demi-entier, soit $\left(\frac{1}{2}\right)^2, \left(\frac{3}{2}\right)^2, \dots$, au lieu de $1, 2^2, 3^2, \dots$

On observe effectivement des pics de résonances aux énergies correspondantes à des moments angulaires demi-entiers.

Chapitre 3

Théorie des collisions

3.1 Potentiel central

Le système le plus simple est celui de deux particules de masses m_1 et m_2 qui interagissent par un potentiel $V(|r_1 - r_2|)$.

En utilisant les coordonnées du centre de masse, on se ramène au problème d'une particule de masse m envoyée sur un centre fixe O , avec lequel elle interagit par le potentiel $V(|r|)$.

Comme le potentiel est central, le moment angulaire est conservé ($\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ est conservé) et $\vec{r} \cdot \vec{L} = \vec{p} \cdot \vec{L} = 0$, donc le mouvement est plan, de plan orthogonal à \vec{L} .

Choisissons des axes tels que $\vec{L} = (0, 0, L)$ et $\vec{r} = (r \cos(\phi), r \sin(\phi), 0)$. Le lagrangien est

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - V(r)$$

et

$$p_\phi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = mr^2\dot{\phi} = L$$

$$p_r = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}.$$

L'hamiltonien s'écrit

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(p_r^2 + \frac{L^2}{r^2}) + V(r)$$

Il s'agit d'un problème à une dimension avec un potentiel effectif

$$\bar{V}(r) = V(r) + \frac{L^2}{2mr^2}.$$

C'est un système conservatif, donc l'énergie est conservée

$$\mathcal{H} = E.$$

Les équations du mouvement sont

$$mr^2\dot{\phi} = L$$

$$m\dot{r} = \pm \sqrt{2m(E - \bar{V}(r))}$$

et l'équation de la trajectoire

$$\frac{d\phi}{dr} = \pm \frac{\frac{L^2}{r^2}}{\sqrt{2m(E - \bar{V}(r))}}$$

C'est la *formule de Binet*.

La conservation du moment cinétique L implique

$$\dot{\phi} = \text{cste}$$

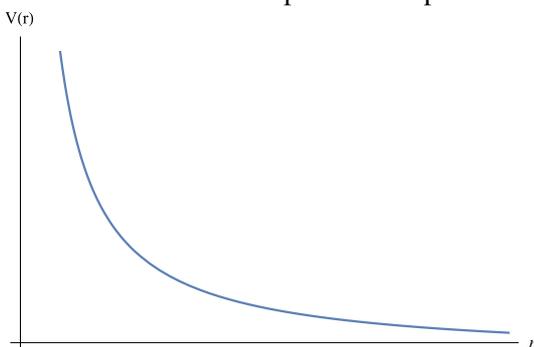
donc ϕ ne change pas de signe.

On distingue deux types de mouvements selon le domaine pour lequel $E > \bar{V}(r)$

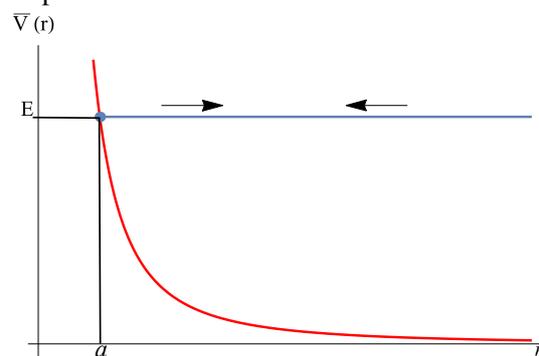
1. r évolue dans un intervalle fini, le système suit un mouvement périodique, c'est un état lié.
2. $r \in [a, +\infty[$, le mouvement évolue dans une région infinie de l'espace, c'est un état de diffusion.

Potentiel répulsif Un potentiel répulsif est un potentiel décroissant, sans état lié.

Dans le cas d'un potentiel répulsif du type

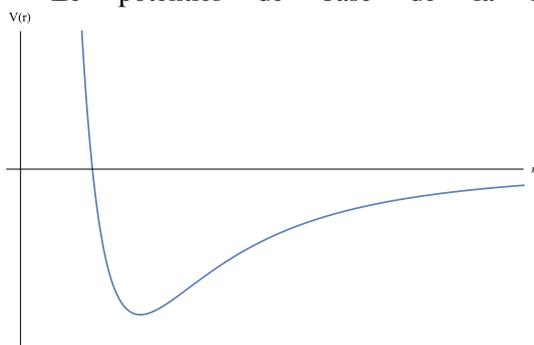


le potentiel effectif devient de la forme

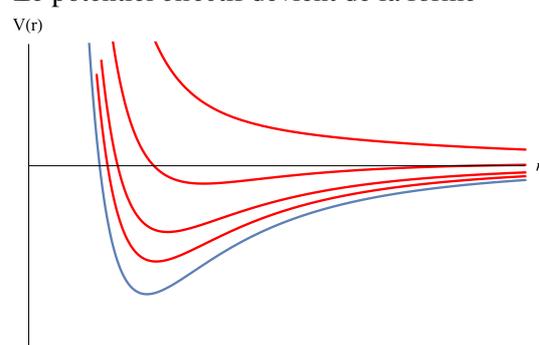


Avec un comportement en $\frac{1}{r^2}$ vers $r \rightarrow 0$. Dans ce cas, une particule arrive de $r \rightarrow \infty$ jusqu'à $r = a$ et repart vers $r \rightarrow \infty$.

Le potentiel de base de la forme



Le potentiel effectif devient de la forme



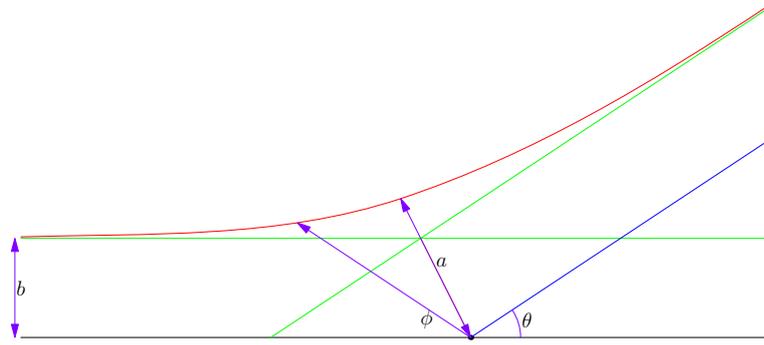
On voit l'effet de la barrière du moment cinétique. La courbe bleue est celle du moment cinétique nul, puis, par ordre croissant, les moment cinétiques croissants.

Pour des énergies $E < 0$, on peut avoir des états liés, sur des régions finies, mais l'orbite n'est pas fermées (sauf dans le cas coulombien).

Pour des énergies $E > 0$, si L est grand, on a seulement des états de diffusion. Si L est petit, on a des états de diffusion et des états liés (en mécanique quantique, à cause de l'effet tunnel, ce ne sont pas des états liés, mais des états métastables).

3.2 Examen détaillé de la collision

On considère le problème dans le plan. Soit b le paramètre d'impact.



A l'infini, $V(r) \rightarrow 0$, donc les particules sont libres et se déplacent le long de droites caractérisées par le paramètre d'impact b (la distance à laquelle arriverait la particule si $V = 0$).

La trajectoire finale est asymptotique et est caractérisée par l'angle θ (angle de diffusion).
Il y a conservation de l'énergie et du moment angulaire

$$P_{-\infty} = P_{+\infty}$$

$$L = bP_{\infty}$$

L'équation de la trajectoire est

$$\frac{d\phi}{dr} = \pm \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E}}}$$

et

$$p_r = \pm \sqrt{2m(E - V)}.$$

Initialement $p_r < 0$, puis à une distance a , $p_r = 0$. L'angle de diffusion est donné par l'expression

$$\theta = \pi - \phi(+\infty) = \pi - 2b \int_a^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E}}}$$

Si $V = 0$, alors $a = b$ et $\theta = 0$, car

$$\int_b^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2}}} = \pi.$$

Remarque 1

La particule peut faire plusieurs fois le tour du centre d'interaction, mais l'angle de diffusion θ ne le mesure pas.

1. Dans le cas où b est grand, $L \rightarrow \infty$, $a \rightarrow b$ et

$$\theta \rightarrow 0 \begin{cases} +0 & \text{si } V \text{ répulsif.} \\ -0 & \text{si } V \text{ attractif} \end{cases}$$

2. Dans le cas où b est petit

- V répulsif, alors $V_L \rightarrow V$, $a \rightarrow a(b = 0)$ et $\theta \rightarrow \pi$. On a donc une forte diffusion en arrière.
- V attractif, cela va dépendre de la barrière centrifuge

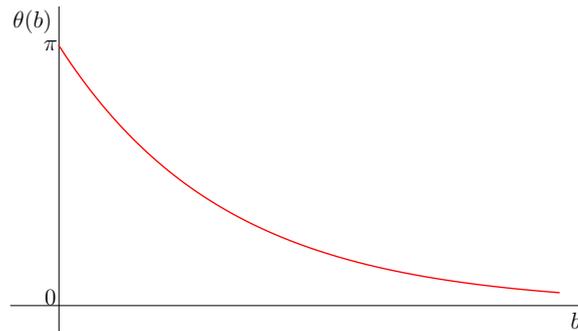
$$r^2 V(r) \rightarrow 0 \begin{cases} \text{si } r \rightarrow 0 \\ \text{si } r \rightarrow \infty \end{cases}$$

et pour $a \rightarrow b$

$$\theta = \pi - 2b \int_b^\infty \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2}}} + o(b)$$

avec $o(b) \simeq 0$.

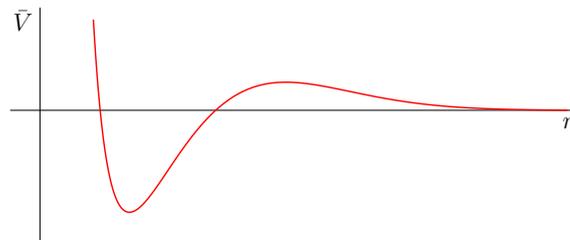
Pour un potentiel répulsif $\theta(b)$ décroît de façon monotone de π à zéro



Pour un potentiel contenant une partie attractive, il y a toujours un minimum (valeur arc-en-ciel). Il existe des singularités correspondant à la capture de la particule. Mathématiquement, elles correspondent à un zéro double b^* de la racine apparaissant dans l'intégrand et

$$\theta \simeq \frac{b - b^*}{b^*}$$

et un potentiel effectif de la forme

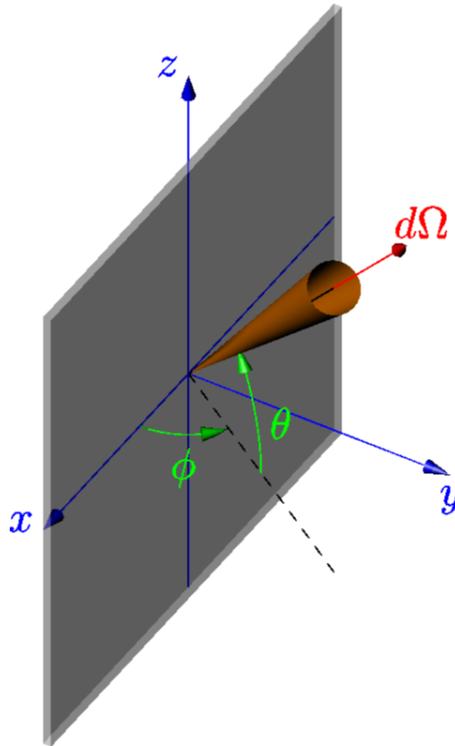


3.3 Section efficace

On est fréquemment confrontés au cas d'une cible bombardée par un faisceau de particules identiques (pas trop dense afin d'éviter les interactions entre les particules du faisceau entre elles).

La cible est formée de N particules dans un volume assez mince afin d'éviter les collisions multiples.

Loin de la cible, on place un détecteur dans la direction $\Omega = (\theta, \phi)$ et couvrant un élément d'angle solide $d\Omega$.



Soit l'angle de diffusion $\Theta (\neq \theta)$

$$\Theta = |\theta| \pmod{\pi}$$

car

$$\cos(\Theta) = \frac{\vec{v}_{-\infty} \cdot \vec{v}_{\infty}}{|\vec{v}_{\infty}|^2}$$

Supposons que le flux de particules incidentes soit J (le nombre de particules par unité de temps traversant une surface unité orthogonale au faisceau). On a alors

$$N(\Omega, d\Omega) = \text{nombre de particules diffusées par la cible dans la direction } \Omega \text{ dans } d\Omega.$$

ainsi

$$N = J\Sigma(\Omega) d\Omega$$

où $\Sigma(\Omega)$ est la *section efficace* de la cible.

Si dans la gamme d'énergie des particules incidentes, on peut négliger les corrélations entre les particules de la cible, chacune diffusera les particules incidentes comme si elle était seule, ainsi

$$\Sigma(\Omega) = N\sigma(\Omega)$$

où $\sigma(\Omega)$ est la section efficace différentielle de la particule cible

Typiquement, les électrons, neutrons thermiques ou rayons X diffusés sur un cristal ou un liquide ne vérifient pas cette dernière hypothèse. On a une interférence due aux interactions entre les particules cibles.

1. La section efficace totale σ_{tot} est la grandeur

$$\sigma_{\text{tot}} = \int \sigma(\Omega) d\Omega.$$

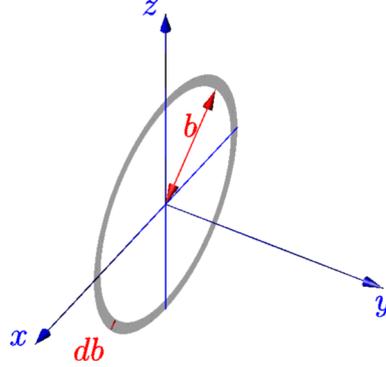
Comme valeurs caractéristiques notons que

atomes : avec une taille atomique de l'ordre de 10^{-9} cm, on a $\sigma_{\text{tot}} \simeq 10^{-18}$ cm².

noyaux : la taille moyenne étant de l'ordre de 10^{-12} cm, on a $\sigma_{\text{tot}} \simeq 10^{-24}$ cm².

Dans le cas de particules élémentaires, l'unité de section efficace utilisée est le millibarn, avec le barn comme unité de section efficace : $1 \text{ b} = 10^{-24} \text{ cm}^2$.

2. Pour le potentiel à symétrie sphérique, à chaque particule incidente est associée un paramètre d'impact qui correspond à un angle de diffusion. Un petit élément de surface annulaire $b db d\phi$, de paramètre d'impact b , va diffuser $dN = Jb db d\phi$ particules par unité de temps dans l'angle solide $d\Omega = \sin(\theta) d\theta d\phi$.



Ainsi

$$\sigma(\Omega) d\Omega = b db d\phi$$

d'où

$$\sigma(\Omega) = \left| \frac{b db}{\sin(\theta) d\theta} \right|.$$

S'il existe plusieurs valeurs possibles $b_j(\theta)$ correspondant à un angle θ donné, on aura

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma(\theta, E) = \sum_j \left| \frac{b_j(\theta)}{\sin(\theta) \frac{d\theta}{db_j}} \right|$$

et

$$\sigma_{\text{tot}}(E) = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta, E) \sin(\theta) d\theta$$

3.4 Diffusion quantique

On se place du point de vue ondulatoire et on cherche le résultat de diffusion de l'onde par un obstacle (la cible) et ceci dans le cas stationnaire.

Au bout d'un certain temps, les particules ont atteint un état stationnaire d'énergie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, qui est l'énergie cinétique des particules incidentes de moment $\hbar k$ (précision infinie)

$$\phi_k(r) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

où ψ_k est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi_k = E \psi_k.$$

Pour des temps $t \rightarrow -\infty$, on devrait avoir des particules libres, décrites par une onde plane $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$.

Pour les temps $t \rightarrow +\infty$, on doit à nouveau avoir des particules libres (ce n'est pas toujours vrai toutefois) avec des fonctions d'onde sphériques sortantes (causalité)

$$f_k(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r}$$

avec $k = |\vec{k}|$ et $\Omega = (\theta, \phi)$ qui donne la direction de la particule sortante.

Remarque 2

Les ondes sphériques sont solutions de l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi.$$

Le problème devrait être décrit par une solution de l'équation de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right]\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi$$

telle que si $|\vec{r}| \gg 1$ ¹

$$\psi_k(r) \simeq e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}$$

Pour un peu mieux justifier l'hypothèse, considérons le flux $\vec{j}(r)$ associé à la fonction ψ

$$\vec{j}_\psi(r) = \left\langle \psi \left| \frac{1}{2m}\vec{p}\delta(\vec{q} - \vec{r}) + \frac{1}{2m}\delta(\vec{q} - \vec{r})\vec{p} \right| \psi \right\rangle$$

On trouve alors

$$\vec{j}_\psi(r) = \frac{\hbar}{m}\Re(\psi^*(r)\nabla\psi(r)).$$

Pour l'onde plane incidente

$$\vec{j}_\psi^{\text{inc}}(r) = \frac{\hbar\vec{k}}{m}.$$

Le flux sortant correspondant à une onde sphérique sortante

$$j_r^{\text{sph}} = \frac{\hbar\vec{k}}{m} \frac{1}{r^2} |f_k(\Omega)|^2$$

et

$$j_{\theta,\phi}^{\text{sph}} = o(r^{-3}).$$

À grande distance, le flux est essentiellement radial. \vec{j}^{sph} correspondant à des particules de densité $|f_k(\Omega)|^2/r^2$ sortant dans la direction $\vec{\Omega}$ avec une vitesse $\frac{\hbar\vec{k}}{m}\vec{\Omega}$.

Section efficace $\sigma(\Omega)$ On définit

$$\sigma(\Omega) d\Omega = \frac{\text{flux diffusé dans la direction } \vec{\Omega} \cdot \text{surface du détecteur dans } d\Omega}{\text{flux incident} \cdot \text{surface unité orthogonale au faisceau incident}}$$

On a ainsi

$$\sigma(\Omega) d\Omega = \frac{\frac{\hbar k}{m} \frac{f_k(\Omega)}{r^2} r^2 d\Omega}{\frac{\hbar k}{m}} = |f_k(\Omega)|^2 d\Omega.$$

On obtient donc, malgré un raisonnement rigoureusement incorrect, un résultat correct sous certaines conditions

$$\sigma(\Omega) = |f_k(\Omega)|^2$$

où $f_k(\Omega)$ est l'amplitude de diffusion (on trouvera un traitement correct dans Messiah).

1. Noter que $\psi \notin L^2$, n'est pas de carré sommable.

3.5 Équation intégrale pour la diffusion

On veut transformer l'équation de Schrödinger (équation aux dérivées partielles)

$$[-\Delta + U(r)]\psi(r) = k^2\psi(r), \quad U(r) = \frac{2m}{\hbar}V(r)$$

avec conditions aux limites quand $r \rightarrow \infty$ (avec $\vec{k} \parallel Oz$)

$$\psi(r) \rightarrow e^{ikz} + f_k(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

par une équation intégrale. Formellement

$$(k^2 + \Delta)\psi = U\psi$$

on essaie

$$\psi = \psi_0 + (k^2 + \Delta)^{-1}U\psi$$

avec $(k^2 + \Delta)\psi_0 = 0$.

En notation de Dirac

$$\langle r|\psi\rangle = \langle r|\psi_0\rangle + \int \langle r|(k^2 + \Delta)^{-1}|r'\rangle \langle r'|U|r''\rangle \langle r''|\psi\rangle dr' dr''$$

soit

$$\psi(r) = \psi_0(r) + \int dr' G(r|r')U(r')\psi(r')$$

où $\langle r'|U|r''\rangle = \delta(r' - r'')U(r')$ avec la fonction de Green

$$G(r|r') = \langle r|(k^2 + \Delta)^{-1}|r'\rangle$$

Formellement

$$\int dr (k^2 + \Delta) \langle r''|r\rangle G(r|r') = \langle r''|r'\rangle = \delta(r'' - r')$$

L'équation différentielle de la fonction de Green

$$(k^2 + \Delta_{r''})G(r''|r') = \delta(r'' - r').$$

Soit $G_z^0 = (z + \Delta)^{-1}$ la résolvante de $-\Delta$, $z \in \mathbb{C}$. On a

$$G_z^0 = (z - (-\Delta))^{-1}.$$

L'opérateur $-\Delta$ a un spectre continu dans $[0, \infty[$.

Exemple 1

$$-\Delta\varphi = \lambda\varphi$$

En transformée de Fourier

$$k^2\hat{\varphi}(k) = \lambda\hat{\varphi}(k)$$

pour $\hat{\varphi}(k) \neq 0 : \lambda = k^2, \lambda \in [0, \infty[$.

Donc G_z^0 sera défini pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_+$.

Exemple 2

Soit une matrice A , $(z - A)^{-1}$ est bien défini si z n'est pas une valeur propre de A ($z \notin \text{Sp}(A)$).

Ainsi

$$G_z^0(r|r') = \langle r | (z + \Delta)^{-1} | r' \rangle$$

sera bien défini si $z = k^2 + i\epsilon$, pour tout $\epsilon \in \mathbb{R}^*$ et $G_z^0(r|r')$ est solution de l'équation

$$(\Delta_r + z)G_z^0(r|r') = \delta(r - r').$$

Calculons $G_z^0(r|r')$ par transformée de Fourier

$$G_z^0(r|r') = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{i\vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \hat{G}_z^0(p)$$

d'où

$$(z - p^2)\hat{G}_z^0(p) = 1$$

et

$$\hat{G}_z^0(p) = \frac{1}{z - p^2}.$$

Ainsi

$$G_z^0(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{z - p^2} d^3 p.$$

On peut calculer

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} G_{k^2 \pm i\epsilon}^0(\vec{r}|\vec{r}') = G_{\pm}^0(\vec{r} - \vec{r}').$$

On trouve

$$G_{\pm}^0(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik \cdot \vec{r}}}{r}.$$

On peut alors vérifier que $(k^2 + \Delta)G_{\pm}^0(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$.

On cherchera donc à remplacer l'équation de Schrödinger par l'équation intégrale

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} + \int G_{+}^0(\vec{r} - \vec{r}') U(r') \psi(\vec{r}') dr'$$

Lorsque $r \rightarrow \infty$

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = (r^2 + r'^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r}')^{\frac{1}{2}} = r \left[1 - 2 \frac{\vec{\Omega} \cdot \vec{r}'}{r} + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 \right] \simeq r - \vec{\Omega} \cdot \vec{r}' + O\left[\left(\frac{r'}{r}\right)^2\right]$$

et donc

$$G_{\pm}^0(\vec{r} - \vec{r}') \simeq -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{r - \vec{\Omega} \cdot \vec{r}'} e^{\pm ik(r - \vec{\Omega} \cdot \vec{r}')} = -\frac{1}{4\pi r} e^{\pm ikr} \left[1 + \frac{\vec{\Omega} \cdot \vec{r}'}{r} + O\left(\frac{r'}{r}\right)^2 \right] e^{\pm i\vec{\Omega} \cdot \vec{r}' k}$$

Si l'on prend G_{+}^0 on aura²

$$\psi_{+}(\vec{r}) \simeq e^{ikz} - \frac{1}{4\pi r} e^{ikz} \int dr' U(r') e^{-ik\vec{\Omega} \cdot \vec{r}'} \psi_{+}(\vec{r}').$$

2. si au moins

$$\int dr' U(r') (\vec{\Omega} \cdot \vec{r}') \psi_{+}(\vec{r}') < \infty.$$

Mais $|\psi_+(\vec{r}')| < \text{cste}$ (en général) et ne décroît pas vers zéro à l'infini. Donc il faut que

$$\int r' |U(r')| dr' < \infty$$

c'est à dire que

$$U(r) \rightarrow O(r^{-(3+\epsilon)}), \text{ pour } r \rightarrow \infty.$$

Il faut que le potentiel décroisse assez rapidement à l'infini. En particulier, pour l'interaction coulombienne, cela ne fonctionne pas.

Si le potentiel décroît trop lentement, son influence à l'infini ne sera jamais négligeable. On aura donc jamais des paquets d'ondes libres asymptotiquement.

Donc si $U(r)$ décroît assez vite, l'équation de Schrödinger avec condition aux limites pour la diffusion peut être remplacée par l'équation intégrale

$$\psi_+(\vec{r}) = e^{ikz} + \int G_+^0(\vec{r} - \vec{r}') U(r') \psi_+(\vec{r}') d^3 r' \quad (3.1)$$

avec

$$G_+^0(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi r} e^{ikr} \quad (3.2)$$

De plus, l'amplitude de diffusion est donnée par

$$f(\Omega) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-ik\vec{\Omega}\cdot\vec{r}'} U(r') \psi_+(\vec{r}') d^3 r' \quad (3.3)$$

3.6 Théorie de perturbation

On peut écrire l'équation 3.1 abstraitement sous la forme

$$\psi_+ = \psi_0 + G_+^0 U \psi_+$$

ou en notation de Dirac

$$|\psi_+\rangle = |\psi_0\rangle + G_+^0 U |\psi_+\rangle$$

En effet

$$\langle r | \psi_+\rangle = \langle r | \psi_0\rangle + \langle r | G_+^0 U | \psi_+\rangle$$

avec

$$\begin{aligned} \langle r | G_+^0 U | \psi_+\rangle &= \int dr' \langle r | G_+^0 | r'\rangle \langle r' | U | r''\rangle \langle r'' | \psi_+\rangle dr'' \\ &= \int dr' \langle r | G_+^0 | r'\rangle U(r') \langle r' | \psi_+\rangle \end{aligned}$$

car $\langle r' | U | r''\rangle = \delta(r' - r'') U(r')$.

Par définition

$$\begin{aligned} \langle r | \psi_+\rangle &= \psi_+(r) \\ \langle r | \psi_0\rangle &= \psi_0(r) = e^{ikz} \\ \langle r | G_+^0 | r'\rangle &= G_+^0(r - r') \end{aligned}$$

Soit $K = G_+^0 U$, alors

$$\psi_+ = \psi_0 + K \psi_+$$

que l'on peut écrire

$$\psi_+ = \psi_0 + K(\psi_0 + K\psi_+) = \psi_0 + K\psi_0 + K^2\psi_+$$

soit

$$\psi_+ = \sum_{n=0}^{\infty} K^n \psi_0.$$

C'est la *solution perturbative* donnée par une série géométrique.

Si $K = G_+^0 U$ est petit, dans un certain sens, cette solution est de nature perturbative et les premiers termes suffisent à approximer ψ_+ .

La série converge si $\|K\| < 1$, soit si $\|G_+^0 U\| < 1$.

L'approximation au premier ordre est dite *approximation de Born*.

Avec

$$G_+^0 \simeq \frac{1}{k^2}, \quad U \simeq \lambda \quad \text{la constante de couplage}$$

où k est le nombre d'onde, on a

$$\|G_+^0 U\| \simeq \frac{\lambda}{k^2}.$$

La théorie de perturbation est bonne si U est petit (ce qui est rarement satisfait) ou si k^2 (donc l'énergie) est grande. Au plus bas ordre

$$\psi_+ = \psi_0 + G_+^0 U \psi_0$$

soit

$$\psi_+(r) = e^{ikz} + \int G_+^0(r-r') U(r') e^{ikz'} dr'$$

L'amplitude de diffusion devient

$$f(\Omega) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-ik\vec{\Omega}\cdot\vec{r}'} U(r') \psi_0(r') dr'$$

soit

$$f(\Omega) = -\frac{1}{4\pi} \int dr' e^{-ik\vec{\Omega}\cdot\vec{r}'} U(r') e^{ikz'}$$

Si on note \vec{k} le vecteur d'onde incident et \vec{k}' le vecteur d'onde sortant

$$f(\Omega) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} U(r) dr.$$

Donc, si $f(\Omega) = f(\vec{k}' \leftarrow \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \hat{U}(\vec{k} - \vec{k}')$ et avec

$\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$: transfert d'impulsion lors de la collision

\hat{U} : transformée de Fourier du potentiel

on obtient

$$f(\vec{k}' \leftarrow \vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r$$

C'est l'amplitude de diffusion dans l'approximation de Born.

On a

$$|\vec{q}| = 2|\vec{k}| \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

et

$$\cos(\theta) = \frac{\vec{k} \cdot \vec{k}'}{k^2}.$$

Si le potentiel est central $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$, alors

$$f = f(|\vec{q}|) = f\left(2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)$$

en symétrie sphérique.

Exemple 3 (potentiel de Yukawa)

Soit le potentiel

$$V(r) = \gamma \frac{e^{-\mu r}}{r}.$$

On obtient

$$f(q) = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2 q k^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \mu^2}$$

et

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{\gamma}{4E}\right)^2 \frac{1}{\left[\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \frac{\mu^2 \hbar^2}{8mE}\right]^2}$$

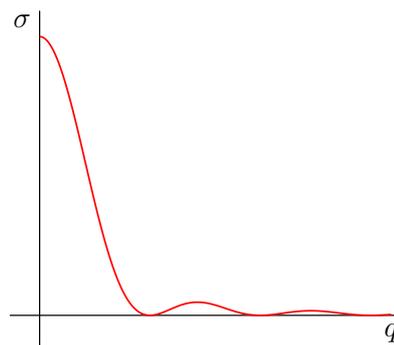
Dans le cas particulier où $\mu = 0$ (cas coulombien) on retrouve la *formule de Rutherford*

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{\gamma}{4E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}.$$

La section efficace totale

$$\sigma_{\text{tot}} = 2\pi \int d\theta \sigma(\theta) \sin(\theta) < \infty, \quad \text{si } \mu > 0.$$

En général, et qualitativement, $f(q)$ sera centrée en $q = 0$. La section efficace aura donc un grand pic en avant, en $\theta = 0$ (et $q = 0$), à grande énergie.



3.7 Ondes classiques

Comme exemple d'onde classique considérons une onde scalaire d'équation d'onde

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi - c^2(r) \Delta \psi = 0,$$

où $c(r)$ est la vitesse de propagation de l'onde dans le milieu au point r .

Considérons le cas où un volume V contient un milieu dans lequel la vitesse de propagation est $c(r)$ dépendante du point r dans le milieu V . Supposons que ce milieu soit immergé dans un milieu dans lequel l'onde se propage à une vitesse uniforme c . On a alors

$$c(r) = \begin{cases} c & \text{si } r \notin V \\ c(r) & \text{si } r \in V. \end{cases}$$

On envoie une onde plane monochromatique $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t}$ avec $\omega = ck$. Cette onde est diffusée par le milieu sous la forme

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\omega t}$$

avec

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\Omega)\frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{r}$$

et

$$\omega^2\psi_{\vec{k}} + c^2(\vec{r})\Delta\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = 0$$

ou encore

$$(k^2 + \Delta)\psi_{\vec{k}}\vec{k} = -\left[\frac{c^2(r)}{c^2} - 1\right]\Delta\psi_{\vec{k}}\vec{k}$$

où $U(r) = \frac{c^2(r)}{c^2} - 1$ joue le rôle de potentiel.

On obtient alors l'équation intégrale

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int_V \frac{e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \left[1 - \frac{c^2(r')}{c^2}\right] \Delta\psi_{\vec{k}}(\vec{r}') dr'$$

L'amplitude de diffusion est alors

$$f(\Omega) = -\frac{1}{4\pi} \int_V e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} \left(1 - \frac{c^2(r')}{c^2}\right) \Delta\psi_{\vec{k}}(\vec{r}') dr'$$

et la section efficace

$$\sigma(\Omega) = |f(\Omega)|^2.$$

À l'approximation de Born

$$f(\Omega) = -\frac{k^2}{4\pi} \int_V e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \left(1 - \frac{c^2(r)}{c^2}\right) dr.$$

Exemple 4

Considérons un volume V sphérique de rayon a .

$$c(r) = c' \quad \text{dans } V$$

$$n = \sqrt{\epsilon} = \frac{c'}{c} \quad \text{l'indice de réfraction}$$

Si $ka \ll 1$ on trouve la *formule de Rayleigh*

$$\sigma(\Omega) = k^4 V^2 \alpha^2$$

où

V est le volume de la sphère

$$\alpha = \frac{1}{4\pi} \frac{\epsilon - 1}{\epsilon}$$

L'approximation de Born est raisonnable car $\epsilon \simeq 1$.

3.8 Potentiel central (à symétrie sphérique)

Soit $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$ un potentiel à symétrie sphérique. Alors V est invariant par rotation.

Si g est une rotation, $\psi(g\vec{r})$ est une solution de l'équation intégrale, si $\psi(\vec{r})$ en est une, avec $g\vec{k} = \vec{k}$, où \vec{k} est le vecteur d'onde incident. À cause de l'unicité $\psi(g\vec{r}) = \psi(\vec{r})$.

En coordonnées sphériques, avec $Oz \parallel \vec{k} = (0, 0, k)$, pour une rotation de α autour de Oz

$$\psi(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi + \alpha), \quad \forall \alpha.$$

donc

$$\psi(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta).$$

L'équation de Schrödinger s'obtient après avoir décomposer ψ en polynômes de Legendre³

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{Y_l(r)}{r} P_l(\cos(\theta))$$

En coordonnées sphériques

$$-\frac{1}{r} \partial_r^2 (r\psi) + \frac{L^2}{r^2} \psi + U(r)\psi = k^2 \psi.$$

Pour que l'opérateur $\frac{1}{r} \partial_r^2 r$ soit autoadjoint, il faut que

$$\left\langle \varphi \left| \frac{1}{r} \partial_r^2 r \psi \right. \right\rangle = \left\langle \frac{1}{r} \partial_r^2 r \varphi \left| \psi \right. \right\rangle$$

c'est-à-dire

$$\int_0^{\infty} \varphi^*(r) \frac{1}{r} (r\psi)'' r^2 dr = \int_0^{\infty} \frac{(r\varphi^*)''}{r} \psi(r) r^2 dr + \left[(r\varphi^*)(r\psi)' - (r\varphi^*)'(r\psi) \right]_0^{\infty}$$

Pour cela il faut que

$$\lim_{r \rightarrow 0} r\psi(r) = 0$$

et $|(r\psi)'(0)| < \infty$, donc il faudra chercher des solutions régulières à l'origine

$$y_l(0) \quad \text{et} \quad |y_l'(0)| < \infty.$$

On a

$$L^2 P_l = l(l+1) P_l$$

avec $\vec{L} = \vec{r} \wedge \frac{1}{i} \nabla$.

3. Le polynôme de Legendre P_l d'ordre l peut s'exprimer par la formule

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l.$$

Ces polynômes forment une base orthonormée des fonctions de carré sommable $L^2([-1, 1])$.

On est ainsi ramenés à l'équation radiale pour les y_l

$$-y_l''(r) + U_l(r)y_l(r) = k^2 y_l(r)$$

avec le potentiel effectif

$$U_l(r) = U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}.$$

On décompose l'onde plane incidente

$$e^{ikr \cos(\theta)} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l(kr) P_l(\cos(\theta))$$

en utilisant la relation d'orthogonalité

$$\int_{-1}^1 P_l(x) P_m(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{lm}.$$

Ainsi

$$\begin{aligned} a_l(kr) &= \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 P_l(x) e^{ikrx} dx \\ &= \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 \frac{d}{dx} \left(\frac{d^{l-1}}{dx^{l-1}} (x^2-1)^l \right) e^{ikrx} dx \\ &= -\frac{ikr}{2^{l!}} \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 \frac{d^{l-1}}{dx^{l-1}} (x^2-1)^l e^{ikrx} dx \\ &= \frac{(-ikr)^l}{2} \frac{2l+1}{2} \frac{1}{l!} \int_{-1}^1 (x^2-1)^l e^{ikrx} dx \end{aligned}$$

En utilisant les *fonctions de Bessel demi-entière*

$$J_{l+\frac{1}{2}}(r) = -\left(\frac{r}{2}\right)^{l+\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{\pi}\Gamma(l+1)} \int_{-1}^1 (1-x^2)^l e^{irx} dx$$

et les *fonctions de Bessel sphériques*

$$j_l(r) = \sqrt{\frac{\pi}{2r}} J_{l+\frac{1}{2}}(r)$$

on obtient

$$e^{ikr \cos(\theta)} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos(\theta)) j_l(kr).$$

Or, l'onde plane est solution de l'équation de Schrödinger libre

$$-\Delta e^{ikz} = k^2 e^{ikz}$$

et en coordonnées sphériques de l'équation radiale

$$-y^{0''} + \frac{l(l+1)}{r^2} y^0 = y^0$$

et y^0 est une solution régulière à l'origine

$$y^0(r) \simeq r^{l+1} \quad \text{pour } r \rightarrow 0.$$

On cherche une solution du type

$$\psi(r, \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikr \cos(\theta)} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

de la forme

$$\psi(r, \theta) = \sum_l P_l(\cos(\theta)) \left[i^l (2l+1) j_l(kr) + i_l(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right]$$

Comportement asymptotique des a_l On a

$$\begin{aligned} a_l(r) &= \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 P_l(x) e^{irx} dx \\ &= \frac{2l+1}{2ir} \int_{-1}^1 \frac{d}{dx} (e^{irx}) P_l(x) dx \\ &= \frac{2l+1}{2ir} \left[P_l(1) e^{ir} - P_l(-1) e^{-ir} \right] + O(r^{-2}) \end{aligned}$$

or

$$P_l(\pm 1) = (\pm 1)^l$$

et donc

$$a_l(r) \simeq \frac{2l+1}{r} e^{i\frac{\pi}{2}l} \sin\left(r - \frac{\pi}{2}l\right).$$

Ceci suggère de considérer les solutions de l'équation radiale qui ont la forme asymptotique suivante

$$y_l(r) \simeq A_l \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l(k)\right)$$

avec $\delta_l(k)$ un déphasage réel.

Lorsque $r \rightarrow \infty$ on a onc

$$\begin{aligned} \psi &\rightarrow \sum_l P_l(\cos(\theta)) \left[a_l(kr) + f_l \frac{e^{ikr}}{r} \right] \\ &\simeq \sum_l P_l(\cos(\theta)) \left[\left(\frac{2l+1}{2ik} + f_l \right) \frac{e^{ikr}}{r} - (-1)^l \frac{e^{-ikr}}{2ikr} (2l+1) \right] \end{aligned}$$

Puisque

$$\frac{y_l(r)}{r} \simeq \frac{A_l}{2kr} \left[e^{i(kr - \pi 2l + \delta_l)} + e^{-i(kr - \pi 2l + \delta_l)} \right]$$

et en identifiant $a_l(kr) + f_l \frac{e^{ikr}}{r}$ avec $\frac{y_l(r)}{r}$ quand $r \rightarrow \infty$, il faut alors

$$f_l = \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin(\delta_l), \quad A_l = \frac{2l+1}{k} e^{i(\delta_l + \frac{\pi}{2}l)}.$$

En résumé, l'amplitude de diffusion sera donnée par

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) P_l(\cos(\theta))$$

ou

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos(\theta))$$

(Haxen & Haltsmark, 1927)

Les déphasages δ_l étant caractérisés par le fait que la solution $y_l(r)$ de l'équation radiale

$$-y_l'' + U_l(r)y_l = k^2 y_l$$

satisfait $y_l(0) = 0$ et

$$y_l(r) \simeq A_l \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l(k)\right).$$

La section efficace s'exprime alors par

$$\sigma(\theta) = k^{-2} \left| \sum_l (2l+1)e^{i\delta_l} \sin(\delta_l)P_l(\cos(\theta)) \right|^2$$

et la section efficace totale

$$\sigma_{0\text{tot}} = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) \sin(\theta) d\theta$$

et grâce aux relations d'orthogonalité des P_l

$$\sigma_{0\text{tot}} = 4\pi k^{-2} \sum_l (2l+1) \sin^2(\delta_l(k))$$

(pour des potentiels qui décroissent plus vite que r^{-3} à l'infini et qui ont une singularité à l'origine plus faible que r^{-2})

$$V(r) < r^{-3} \quad (r \rightarrow \infty), \quad \text{et} \quad r^2 V(r) \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} 0$$

)

Exemple 5

Considérons l'équation radiale $U = 0$

$$-y'' + \frac{l(l+1)}{r^2}y = y$$

Il existe deux solutions linéairement indépendantes

- a) $rj_l(r)$ régulière à l'origine
- b) $rn_l(r)$ (fonctions de Neumann) singulières à l'origine (en r^{-l}).

On peut poser

$$rj_l(r) = R_l\left(\frac{1}{r}\right) \sin(r) + S_l(r) \cos(r)$$

$$rn_l(r) = R_l\left(\frac{1}{r}\right) \cos(r) - S_l(r) \sin(r)$$

R_l étant un polynôme à coefficients réels de degré l et de parité $(-1)^l$ et S_l un polynôme à coefficients réels de degré $l-1$ et de parité $(-1)^{l-1}$, avec

$$R_l + iS_l = \sum_{k=0}^l \frac{i^{k-l} (l+k)!}{2^k k! (l-k)!} r^{-k}$$

On a, entre autre

$$\begin{aligned} j_0 &= \frac{\sin(r)}{r} & j_1(r) &= \frac{\sin(r)}{r^2} - \frac{\cos(r)}{r} \\ n_0(r) &= \frac{\cos(r)}{r} & n_1(r) &= \frac{\cos(r)}{r^2} + \frac{\sin(r)}{r} \end{aligned}$$

On introduit également

$$h_l^\pm(r) = n_l(r) \pm i j_l(r)$$

avec

$$h_l^\pm(r) = (R_l + iS_l) \frac{e^{\pm ir}}{r}$$

et $h_l^- = (h_l^+)^*$.

On a encore les comportements asymptotiques $r \rightarrow \infty$ ($r \gg l+1$)

$$j_l(r) \simeq \frac{1}{r} \sin\left(r - l\frac{\pi}{2}\right)$$

$$n_l(r) \simeq \frac{1}{r} \cos\left(r - l\frac{\pi}{2}\right)$$

et pour $r \rightarrow 0$

$$j_l(r) \simeq \frac{r^l}{(2l+1)!!} \left[1 - \frac{r^2}{2(2l+3)} + \dots \right]$$

$$n_l(r) \simeq \frac{(2l+1)!!}{2l+1} \left(\frac{1}{r}\right)^{l+1} \left[1 + \frac{r^2}{2(2l-1)} + \dots \right]$$

où $(2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2l+1)$.

Exemple 6 (Cœur dur)

Considérons le potentiel du cœur dur

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

On obtient dans ce cas

$$\begin{aligned} y_l(r) &= 0 & r &\leq a \\ -y'' + \frac{l(l+1)}{r^2}y &= k^2y & r &> a. \end{aligned}$$

On posera donc, pour $r > a$

$$y_l = A_l k r j_l(kr) + B_l k r n_l(kr).$$

On aura une relation entre les A et les B fixée par

$$y_l(a) = 0$$

et

$$A_l ka j_l(ka) + B_l ka n_l(ka) = 0.$$

Les déphasages sont donnés par

$$\tan(\delta_l) = -\frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}$$

Les comportements

à basse énergie. LA contribution dominante est donnée par l'onde S ($l = 0$)

$$\delta_0 \simeq -ka \quad \delta_l \simeq (ka)^{2l+1}$$

et

$$\sigma_{\text{tot}} \simeq 4\pi a^2 = 4\sigma_{\text{cl.}}$$

à haute énergie. $ka \gg 1$ (limite classique)

$$\delta_l \simeq -ka + l\frac{\pi}{2}$$

et

$$\sigma_{\text{tot}} \simeq 2\sigma_{\text{cl.}}$$

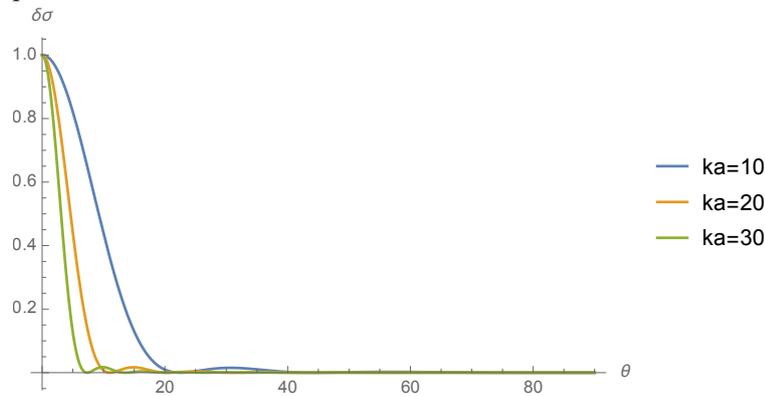
Il y a un phénomène d'interférence non négligeable

$$\sigma(\theta) = \sigma_{\text{cl.}} + \delta\sigma(\theta)$$

avec

$$\delta\sigma(\theta) = \frac{1}{4} \cot^2\left(\frac{\theta}{2}\right) J_1^2(ka \sin(\theta))$$

très piqué en $\theta = 0$.



3.9 Relation entre déphasage et potentiel

Soit V_l^1 et V_l^2 deux potentiels et y_l^1 et y_l^2 les deux solutions correspondantes de l'équation

$$-y_l^{i''} + (V_l^i - k^2)y_l^i = 0, \quad i = 1, 2$$

On a alors

$$\frac{d}{dr} \left(y^1 \frac{dy^2}{dr} - y^2 \frac{dy^1}{dr} \right) = y^1 \frac{d^2 y^2}{dr^2} - y^2 \frac{d^2 y^1}{dr^2} = (V^2 - V^1) y^1 y^2$$

Par intégration, avec $y^i(0) = 0$

$$y^1 \frac{dy^2}{dr} - y^2 \frac{dy^1}{dr} = \int_0^r dr' [V^2(r') - V^1(r')] (y^1 y^2)(r')$$

Si l'on prend en compte la condition asymptotique

$$y^i \simeq \frac{1}{k} \left[\sin(kr - l\frac{\pi}{2}) + \tan(\delta_l^i) \cos(kr - l\frac{\pi}{2}) \right]$$

dans l'équation précédente, on obtient

$$\tan(\delta_l^1) - \tan(\delta_l^2) = k \int_0^\infty dr [V^2(r) - V^1(r)] (y^1 y^2)(r) \quad (3.4)$$

Dans le cas particulier où $V^2 = 0$ et $y_l^2(r) = r j_l(kr)$ et $\tan(\delta_l^2) = 0$ on obtient

$$\tan(\delta_l) = -k \int_0^\infty V(r) r j_l(kr) y_l(r) dr.$$

Ceci suggère l'approximation de Born pour les ondes partielles

$$y_l(r) \longrightarrow y_l^2(r) \quad (\text{particule libre})$$

d'où

$$\tan(\delta_l^{\text{Born}}) = -k \int_0^\infty V(r) [r j_l(kr)]^2 dr.$$

qui est une bonne approximation à haute énergie ou grand moments angulaires ($l \gg 1$).

On obtient le déphasage à grande énergie, $kr_0 \gg 1$, et l fixe, avec le développement

$$r j_l(kr) \simeq \frac{1}{k} \sin(kr - l\frac{\pi}{2})$$

d'où

$$\tan(\delta_l) \simeq -\frac{1}{k} \int \sin^2(kr - l\frac{\pi}{2}) V(r) dr$$

où le sinus oscille rapidement. On le remplace donc par sa moyenne

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2(\phi) d\phi = \frac{1}{2}$$

pour finalement obtenir

$$\tan(\delta_l) \simeq -\frac{1}{2k} \int_0^\infty V(r) dr$$

Les déphasages $\delta_l(k) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 0$. Ceci fixe l'ambiguïté de δ_l qui est défini modulo π .

3.10 Dépendance du déphasage dans les paramètres du potentiel

Supposons que le potentiel U dépende du paramètre λ . On prendra

$$U^1(r) = U(\lambda, r)$$

$$U^2(r) = U(\lambda + \epsilon, r)$$

On a alors

$$\frac{\tan(\delta_l^\lambda) - \tan(\delta_l^{\lambda+\epsilon})}{\epsilon} = k \int_0^\infty dr \frac{U(\lambda) - U(\lambda + \epsilon)}{\epsilon} y_l^\lambda y_l^{\lambda+\epsilon}$$

d'où

$$\frac{d}{d\lambda} \tan(\delta_l^\lambda) = -k \int_0^\infty dr \frac{\partial U}{\partial \lambda}(\lambda, r) (y_l^\lambda(r))^2$$

Prenons le cas particulier

$$U(\lambda, r) = \lambda U(r)$$

potentiel répulsif. $U > 0$, avec $U(\infty) = 0$, alors

$$\frac{d}{d\lambda} \tan(\delta_l^\lambda) < 0 \quad \longrightarrow \delta_l(\lambda) \text{ décroissante.}$$

potentiel attractif $U < 0$, alors

$$\frac{d}{d\lambda} \tan(\delta_l^\lambda) > 0 \quad \longrightarrow \delta_l(\lambda) \text{ croissante.}$$

Comme $\delta(0) = 0$, on en déduit, pour $k \neq 0$

potentiel répulsif. $\delta_l \leq 0$

potentiel attractif $\delta_l \geq 0$.

Pour $k = 0$, les déphasages ne varient pas continûment avec λ , car on a le *théorème de Levinson*

Théorème 3.1 (de Levinson)

$$\delta_l(k=0) - \delta_l(k \rightarrow +\infty) = n_l \pi$$

où n_l est le nombre d'états liés dans le potentiel U_l .

Comme n_l ne varie pas continûment avec λ , alors δ_l non plus

De plus l'équation 3.4 nous dit que si $U^1 \geq U^2$, alors $\delta^1 \leq \delta^2$. Cette inégalité est la base d'un principe variationnel pour le calcul des déphasages.

Exemple 7

Considérons le puits carré

$$U(r) = \begin{cases} -V_0 & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

Pour $(2ma^2V_0)^{\frac{1}{2}} = 4.8$ on a

$l = 0$: 2 états liés

$l = 1$: 1 état lié

$l = 2$: 1 état lié

$l \geq 3$: 0 état lié

et

$$\delta_0(0) = 2\pi, \quad \delta_1(0) = \pi, \quad \delta_2(0) = \pi, \quad \delta_{l \geq 3}(0) = 0$$

avec

$$\sigma_0 \simeq 45\pi a^2.$$

3.11 Diffusion à basse énergie et longueur de diffusion

Supposons que le potentiel soit de portée finie d

$$r \geq d \Rightarrow U(r) = 0.$$

Pour $r \geq d$ on a alors

$$y_l(r) = rA_l(k) [j_l(kr) + \tan(\delta_l) n_l(kr)]$$

et si $r < d$, en posant $q_l = \frac{y'_l}{y_l} = (\ln(y_l))'$, la dérivée logarithmique de y_l

$$q'_l = \frac{y''_l}{y_l} - \left(\frac{y'_l}{y_l}\right)^2$$

et l'équation de Schrödinger devient l'équation de Riccati

$$q' = U_l - k^2 - q^2$$

qui peut s'utiliser avec profit en simulation numérique 1D.

En principe, on peut résoudre cette équation, à $q(0)$ connu, et calculer $q(d)$.

Soit alors

$$\gamma_l = q_l(d) - \frac{1}{d} = \frac{y'_l(d)}{y_l(d)} - \frac{1}{d}.$$

En calculant y et y' en $r \rightarrow d$, on trouve l'équation

$$\tan(\delta_l) = \frac{\gamma_l(k)j_l(kd) - kj'_l(kd)}{kn'_l(kd) - \gamma_l(k)n_l(kd)}$$

À basse énergie $kd \ll l$ et en utilisant les développements asymptotiques de j_l et n_l à l'origine

$$\tan(\delta_l) \simeq \frac{(kd)^{2l+1}}{D_l} \frac{l - d\gamma_l(0)}{l + 1 + d\gamma_l(0)}$$

avec $D_l = \frac{[(2l+1)!]^2}{2^{2l+1}}$.

Si $l + 1 + d\gamma(0) \neq 0$

$$\tan(\delta_l) \simeq (kd)^{2l+1} c_l \quad l \neq 0,$$

on observe une décroissance rapide des déphasages en l . Ainsi peu de déphasages contribuent. On a alors, à l'ordre le plus bas

$$\tan(\delta_0) \simeq \frac{-d\gamma_0(0)}{1 + d\gamma_0(0)} kd.$$

On appelle *longueur de diffusion* la grandeur

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan(\delta_0(k))}{k} = \frac{d^2\gamma_0(0)}{1 + d\gamma_0(0)}.$$

a est positif dans le cas répulsif, et négatif dans le cas attractif.

À basse énergie, on aura la contribution essentiellement de l'onde S , d'où $f(\theta) \simeq \pm a$ (diffusion isotrope)

$$\sigma(\theta) \simeq a^2 \quad \sigma_{\text{tot}} = 4\pi a^2.$$

La longueur a se calcule par

$$a = 1 - \frac{1}{dq_0(d)}$$

soit en résolvant l'équation

$$y''_0 = U y_0.$$

Si, par accident, on avait $d\gamma_l(0) + l + 1 = 0$, il faut faire attention et dans ce cas

$$f(\theta) \simeq k^{2l-2} \quad \text{pour } k \rightarrow 0 \quad \text{et } l \neq 0$$

et

$$f_0 \simeq \frac{1}{k}.$$

On dit alors que l'on a résonance à énergie nulle, dans l'état l ($l = 0$, $a = \infty$ et $\sigma_{\text{tot}} \approx \frac{1}{k^2}$).

Pour $l = 1$, $f(\theta) = -a + b \cos(\theta)$ et donc pas d'isotropie.

Il peut arriver que pour certaines énergies assez basses

$$\delta_0 = \pi \quad \text{et donc } \sigma_0 = 0.$$

Comme les σ_l sont petits, la section efficace totale

$$\sigma_{\text{tot}} \approx 0$$

comme observé par Ramsauer-Townsend.

Certains gaz (en particulier l'hélium) sont pratiquement transparents aux électrons pour des énergies faibles.

3.12 Les résonances

Les résonances sont un des phénomènes quantiques les plus remarquables : ce sont des variations très rapides de la section efficace en fonction de l'énergie (souvent des maxima) (comme par exemple lors de la collision élastique électron-hélium).

Il y a plusieurs types de résonances, en particulier des résonances plus ou moins étroites. Il est très difficile de se prononcer dans le cas de résonances très larges, car elles pourraient n'être que de simples bosses de la section efficace.

Comme $\sigma_l \sin^2(\delta_l)$, le maximum correspond à un passage très rapide de δ_l par $(2n + 1)\frac{\pi}{2}$.

On considère un potentiel de portée finie d ($V(r) = 0$ si $r \geq d$) et on a vu alors que

$$\tan(\delta_l) = \frac{\gamma_l(k)j_l(kd) - kj'_l(kd)}{kn'_l(kd) - \gamma_l(k)n_l(kd)}$$

ce qui peut également s'écrire (avec $h_{\pm, l} = n_l \pm i j_l$)

$$e^{2i\delta_l} = \frac{kh'_{-, l} - \gamma h_{-, l}}{kh'_{+, l} - \gamma h_{+, l}}.$$

On a vu que pour une sphère dure, les déphasages ξ_l étaient donnés par

$$\tan(\xi_l) = -\frac{j_l(kd)}{n_l(kd)} \quad \text{ou} \quad e^{2i\delta_l} = \frac{h_-}{h_+}.$$

On peut donc écrire

$$e^{2i\delta_l} = e^{2i\xi_l} \frac{w_l - \gamma_l}{w_l^* - \gamma_l}$$

avec

$$w_l = k \frac{h'_{-, l}(kd)}{h_{-, l}(kd)} = \frac{d}{dr} \ln(h_{-, l}(kr)) \Big|_{r=d}.$$

Le nombre

$$\gamma_l = \frac{y'_l(kd)}{y_l(kd)} - \frac{1}{d}$$

est réel. On peut donc poser

$$\frac{w_l - \gamma_l}{w_l^* - \gamma_l} = e^{2i\rho_l}$$

où

$$\rho_l = \arctan\left(\frac{\Im(w_l)}{\Re(w_l) - \gamma_l}\right).$$

On peut ainsi décomposer le déphasage en deux parties

$$\delta_l = \xi_l + \rho_l.$$

La première partie, ξ_l , décrit la diffusion par une sphère dure qui a la portée du potentiel.

La deuxième partie, ρ_l , dépend de la forme explicite de V .

Or on a vu que ξ_l varie doucement en fonction de l'énergie. Donc les résonances proviennent de ρ_l .

L'amplitude de diffusion se décompose en

$$a_l = a_l^0 + a_l^1$$

avec

$$a_l^0 = \frac{2l+1}{2ik}(e^{2i\xi_l} - 1), \quad a_l^1 = \frac{2l+1}{k} e^{2i\xi_l} \frac{\Im(w_l)}{\Re(w_l) - \gamma_l}.$$

La section efficace devient alors

$$|a_l|^2 = |a_l^0|^2 + |a_l^1|^2 + 2\Re(a_l^0 a_l^{1*})$$

où le dernier terme est responsable d'interférences et avec

$$|a_l^1|^2 = \frac{(2l+1)^2}{k^2} \frac{(\Im(w_l))^2}{(\Re(w_l) - \gamma_l)^2 + (\Im(w_l))^2}$$

et

$$2\Re(a_l^0 a_l^{1*}) = 2 \sin(\xi_l) \frac{2l+1}{k} \Re\left(e^{i\xi_l} \frac{\Im(w_l)}{\Re(w_l) - \gamma_l}\right).$$

Pour que $|a_l^1|^2$ devienne grand, il faut que

$$\Re(w_l) - \gamma_l \longrightarrow 0.$$

Supposons qu'il existe une énergie résonante $E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$ telle que

$$\Re(w_l(k_0)) - \gamma_l(k_0) = 0$$

et

$$\Im(w_l(k_0)) \neq 0.$$

Pour des énergies voisines de E_0 , on aura, en développant en $E - E_0$ au plus bas ordre

$$\Re(w_l(k_0)) - \gamma_l(k_0) \simeq (E - E_0)c \frac{2m}{\hbar^2}$$

où $c = \frac{d}{dk^2} |\Re(w_l) - \gamma_l|_{k^2=k_0^2}$ et

$$\Im(w_l(k_0)) = c \frac{2m \Gamma}{\hbar^2 2}$$

ce qui définit Γ .

Ainsi, au voisinage de E_0

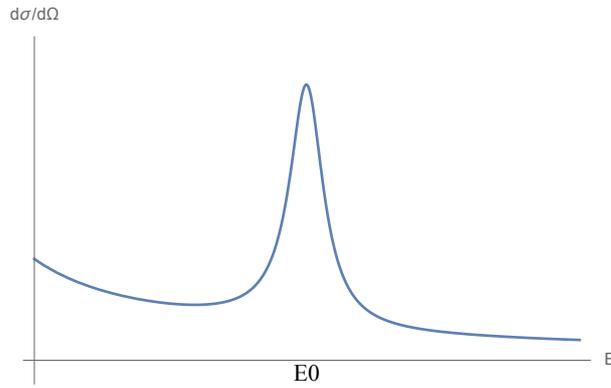
$$|a_l|^2 = |a_l^0|^2 + \frac{(2l+1)^2}{k^2} \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2} + 2 \frac{\sin(\xi_l)}{k} (2l+1) \frac{(\Gamma/2)(E - E_0)}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}.$$

$\Gamma > 0$ correspond à une croissance du déphasage quand il passe par $(2n+1)\frac{\pi}{2}$ (seul cas physique).

La résonance est étroite si $\frac{\Gamma}{2E_0} \ll 1$.

Si on peut négliger le terme d'interférence et comme le terme $|a_l^0|^2$ donne un fond continu, sans trop de structure, on aura une section efficace donnée essentiellement par

$$\frac{d\sigma_l}{d\Omega} \simeq \frac{2l + 1}{k^2} \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2} P_l(\cos(\theta)).$$



Un pic étroit autour de E_0 est le témoignage d'une résonance étroite qui est donnée par

$$\sigma_{\text{tot}} \simeq \sigma_l \simeq \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \frac{\Gamma^2}{4(E - E_0)^2 + \Gamma^2}.$$

C'est la *formule de Breit-Wigner* également appelée *lorentzienne*. E_0 est la position de la résonance et Γ sa largeur (qui est sa largeur à mi hauteur).

Pour pouvoir observer les résonances, il faut qu'elles soient bien séparées.

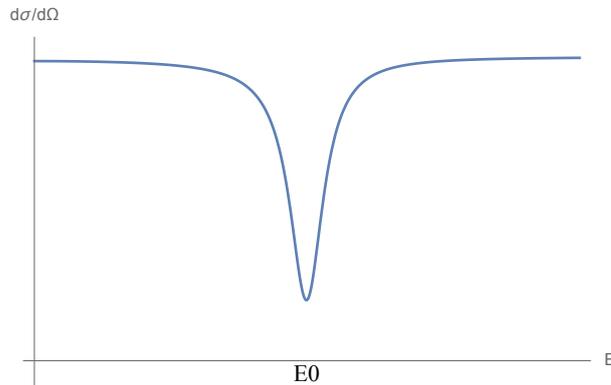
Le terme d'interférence aura en général pour effet de déplacer un peu la résonance.

Si, par hasard, $\xi_l(E_0) = (2n + 1)\frac{\pi}{2}$, alors en $E = E_0$

$$e^{2i\delta_l} = 1$$

et $a_l = 0$.

On observera dans ce cas un minimum très prononcé de σ_l appelé *résonance fenêtre* ou *window resonance*.



Exemple 8 (Puits attractif)

Prenons le puits attractifs

$$U(r) = \begin{cases} -\lambda^2 & r \leq d \\ 0 & r > d \end{cases}$$

On trouve alors

$$\gamma_l = \kappa \frac{j_l(kd)}{j_l(\kappa d)}$$

où $\kappa = \sqrt{k^2 + \lambda^2}$.

On considère le régime défini par $kd > l(l+1)$ et $l \neq 0$, dans le cas suivant

- un **potentiel profond** $\kappa d \gg kd$
- une **basse énergie** $kd \ll 1$

La condition de résonance est

$$l + \kappa d \cotan(\kappa d - l\frac{\pi}{2}) = 0$$

et l'énergie de résonance

$$E_{n+1} - E_n \simeq \frac{\hbar \lambda^2}{md} \pi n \simeq D_n$$

avec

$$\frac{\Gamma_n}{D_n} \ll 1.$$

L'amplitude de la fonction d'onde dans le puits, $r < d$, est

$$y_l = A \kappa r j_l(\kappa r)$$

et hors du puits

$$y_l = \kappa r j_l(\kappa r).$$

Près de la résonance

$$A \simeq \frac{\Gamma}{\sqrt{\Gamma^2 + 4(E - E_0)^2}}.$$

A est maximal à la résonance et donc la probabilité de trouver la particule dans le puits ($\simeq A^2$) est maximale à la résonance.

Les résonances vont apparaître lorsque la particule peut être piégée dans le potentiel pendant un temps assez long, caractérisé par un temps de vie Γ^{-1} .

3.13 Résonances et états métastables

On peut montrer que le paquet d'onde diffusé est centré au temps t à une distance $r \simeq vt - \frac{d}{dt} \phi$ où

$$\phi = \arg(f(\theta, k)).$$

Tout se passe comme si la particule était retardée, du fait de la collision, d'un temps $\tau = \frac{1}{v} \frac{d\phi}{dk} = \hbar \frac{d\phi}{dE}$. On appelle τ *temps de retard* ou *délai*

$$\tau = \hbar \frac{d\phi}{dE}.$$

Le délai τ peut être négatif (mais pas trop) et alors l'onde est en avance, ou positif, $\tau > 0$ et l'onde a un retard strict.

La causalité entraîne que

$$-\tau \leq \frac{d}{v}$$

où d est la portée du potentiel.

Si, dans le cas où V est central, l'onde l domine la diffusion, donnant un fort pic en E_0 , on a (Wigner)

$$\frac{d\delta_l(k)}{dk} = -d$$

Un déphasage peut donc croître rapidement à travers un multiple impair de $\frac{\pi}{2}$, mais ne peut décroître que relativement lentement,

S'il croît, le temps de retard (positif) sera

$$\tau_l = \hbar \frac{d\delta_l}{dE} \quad (\text{Wigner})$$

et dans ce cas $\Gamma > 0$ et peut être arbitrairement petit.

Une résonance étroite correspondra à un grand temps de retard, on trouve que

$$\tau = \hbar \frac{\Gamma/2}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}$$

et à la résonance

$$\tau = \frac{2\hbar}{\Gamma}$$

Ceci suggère que la résonance est un état métastable de durée de vie $\tau = \frac{2\hbar}{\Gamma}$.

Cette image est renforcée par le fait que l'amplitude de l'onde devient maximale à l'intérieur d'un puit profond, où elle a des états quasi liés, correspondant aux énergies de résonance.

Les résonances correspondent à des pôles de la fonction de Green dans le plan complexe ($\Im > 0$) à distance Γ de l'axe réel.

3.14 Potentiel coulombien

Le cas du potentiel coulombien

$$V(r) = Z_1 Z_2 \frac{e^2}{r}$$

est un problème exactement soluble.

On trouve

$$\psi_{\text{diffusée}} \simeq \frac{1}{r} e^{i(kr - \gamma \ln(2kr))} f_c(\theta)$$

avec

$$\gamma = Z_1 Z_2 \frac{e^2 m}{\hbar^2 k}$$

et $f_c(\theta)$ est l'amplitude de diffusion coulombienne qui vaut

$$f_c(\theta) = -\frac{\gamma}{2k \sin^2(\frac{\theta}{2})} e^{-2i(\gamma \ln(\sin(\theta/2)) - \sigma_0)}$$

avec

$$\sigma_0 = \arg(\Gamma(1 + i\gamma))$$

On voit donc que la fonction d'onde diffusée n'est pas une onde sphérique, solution de l'équation

$$-\Delta\psi = k^2\psi,$$

mais une onde sphérique déphasée de $\gamma \ln(2kr)$.

Le potentiel coulombien étant de très longue portée, il ne permet pas à la particule d'être libre.

On peut néanmoins définir une amplitude de diffusion $f_c(\theta)$ et donc une section efficace

$$\sigma(\theta) = |f_c(\theta)|^2 = \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4(\theta/2)}$$

qui est le même résultat que l'on obtient par la mécanique classique (Rutherford).

3.15 Diffusion de particules identiques, effets de la statistique

Soient N particules identiques, donc indiscernables, de fonction d'onde

$$\psi(\underbrace{x_1, \sigma_1; \dots; x_N, \sigma_N}_1)$$

où x_i est la position de la particule i et σ_i son spin (déterminé par sa composante σ_z par exemple).

On distingue les deux cas suivants, définis par leur comportement sous les permutations des particules

— **Bosons** ψ est totalement symétrique sous les permutations

$$\psi(1; \dots; i; \dots; j; \dots; N) = \psi(1; \dots; j; \dots; i; \dots; N) \quad \forall \{i, j\}$$

— **Fermions** ψ est totalement antisymétrique sous les permutations

$$\psi(1; \dots; i; \dots; j; \dots; N) = -\psi(1; \dots; j; \dots; i; \dots; N) \quad \forall \{i, j\}$$

Selon la théorie des champs, les particules de spin demi-impair sont des fermions et que les particules de spin entier sont des bosons.

En général, la fonction d'onde spatiale de deux particules est symétrique si le spin est pair et antisymétrique s'il est impair.

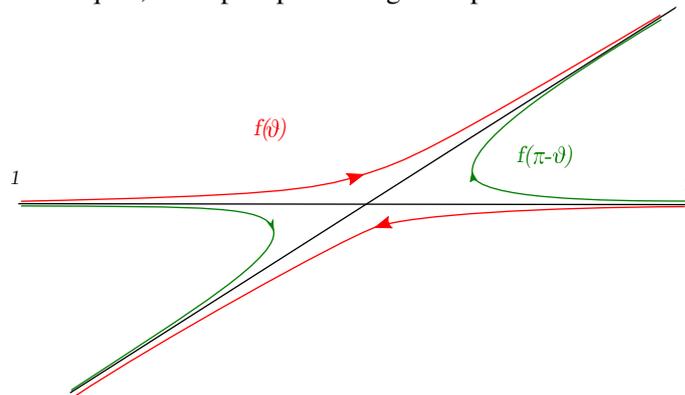
Dans le système de coordonnées lié au centre de masse (CM) la permutation des coordonnées \vec{r}_1 et \vec{r}_2 revient à changer la position relative $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ en $-\vec{r}$.

La fonction d'onde diffusée dans le CM est

$$\psi(\vec{r}) = [e^{ikz} \pm e^{-ikz}] + \frac{1}{r} e^{ikr} [f(\Omega) \pm f(-\Omega)]$$

où le signe $+$ est à prendre pour le cas symétrique et le signe $-$ pour le cas antisymétrique.

Les particules étant identiques, on ne peut pas distinguer la particule diffusée de la particule diffusante.



Les deux ondes planes e^{ikz} et e^{-ikz} représentent les deux particules identiques se dirigeant l'une vers l'autre.

La section efficace correspondant à ψ sera donnée par le quotient du courant diffusé par la densité de courant de chaque onde plane incidente. Donc si le spin total est

— **pair**

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = |f(\Omega) + f(-\Omega)|^2$$

— **impair**

$$\frac{d\sigma_a}{d\Omega} = |f(\Omega) - f(-\Omega)|^2$$

Si le spin total n'est pas exactement déterminé, la section efficace mesurée sera

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = p_s |f(\Omega) + f(-\Omega)|^2 + p_a |f(\Omega) - f(-\Omega)|^2$$

avec $p_a + p_s = 1$ et $p_{a,s}$ étant la probabilité d'avoir un spin total demi-impair, ou entier.

Observons encore que dans un potentiel central

$$\begin{aligned} f(\Omega) &= f(\theta) \\ f(-\Omega) &= f(\pi - \theta) \end{aligned}$$

Exemple 9 (Collisions He⁴-He⁴)

Ces particules sont des bosons (de spin 0) et

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2$$

Exemple 10 (Collisions p-p ou e-e)

Ces particules sont des fermions (de spin 1/2) et ces particules peuvent se trouver dans deux états

- **singulet** de spin total 0
- **triplet** de spin total 1

La section efficace est alors

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = p_{\text{sing}} |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + p_{\text{trip}} |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2.$$

Si le faisceau est non polarisé, alors $p_{\text{sing}} = \frac{1}{4}$ et $p_{\text{trip}} = \frac{3}{4}$.

L'effet d'interférence dû à l'échange se révèle alors important.

De manière générale

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \underbrace{|f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2}_{\text{classique}} + 2\Re\left(f^*(\theta)f(\pi - \theta)(p_s - p_a)\right)$$

Par exemple pour $\theta = \frac{\pi}{2}$ on a

1. **bosons**

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4|f(\frac{\pi}{2})|^2 = 2 \frac{d\sigma}{d\Omega}_{\text{classique}}$$

2. **fermions** (dans le cas non polarisé)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} \frac{d\sigma}{d\Omega}_{\text{classique}}$$

Dans le cas coulombien, on obtient la *formule de Mott*

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{\gamma}{2k}\right)^2 \left(\frac{1}{\sin^4(\frac{\theta}{2})} + \frac{1}{\cos^4(\frac{\theta}{2})} \pm \frac{2 \cos(2\gamma \ln(\tan(\theta/2)))}{\sin^2(\theta/2) \cos^2(\theta/2)} \right)$$

où le signe + correspond au cas des bosons et le signe - au cas des fermions de spin $\frac{1}{2}$ non polarisés et où

$$\gamma = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^2 m}{\hbar^2 k}.$$

3.16 Matrice S

La matrice S a été introduite par Heisenberg durant la deuxième guerre mondiale. Si

$$H = H_0 + V$$

avec V qui décroît assez vite à l'infini, on définit l'opérateur d'évolution

$$U_t = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}$$

et l'opérateur d'évolution libre

$$U_t^0 = e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}}.$$

Considérons une expérience de diffusion avec

$$\psi_t = U_t \psi.$$

Loin dans le passé $t \rightarrow -\infty$, ψ_t est un paquet d'onde libre, loin de la cible. Il existe ψ_{in} tel que

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} (U_t \psi - U_t^0 \psi_{\text{in}}) = 0.$$

De même pour le futur lointain, il existe ψ_{out} tel que

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} (U_t \psi - U_t^0 \psi_{\text{out}}) = 0.$$

Les états ψ_{in} et ψ_{out} devraient avoir une impulsion \vec{p} bien définie. L'existence des états asymptotiques suggère l'existence de la limite

$$\Omega_{\pm} = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U_t^{\dagger} U_t^0$$

les *opérateurs de Möller*.

La matrice S est alors définie par

$$S = \Omega_-^{\dagger} \Omega_+$$

et est telle que

$$\psi_{\text{out}} = S \psi_{\text{in}}.$$

La matrice S a les propriétés suivantes

1. S est unitaire.
2. $[S, H_0] = 0$

Donc si $H_0 |\vec{p}\rangle = E_p |\vec{p}\rangle$ avec $E_p = \frac{p^2}{2m}$, alors de la deuxième propriété il suit que

$$\langle \vec{p} | S H_0 - H_0 S | \vec{p}' \rangle = 0$$

et donc

$$\langle \vec{p} | S | \vec{p}' \rangle (E_p - E_{p'}) = 0$$

et donc à la conservation de l'énergie

$$\langle \vec{p} | S | \vec{p}' \rangle = \delta(E_p - E_{p'}).$$

Clairement, si $V = 0$, alors $S = 1$ et

$$\langle \vec{p} | S | \vec{p}' \rangle = \delta(p - p').$$

Donc

$$\langle \vec{p} | S | \vec{p}' \rangle = \delta(p - p') + \delta(E_p - E_{p'}) \frac{i}{2\pi m} f(p' \leftarrow p)$$

où f est l'amplitude de diffusion et la section efficace est donnée par

$$\sigma(\Omega) = |f|^2.$$

3.17 Exercices

1. (**Collision classique**) Calculer la section efficace différentielle et totale dans le cas où le potentiel $V(r)$ est

(a) cœur dur

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & r \leq d \\ 0 & r > d \end{cases}$$

(b) coulombien $V(r) = \frac{qq'}{r}$

2. (**Fonction de Green libre**) Calculer, par la méthode des résidus, la fonction de Green

$$G_z^0(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{z - k^2} d^3k$$

d'une particule libre (noter que $G_z(\vec{r}) = G_z(|\vec{r}|)$). En déduire la section efficace du potentiel de Yukawa dans l'approximation de Born.

3. On considère la diffusion d'électrons rapides par des atomes. En supposant celle-ci élastique, on peut considérer que le potentiel d'interaction des atomes avec les électrons est donné par

$$V(r) = -e\varphi(r)$$

où $\varphi(r)$ est une solution de l'équation de Poisson $\Delta\varphi = -4\pi\rho(r)$ et $\rho(r)$ est la densité de charge de l'atome

$$\rho(r) = Ze\delta(r) - en(|\vec{r}|)$$

et $n(r)$ est la densité de charge électronique.

Calculer la section efficace dans l'approximation de Born.

Discuter en particulier les cas

(a) $k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ petit.

(b) $k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ grand.

(c) Atome d'hydrogène dans l'état fondamental $n(r) = \left|\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r}\right|^2$

4. Étudier la diffusion d'une onde par une sphère dure. Calculer δ_l .
5. Calculer δ_l dans le cas où $U(r)$ est un puits attractif

$$U(r) = \begin{cases} -\lambda^2 & r < d \\ 0 & r \geq d. \end{cases}$$

6. Calculer δ_0 et la fonction d'onde ψ_0 dans le cas où $U(r)$ est un puits

(a) attractif

(b) répulsif

$$U(r) = \begin{cases} \lambda^2 & r < d \\ 0 & r \geq d \end{cases}$$

Calculer la limite de haute énergie et comparer avec l'approximation de Born.

Calculer la limite de basse énergie dans le cas répulsif. Comparer avec le cas des sphères dures.

Expliquer la différence physiquement.

Calculer la limite de basse énergie dans le cas attractif, lorsque le potentiel n'a pas d'état lié.

Calculer la section efficace $\sigma_0(\theta)$ à basse énergie dans les deux cas, répulsifs et attractifs.

Annexe A

Solutions des exercices

A.1 Lien entre la mécanique classique et la mécanique quantique

1. Résoudre l'équation de Hamilton-Jacobi dans le cas d'une particule libre à 1 dimension.

L'hamiltonien associé à la particule libre en 1 dimension est

$$H = \frac{p^2}{2m}$$

Le système étant conservatif, posons

$$S = -Et + W(q).$$

L'équation de Hamilton-Jacobi s'écrit

$$E = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W}{\partial q} \right)^2, \quad \text{avec} \quad \frac{\partial W}{\partial q} = \sqrt{2mE} = P.$$

Ainsi, $W = Pq$, et $W = W(E, q) = \sqrt{2mE}q$. L'équation horaire se déduit de

$$\frac{dW}{dE} = t - t_0$$

soit

$$\frac{m}{\sqrt{2mE}}q = q \frac{m}{P} = t - t_0.$$

d'où

$$q(t) = \frac{P}{m}(t - t_0).$$

2. Idem pour le cas d'une particule libre en n dimensions.

On a ici

$$H = \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m}$$

et on prend

$$S = -Et + W(\vec{q}), \quad \vec{q} \in \mathbb{R}^n$$

L'équation de Hamilton-Jacobi s'écrit

$$2mE = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial W}{\partial q_i} \right)^2.$$

Posons $W = \sum_{i=1}^n W_i(q_i)$. Dans l'équation de Hamilton-Jacobi on obtient

$$2mE = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial W_i}{\partial q_i} \right)^2$$

donc

$$2mE - \left(\frac{\partial W_i}{\partial q_i} \right)^2 = \sum_{j \neq i} \left(\frac{\partial W_j}{\partial q_j} \right)^2 = \text{cste.}$$

Ainsi

$$\frac{\partial W_i}{\partial q_i} = \text{cste} = P_i \quad \Rightarrow \quad W = \sum_{i=1}^n P_i q_i$$

avec, par l'équation de Hamilton-Jacobi $\sum_{i=1}^n P_i^2 = 2mE$.

On peut alors écrire $\nabla W = \vec{P} = \text{cste}$.

Prenons $\vec{w} = \frac{\vec{P}}{|\vec{P}|}$, on a

$$\vec{P} = \sqrt{2mE} \vec{w}.$$

Alors

$$\frac{\partial W}{\partial E} = \frac{\sqrt{2mE}}{2\sqrt{E}} \vec{w} \cdot \vec{q} = \frac{1}{2E} \vec{P} \cdot \vec{q} = t - t_0.$$

On en déduit finalement

$$\vec{q}(t) = \frac{2E}{\sqrt{2mE}} \vec{w}(t - t_0) + \vec{q}(t_0)$$

ou encore

$$\vec{q}(t) = \frac{\vec{P}}{m}(t - t_0) + \vec{q}(t_0)$$

où $\vec{q}(t_0) \perp \vec{P}$ est la position de la particule, sur le plan perpendiculaire à \vec{P} passant par l'origine, en $t = t_0$.

3. Idem pour l'oscillateur harmonique en 1 dimension.

On a

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2.$$

Prenons

$$S = -Et + W(q, E).$$

L'équation de Hamilton-Jacobi devient

$$E = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W}{\partial q} \right)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2$$

d'où

$$\frac{\partial W}{\partial q} = \sqrt{2mE + m^2\omega^2q^2}$$

et

$$W = \sqrt{2m} \int_0^q \sqrt{E + \frac{m}{2}\omega^2q'^2} dq'$$

Ainsi

$$S = -Et + \sqrt{2m} \int_0^q \sqrt{E + \frac{m}{2}\omega^2q'^2} dq'$$

On a alors

$$Q = \frac{\partial S}{\partial E} = -t + \frac{\sqrt{2m}}{2} \int_0^q \frac{dq'}{\sqrt{E + \frac{1}{2}m\omega^2q'^2}}$$

On obtient donc

$$\begin{aligned} t + Q &= \sqrt{\frac{m}{2E}} \int_0^q \frac{dq'}{\sqrt{1 - \frac{m\omega^2}{2E}q'^2}} \\ &= \sqrt{\frac{m}{2E}} \sqrt{\frac{2E}{m}} \frac{1}{\omega} \arcsin\left(\sqrt{\frac{m}{2E}}\omega q\right) \end{aligned}$$

ainsi

$$q(t) = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \sin(\omega(t + Q)).$$

4. Idem pour un potentiel central $V = V(r)$, où $r = |\vec{r}|$ (utiliser les coordonnées sphériques).

On a ici

$$\mathcal{L} = T - V = \frac{m}{2} [\dot{r}^2 + r^2 \sin^2(\theta)\dot{\phi}^2 + r^2\dot{\theta}^2] - V(r).$$

On a alors

$$\begin{cases} p_r &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \\ p_\theta &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta} \\ p_\phi &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = mr^2 \sin^2(\theta)\dot{\phi} \end{cases}$$

et l'hamiltonien est

$$H = \sum_j p_j \dot{q}_j - \mathcal{L}$$

soit

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\phi^2}{r^2 \sin^2(\theta)} \right) + V(r).$$

Comme H ne dépend pas explicitement de t , on peut prendre

$$S = -Et + W(r, \theta, \phi)$$

L'équation de Hamilton-Jacobi devient alors

$$E = V(r) + \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial W}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \left(\frac{\partial W}{\partial \phi} \right)^2 \right]$$

Posons

$$W(r, \theta, \phi) = W_r + W_\theta + W_\phi$$

et multiplions l'équation de Hamilton-Jacobi par $2mr^2$. On obtient

$$2mr^2(E - V(r)) = r^2 \left(\frac{\partial W_r}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \left(\frac{\partial W_\phi}{\partial \phi} \right)^2$$

d'où

$$2mr^2(E - V(r)) - r^2 \left(\frac{\partial W_r}{\partial r} \right)^2 = \left(\frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \left(\frac{\partial W_\phi}{\partial \phi} \right)^2 = P_r^2 = \text{cste}$$

On en déduit

$$\frac{\partial W_r}{\partial r} = \sqrt{2m(E - V(r)) - \frac{P_r^2}{r^2}}$$

On a également

$$\left(\frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right)^2 \sin^2(\theta) + \left(\frac{\partial W_\phi}{\partial \phi} \right)^2 = P_r^2 \sin^2(\theta)$$

d'où

$$\left(\frac{\partial W_\phi}{\partial \phi} \right)^2 = \left[P_r^2 - \left(\frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right)^2 \right] \sin^2(\theta) = P_\phi^2$$

et

$$W_\phi = P_\phi(\phi - \phi_0).$$

On a alors

$$\frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} = \sqrt{P_r^2 - \frac{P_\phi^2}{\sin^2(\theta)}}$$

d'où

$$W_\theta = \int_{\theta_0}^{\theta} \sqrt{P_r^2 - \frac{P_\phi^2}{\sin^2(\theta')}} d\theta'$$

Ainsi

$$S = -Et + \int_{r_0}^r \sqrt{2m(E - V(r')) - \frac{P_r^2}{r'^2}} dr' + \int_{\theta_0}^{\theta} \sqrt{P_r^2 - \frac{P_\phi^2}{\sin^2(\theta')}} d\theta' + P_\phi(\phi - \phi_0).$$

et on a

$$Q_r = \frac{\partial S}{\partial P_r} = \int_{r_0}^r \frac{-\frac{P_r}{r'^2}}{\sqrt{2m(E - V(r')) - \frac{P_r^2}{r'^2}}} dr' + \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{P_r}{\sqrt{P_r^2 - \frac{P_\phi^2}{\sin^2(\theta')}}} d\theta'$$

et

$$Q_\phi = \frac{\partial S}{\partial P_\phi} = \phi - \phi_0 + \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{P_\phi}{\sqrt{P_r^2 - \frac{P_\phi^2}{\sin^2(\theta')}}} \frac{d\theta'}{\sin^2(\theta')}$$

et enfin l'équation horaire est donnée par

$$t - t_0 = \frac{\partial W}{\partial E} = \int_{r_0}^r \frac{m}{\sqrt{2m(E - V(r')) - \frac{p_r^2}{r^2}}} dr'$$

5. Idem pour un potentiel de Coulomb avec un champ électrique $V(r) = \frac{a}{r} + bz$ en 3 dimensions (utiliser les coordonnées paraboliques (ξ, η, ϕ) définies à partir des coordonnées cylindriques par

$$\begin{cases} \rho &= \sqrt{\xi\eta}, \quad (\xi, \eta > 0) \\ z &= \frac{1}{2}(\xi - \eta) \end{cases}$$

L'énergie cinétique en coordonnées cylindriques est donnée par

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{\rho}^2 + \rho^2\dot{\phi}^2 + \dot{z}^2).$$

L'énergie cinétique

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{\rho}^2 + \rho^2\dot{\phi}^2 + \dot{z}^2)$$

en coordonnées paraboliques devient

$$T = \frac{m}{8} \left[\dot{\xi}^2 \left(\frac{\eta}{\xi} + 1 \right) + \dot{\eta}^2 \left(\frac{\xi}{\eta} + 1 \right) + 4\xi\eta\dot{\phi}^2 \right]$$

d'où le lagrangien

$$\mathcal{L} = \frac{m}{8} \left[\dot{\xi}^2 \left(\frac{\eta}{\xi} + 1 \right) + \dot{\eta}^2 \left(\frac{\xi}{\eta} + 1 \right) + 4\xi\eta\dot{\phi}^2 \right] - \frac{2a}{\xi + \eta} - \frac{b}{2}(\xi - \eta)$$

où l'on a utilisé

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{\rho^2 + z^2} \\ &= \sqrt{\xi\eta + \frac{1}{4}(\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta)} \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\xi^2 + \eta^2 + 2\xi\eta} \\ &= \frac{1}{2}(\xi + \eta) \end{aligned}$$

On a alors

$$\begin{aligned} p_\xi &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\xi}} = \frac{m}{4} \left(1 + \frac{\eta}{\xi} \right) \dot{\xi} \\ p_\eta &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\eta}} = \frac{m}{4} \left(1 + \frac{\xi}{\eta} \right) \dot{\eta} \\ p_\phi &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = m\xi\eta\dot{\phi} \end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned}\dot{\xi} &= \frac{4P_\xi}{m(1 + \frac{\eta}{\xi})} \\ \dot{\eta} &= \frac{4p_\eta}{m(1 + \frac{\xi}{\eta})} \\ \dot{\phi} &= \frac{P_\phi}{m\xi\eta}\end{aligned}$$

L'hamiltonien s'obtient en calculant

$$\mathcal{H} = p_\xi \dot{\xi} + p_\eta \dot{\eta} + p_\phi \dot{\phi} - \mathcal{L}$$

soit

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \frac{4p_\xi^2}{m(1 + \frac{\eta}{\xi})} + \frac{4p_\eta^2}{m(1 + \frac{\xi}{\eta})} + \frac{p_\phi^2}{m\xi\eta} - \left(\frac{2p_\xi^2}{m(1 + \frac{\eta}{\xi})} + \frac{2p_\eta^2}{m(1 + \frac{\xi}{\eta})} + \frac{p_\phi^2}{2m\xi\eta} \right) + \frac{2a}{\xi + \eta} + \frac{b}{2}(\xi - \eta) \\ &= \frac{2\xi p_\xi^2 + \eta p_\eta^2}{m(\xi + \eta)} + \frac{p_\phi^2}{2m\xi\eta} + \frac{2a}{\xi + \eta} + \frac{b}{2}(\xi - \eta).\end{aligned}$$

Prenons

$$S = -Et + W_\xi + W_\eta + W_\phi.$$

L'équation de Hamilton-Jacobi s'écrit alors

$$E = \frac{2}{m} \left[\frac{\xi \left(\frac{\partial W_\xi}{\partial \xi} \right)^2 + \eta \left(\frac{\partial W_\eta}{\partial \eta} \right)^2}{\xi + \eta} \right] + \frac{\left(\frac{\partial W_\phi}{\partial \phi} \right)^2}{2m\xi\eta} + \frac{2a}{\xi + \eta} + \frac{b}{2}(\xi - \eta).$$

On peut isoler $\left(\frac{\partial W_\phi}{\partial \phi} \right)^2$

$$\left(\frac{\partial W_\phi}{\partial \phi} \right)^2 = P_\phi^2 = 2m\xi\eta E - \frac{4\eta\xi}{\xi + \eta} \left[\xi p_\xi^2 + \eta p_\eta^2 \right] - \frac{4ma\xi\eta}{\xi + \eta} + bm\xi\eta(\xi - \eta)$$

d'où $W_\phi = P_\phi \phi$.

En multipliant par $\frac{\xi + \eta}{\eta\xi}$ la seconde égalité, on obtient

$$P_\phi^2 \left(\frac{1}{\eta} + \frac{1}{\xi} \right) = 2mE(\xi + \eta) - 4 \left[\xi \left(\frac{\partial W_\xi}{\partial \xi} \right)^2 + \eta \left(\frac{\partial W_\eta}{\partial \eta} \right)^2 \right] - 4ma + bm(\xi^2 - \eta^2)$$

d'où

$$P_\phi^2 \frac{1}{\eta} - 2mE\eta + 4\eta \left(\frac{\partial W_\eta}{\partial \eta} \right)^2 + 2ma + bm\eta^2 = 2mE\xi - P_\phi^2 \frac{1}{\xi} - 4\xi \left(\frac{\partial W_\xi}{\partial \xi} \right)^2 - 2ma + bm\xi^2 = \alpha$$

où α est une constante. Ainsi

$$\frac{\partial W_\eta}{\partial \eta} = \sqrt{\frac{\alpha}{4\eta} - \frac{ma}{2\eta} - \frac{b}{2}m\eta + \frac{mE}{2} - \frac{P_\phi^2}{4\eta^2}}$$

et

$$\frac{\partial W_\xi}{\partial \xi} = \sqrt{\frac{mE}{2} - \frac{ma}{2\xi} - \frac{P_\phi^2}{4\xi^2} + \frac{bm\xi}{2} - \frac{\alpha}{4\xi}}.$$

d'où

$$S = -Et + P_\phi \phi + \int d\eta \sqrt{\frac{\alpha}{4\eta} - \frac{ma}{2\eta} - \frac{b}{2}m\eta + \frac{mE}{2} - \frac{P_\phi^2}{4\eta^2}} + \int d\xi \sqrt{\frac{mE}{2} - \frac{ma}{2\xi} - \frac{P_\phi^2}{4\xi^2} + \frac{bm\xi}{2} - \frac{\alpha}{4\xi}}$$

Pour obtenir les trajectoires, on calcule

$$Q_\phi = \frac{\partial S}{\partial P_\phi} = \phi_0 = \text{cste}$$

soit

$$\phi_0 = \phi - \int \frac{d\eta}{\eta} \frac{P_\phi}{2\sqrt{\frac{\alpha}{4\eta} - \frac{ma}{2\eta} - \frac{b}{2}m\eta + \frac{mE}{2} - \frac{P_\phi^2}{4\eta^2}}} - \frac{P_\phi}{2} \int \frac{d\xi}{\xi} \frac{1}{\sqrt{\frac{mE}{2} - \frac{ma}{2\xi} - \frac{P_\phi^2}{4\xi^2} + \frac{bm\xi}{2} - \frac{\alpha}{4\xi}}}$$

Enfin, l'équation horaire

$$Q_E = \frac{\partial S}{\partial E} = -t_0 = \text{cste}$$

soit

$$-t_0 = -t + \frac{m}{4} \int \frac{d\eta}{\sqrt{\frac{\alpha}{4\eta} - \frac{ma}{2\eta} - \frac{b}{2}m\eta + \frac{mE}{2} - \frac{P_\phi^2}{4\eta^2}}} + \frac{m}{4} \int \frac{d\xi}{\sqrt{\frac{mE}{2} - \frac{ma}{2\xi} - \frac{P_\phi^2}{4\xi^2} + \frac{bm\xi}{2} - \frac{\alpha}{4\xi}}}.$$

6. Par le principe de Fermat, établir la loi de Snell-Descartes.

On considère un dioptré-plan séparant deux milieux homogènes d'indice n_1 et n_2 , où se trouvent deux points q_1 et q_2 respectivement, reliés par un rayon lumineux.

La trajectoire effectivement suivie par le rayon lumineux est celle qui rend stationnaire l'intégrale

$$\int_{q_1}^{q_2} \frac{ds}{u(s)}$$

C'est le principe de Fermat. Dans l'exercice 8, on montre que ce principe conduit à l'équation de la trajectoire

$$\frac{d}{ds} \left(n(q) \frac{dq}{ds} \right) = \nabla n(q)$$

où l'on a paramétré la courbe $q = q(s)$ par l'abscisse curviligne s le long de la courbe. On a alors

$$d \left(n(q) \frac{dq}{ds} \right) = \nabla n(q) ds$$

et par intégration sur la trajectoire de q_1 à q_2

$$n(q_2) \frac{dq}{ds} \Big|_{q=q_2} - n(q_1) \frac{dq}{ds} \Big|_{q_1} = \int_{q_1}^{q_2} \nabla n(q) ds$$

Or $\frac{dq}{ds}$ est un vecteur unitaire parallèle à la trajectoire de q_1 à q_2 . Soit $\hat{v} = \frac{dq}{ds}$, on a alors

$$n_2 \hat{v}_2 - n_1 \hat{v}_1 = \int_{q_1}^{q_2} \nabla n(q) ds$$

Prenons q_1 et q_2 dans deux milieux homogènes, séparés par un dioptre plan, de sorte que

$$\nabla n(q) = (n_2 - n_1) \vec{m} \delta_\Sigma(q - q_\Sigma)$$

où \vec{m} est un vecteur normal au dioptre Σ qui va du côté de plus petit indice, vers le côté de plus grand indice (p.ex. si $n_2 > n_1$, alors \vec{m} va du côté d'indice n_1 vers le côté d'indice n_2 , orthogonalement à la surface de séparation).

Le $\delta_\Sigma(q)$ indique que le gradient est partout nul (les milieux 1 et 2 sont supposés homogènes) excepté à la surface Σ séparant les deux milieux, où il y a un changement brusque de la valeur de l'indice qui passe de n_1 à n_2 . Ainsi, il résulte de l'intégrale que

$$n_2 \hat{v}_2 - n_1 \hat{v}_1 = (n_2 - n_1) \vec{m}.$$

De cette relation on constate que \vec{v}_1 , \vec{v}_2 et \vec{m} sont coplanaires.

En prenant le produit vectoriel des deux membres avec \vec{m} on obtient

$$n_2 \hat{v}_2 \times \vec{m} - n_1 \hat{v}_1 \times \vec{m} = \vec{0}$$

et en prenant la norme

$$n_2 \sin(\alpha_2) = n_1 \sin(\alpha_1)$$

où α_2 et α_1 est l'angle (inférieur à 90°) entre la normale au dioptre et la direction des rayons lumineux dans les milieux 2 et 1 respectivement. C'est la loi de Snell-Descartes.

7. Considérer l'oscillateur harmonique

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2.$$

Calculer le propagateur $U(x, t | x_0, t_0) = \langle x | e^{-i\frac{H}{\hbar}t} | x_0 \rangle$, avec la condition initiale $U(x, 0 | x_0, 0) = \delta(x - x_0)$, et exprimer le résultat en termes classiques.

(Considérer le propagateur dans la représentation p)

$$U(x, t | x_0, 0) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{i\frac{px}{\hbar}} a(p, t)$$

et pour a faire un Ansatz semi-classique).

8. Dériver l'équation de la trajectoire d'un rayon lumineux à l'aide du principe de Fermat (équivalent des équations d'Euler-Lagrange).

On suppose que l'on connaît la vitesse de propagation $u(q)$ de la lumière en chaque point de l'espace. Soit q_1 et q_2 deux points de l'espace. et $q(t)$ une paramétrisation d'un rayon lumineux reliant q_1 à q_2 .

Le temps mis par la lumière pour relier q_1 à q_2 est

$$T(q_1, q_2) = \int_{q_1}^{q_2} \frac{d|q|}{u(q)} = \frac{1}{c} \int_{q_1}^{q_2} n(q) d|q|$$

où $n(q) = \frac{c}{u(q)}$ est l'indice de réfraction du milieu au point q .

On définit alors la distance optique, ou le chemin optique

$$S(q_1, q_2) = cT(q_1, q_2) = \int_{q_1}^{q_2} n(q) d|q|.$$

On peut alors écrire

$$S(q_1, q_2) = \int_{t_1}^{t_2} n(q(t)) |\dot{q}| dt.$$

où l'élément de longueur de trajectoire $d|q| = \frac{d|q|}{dt} dt = |\dot{q}| dt$ est généralement noté $ds = |\dot{q}| dt$.

Selon le principe de Fermat, la trajectoire effectivement suivie par la lumière, est celle qui rend extrémale le chemin optique

$$\delta S(q_1, q_2) = 0.$$

Supposons alors que le chemin réel est modifié $q(t) \rightarrow q(t) + \delta q(t)$, avec $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$.

Alors la variation du chemin optique s'écrit

$$\delta S(q_1, q_2) = \int_{t_1}^{t_2} [n(q(t) + \delta q(t)) |\dot{q} + \delta \dot{q}| - n(q(t)) |\dot{q}|] dt$$

Clairement

$$n(q(t) + \delta q(t)) = n(q) + \nabla n(q) \cdot \delta q$$

et

$$\begin{aligned} |\dot{q} + \delta \dot{q}| &= \left(\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2 + \dot{q}_3^2 + 2\dot{q}_1 \delta \dot{q}_1 + 2\dot{q}_2 \delta \dot{q}_2 + 2\dot{q}_3 \delta \dot{q}_3 + o(\delta \dot{q}^2) \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\simeq |\dot{q}| \left(1 + \frac{2\dot{q} \cdot \delta \dot{q}}{|\dot{q}|^2} \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\simeq |\dot{q}| \left(1 + \frac{\dot{q} \cdot \delta \dot{q}}{|\dot{q}|^2} \right) \\ &= |\dot{q}| + \frac{\dot{q} \cdot \delta \dot{q}}{|\dot{q}|} \end{aligned}$$

Ainsi

$$\begin{aligned} \delta S(q_1, q_2) &= \int_{t_1}^{t_2} \left[(n(q) + \nabla n(q) \cdot \delta q) \left(|\dot{q}| + \frac{\dot{q} \cdot \delta \dot{q}}{|\dot{q}|} \right) - n(q) |\dot{q}| \right] dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left[\nabla n(q) \cdot \delta q |\dot{q}| + n(q) \frac{\dot{q} \cdot \delta \dot{q}}{|\dot{q}|} \right] dt \end{aligned}$$

on les termes en δq^2 ont été négligés. Intégrons le dernier terme par partie en supprimant la dérivée de $\delta \dot{q}$

$$\delta S(q_1, q_2) = \int_{t_1}^{t_2} \left[\nabla n(q) |\dot{q}| - \frac{d}{dt} \left(n(q) \frac{\dot{q}}{|\dot{q}|} \right) \right] \cdot \delta q dt + \left[n(q) \frac{\dot{q}}{|\dot{q}|} \delta q \right]_{t_1}^{t_2}$$

Le terme intégré (le dernier terme) est nul, à cause des conditions aux limites de δq . Il reste ainsi

$$\delta S(q_1, q_2) = \int_{t_1}^{t_2} \left[\nabla n(q) |\dot{q}| - \frac{d}{dt} \left(n(q) \frac{\dot{q}}{|\dot{q}|} \right) \right] \cdot \delta q dt$$

Le principe de Fermat affirme que la trajectoire physique annule cette variation, pour tout δq infinitésimal. Il en découle que l'intégrand est nul

$$\delta S(q_1, q_2) = 0 \Rightarrow \nabla n(q)|\dot{q}| - \frac{d}{dt}\left(n(q)\frac{\dot{q}}{|\dot{q}|}\right) = 0.$$

Ainsi

$$\frac{d}{dt}\left(n(q)\frac{\dot{q}}{|\dot{q}|}\right) = \nabla n(q)|\dot{q}|.$$

En divisant les deux membres par $|\dot{q}|$ et en utilisant $ds = |\dot{q}|dt$, on obtient

$$\frac{d}{|\dot{q}|dt}\left(n(q)\frac{dq}{|\dot{q}|dt}\right) = \nabla n(q)$$

soit

$$\boxed{\frac{d}{ds}\left(n(q)\frac{dq}{ds}\right) = \nabla n(q).}$$

9. oscillateur harmonique

(a) Calculer les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique par WKB.

Il y a en général deux points tournants, en $q = -a$ et $q = a$.

$q = -a$: La fonction d'onde sen $q = -a$ s'écrit

$$\psi_{-a}^{\text{gauche}}(q) = \sqrt{\frac{z-a(q)}{p(q)}} \left[A'_{-a} I_{\frac{1}{3}}(z-a(q)) + B'_{-a} K_{\frac{1}{3}}(z-a(q)) \right]$$

$$\psi_{-a}^{\text{droite}}(q) = \sqrt{\frac{z-a(q)}{p(q)}} \left[A_{-a} J_{\frac{1}{3}}(z-a(q)) + B_{-a} J_{-\frac{1}{3}}(z-a(q)) \right]$$

Pour $q \rightarrow -\infty$, $z-a(q) \rightarrow \infty$ et comme on veut alors $\psi_{-a}^{\text{gauche}}(q) \rightarrow 0$, en développant asymptotiquement les fonctions de Bessel

$$I_\nu(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} e^z, \quad K_\nu(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} e^{-z}$$

on voit qu'il faut prendre $A'_{-a} = 0$.

Ainsi

$$\psi_{-a}^{\text{gauche}}(q) = \sqrt{\frac{z-a(q)}{p(q)}} B'_{-a} K_{\frac{1}{3}}(z-a(q))$$

Les formules de raccordement impliquent alors

$$\begin{cases} A_{-a} &= \frac{\pi}{\sqrt{3}} B'_{-a} \\ B_{-a} &= \frac{\pi}{\sqrt{3}} B'_{-a} \end{cases}$$

Ainsi

$$\psi_{-a}^{\text{droite}}(q) = \frac{\pi}{\sqrt{3}} B'_{-a} \sqrt{\frac{z-a(q)}{p(q)}} \left[J_{\frac{1}{3}}(z-a(q)) + J_{-\frac{1}{3}}(z-a(q)) \right]$$

$q = a$: En procédant de la même manière, on trouve

$$\psi_a^{\text{gauche}}(q) = \frac{\pi}{\sqrt{3}} B'_a \sqrt{\frac{z_a(q)}{p(q)}} \left[J_{\frac{1}{3}}(z_a(q)) + J_{-\frac{1}{3}}(z_a(q)) \right]$$

$-a \leq q \leq a$: Or dans le domaine II les deux fonctions doivent coïncider

$$B'_{-a} \sqrt{\frac{z_{-a}(q)}{p(q)}} \left[J_{\frac{1}{3}}(z_{-a}(q)) + J_{-\frac{1}{3}}(z_{-a}(q)) \right] = B'_a \sqrt{\frac{z_a(q)}{p(q)}} \left[J_{\frac{1}{3}}(z_a(q)) + J_{-\frac{1}{3}}(z_a(q)) \right].$$

Si q est assez loin des points tournants, comme \hbar est petit, z_a et z_{-a} sont très grands et on peut développer asymptotiquement les fonctions J_ν

$$J_\nu(z) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2}\nu\right)$$

Ainsi

$$B'_{-a} \frac{1}{\sqrt{p(q)}} \left[\cos\left(z_{-a} - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{6}\right) + \cos\left(z_{-a} - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{6}\right) \right] = B'_a \frac{1}{\sqrt{p(q)}} \left[\cos\left(z_a - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{6}\right) + \cos\left(z_a - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{6}\right) \right].$$

en utilisant l'identité

$$\cos(\alpha) + \cos(\beta) = 2 \cos\left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right) \cos\left(\frac{\alpha - \beta}{2}\right)$$

on obtient

$$B'_{-a} \cos\left(z_{-a} - \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(\frac{\pi}{6}\right) = B'_a \cos\left(z_a - \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(\frac{\pi}{6}\right)$$

soit

$$B'_{-a} \cos\left(z_{-a} - \frac{\pi}{4}\right) = B'_a \cos\left(z_a - \frac{\pi}{4}\right)$$

i. Si $B'_{-a} = B'_a$

$$z_{-a} - \frac{\pi}{4} = -z_a + \frac{\pi}{4} + 2k\pi$$

soit

$$z_{-a} + z_a = \frac{I}{2\hbar} = \frac{\pi}{2} + k2\pi$$

et

$$\boxed{I = 2\pi\hbar\left(\frac{1}{2} + 2k\right)}$$

ii. Si $B'_{-a} = -B'_a$

$$z_{-a} - \frac{\pi}{4} = -z_a + \frac{\pi}{4} + (2k + 1)\pi$$

soit

$$z_{-a} + z_a = \frac{I}{2\hbar} = \frac{\pi}{2} + (2k + 1)\pi$$

et

$$\boxed{I = 2\pi\hbar\left(\frac{1}{2} + 2k + 1\right)}$$

En résumé, on peut écrire que si $B'_a = (-1)^n B'_{-a}$, alors

$$I = 2\pi\hbar\left(\frac{1}{2} + n\right)$$

Or

$$I = 2 \int_{-a}^a p(q) dq = 4 \int_0^a p(q) dq$$

pour l'oscillateur harmonique

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2$$

On peut poser

$$\begin{cases} p = \sqrt{2mE} \sin(\theta) \\ q = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \cos(\theta) \end{cases} \Rightarrow dq = -\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \sin(\theta) d\theta$$

Les conditions aux bords sont

$$\begin{cases} q = 0 \rightarrow \theta = \frac{\pi}{2} \\ q = a \rightarrow \theta = 0 \end{cases}$$

et donc

$$I = -4 \int_{\frac{\pi}{2}}^0 \sqrt{2mE} \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \sin(\theta) d\theta = 4 \frac{E}{\omega} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (1 - \cos(2\theta)) d\theta = 2\pi \frac{E}{\omega}$$

Finalement, on obtient

$$2\pi \frac{E}{\omega} = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

soit

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

- (b) idem pour l'oscillateur anharmonique $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda x^4$ à grande énergie, à l'aide de la formule semi-classique.

Dans le cas de l'oscillateur anharmonique, en posant $\lambda > 0$, on a encore

$$I = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

mais avec

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 + \lambda q^4 = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2 + \lambda a^4$$

Naïvement

$$p = \sqrt{2mE - m\omega^2 q^2 - 2m\lambda q^4}$$

et

$$I = 4 \int_0^a p dq = \int_0^a \sqrt{2mE - m\omega^2 q^2 - 2m\lambda q^4} dq$$

10. **Mur et champ électrique** Soit le potentiel $V(x) = gx$ pour $x > 0$ et $V(x) = \infty$ sinon. Calculer les niveaux d'énergie par *WKB*.

Avec

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x < 0 \\ gx & \end{cases}$$

et $\psi(0) = 0$ on a un point tournant en $a = \frac{E}{g}$ et

$$p^2(x) = 2m(E - gx) = 2mg\left(\frac{E}{g} - x\right)$$

On a alors

$$z_a(x) = \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(q) dq \right| = \frac{1}{\hbar} \left| 2mg \int_a^x \sqrt{\frac{E}{g} - q} dq \right| = \frac{1}{\hbar} \frac{2}{3} \frac{1}{2mg} (2m(E - gx))^{\frac{3}{2}}$$

soit

$$z_a(x) = \frac{(2m(E - gx))^{\frac{3}{2}}}{3mg\hbar}$$

Dans la zone II ($x > a$)

$$\psi_{II}(x) = \sqrt{\frac{z_a(x)}{p(x)}} \left(A' I_{\frac{1}{3}}(z_a(x)) + B' K_{\frac{1}{3}}(z_a(x)) \right)$$

et avec le comportement asymptotique lorsque $x \rightarrow \infty$, on a $I_{\frac{1}{3}}(z) \simeq e^z$, et on doit prendre $A' = 0$ pour que $\psi_{II}(x) \rightarrow 0$. Ainsi

$$\psi_{II}(x) = B' = \sqrt{\frac{z_a(x)}{p(x)}} K_{\frac{1}{3}}(z_a(x)).$$

Dans la zone I ($0 \leq x \leq a$)

$$\psi_I(x) = \sqrt{\frac{z_a(x)}{p(x)}} \left(A J_{\frac{1}{3}}(z_a) + B J_{-\frac{1}{3}}(z_a) \right)$$

et en utilisant les formules de connexions

$$\begin{cases} A &= A' - B' \frac{\pi}{\sqrt{3}} \\ B &= B' \frac{\pi}{\sqrt{3}} \end{cases}$$

on trouve

$$\psi_I(x) = B' \frac{\pi}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{z_a(x)}{p(x)}} \left(J_{\frac{1}{3}}(z_a) + J_{-\frac{1}{3}}(z_a) \right).$$

La condition de quantification est obtenue par

$$\psi_I(0) = 0 \Rightarrow J_{\frac{1}{3}}(z_a(0)) + J_{-\frac{1}{3}}(z_a(0)) = 0$$

et pour \hbar petit, c'est-à-dire E grand, z_a est grand et la condition précédente devient

$$\cos\left(z_a - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{6}\right) + \cos\left(z_a - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{6}\right) = 0$$

soit

$$\cos\left(z_a - \frac{5\pi}{12}\right) = -\cos\left(z_a - \frac{\pi}{12}\right)$$

d'où

$$z_a - \frac{5\pi}{12} = \pi - \left(z_a - \frac{\pi}{12}\right) + k2\pi, \quad k \in \mathbb{Z}$$

et donc

$$2z_a(0) = \frac{3\pi}{2} + k2\pi$$

soit

$$\frac{(2mE)^{\frac{3}{2}}}{2mg\hbar} = \left(k + \frac{3}{4}\right)\pi$$

et

$$E_k = \frac{1}{2m} \left[3mg\hbar \left(k + \frac{3}{4}\right)\pi \right]^{\frac{2}{3}}.$$

L'action est, quant à elle, donnée par

$$\begin{aligned} I &= 2 \int_0^a p \, dq = 2z_a(0)\hbar \\ &= \left(\frac{3}{2} + 2k\right)\hbar \end{aligned}$$

soit

$$I = \left(k + \frac{3}{4}\right)2\pi\hbar.$$

11. **Double puits** Soit un potentiel $V(x) = V(-x)$ pair possédant deux minima en $\pm c$ de profondeur V_0 . On peut se ramener, par symétrie, à l'équation de Schrödinger sur le demi-axe positif, avec les conditions aux limites $\psi'(0) = 0$ ou $\psi(0) = 0$ suivant que ψ est paire ou impaire respectivement. L'état fondamental ψ_0 est pair (car l'hamiltonien est pair et il commute avec l'opérateur parité). Le premier état excité est alors impaire (car il doit posséder un zéro et que ψ est soit paire, soit impaire).

- (a) Calculer E_0 en limite semi-classique.
 (b) Montrer l'égalité

$$E_1 - E_0 = 2\hbar\omega(I)e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a p(q) \, dq}$$

avec $p(q) = \sqrt{2m|V(q) - E_0|}$ et où $\omega(I)$ est la fréquence du mouvement classique entre les points tournants (a, b) (quand $E_0 \simeq V_0$, alors $\omega \simeq \sqrt{V''(c)}$).

(Indications :

- i) Écrire les fonctions d'onde dans les différentes régions $I = (0, a)$, $II = (a, b)$, $III = (b, \infty)$
- ii) Déterminer les coefficients dans la région I en fonction des coefficients dans III .
- iii) Imposer les conditions aux limites et utiliser le fait que \hbar est petit.
- iv) Passer des actions aux énergies.)

En utilisant la symétrie, considérons le cas $x \geq 0$. Dans ce cas, si E est inférieur au maximum en $x = 0$ et supérieur au minimum en $x = c$, on a deux points tournants, $a < c < b$.

— **pour a** : On a

$$\psi_I(x) = \sqrt{\frac{z_a(x)}{p(x)}} \left[A'_a I_{\frac{1}{3}}(z_a) + B'_a K_{\frac{1}{3}}(z_a) \right]$$

et

$$\psi_{II}^a(x) = \sqrt{\frac{z_a(x)}{p(x)}} \left[A_a J_{\frac{1}{3}}(z_a) + B_a J_{-\frac{1}{3}}(z_a) \right]$$

avec

$$z_a(x) = \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(q) dq \right|$$

et avec les formules de raccordement et en utilisant la condition de parité à l'origine $\psi_I(0) = 0$

$$\begin{cases} A_a &= A'_a - B'_a \frac{\pi}{\sqrt{3}} \\ B_a &= B'_a \frac{\pi}{\sqrt{3}} \end{cases}$$

— **pour b** : On a

$$\psi_{III}(x) = \sqrt{\frac{z_b(x)}{p(x)}} \left[A'_b I_{\frac{1}{3}}(z_b) + B'_b K_{\frac{1}{3}}(z_b) \right]$$

et

$$\psi_{II}^b(x) = \sqrt{\frac{z_b(x)}{p(x)}} \left[A_b J_{\frac{1}{3}}(z_b) + B_b J_{-\frac{1}{3}}(z_b) \right]$$

avec les formules de raccordement en utilisant $\psi_{III}(x) \rightarrow 0$ lorsque $x \rightarrow \infty$, et pour z_b une formule analogue à celle de z_a

$$\begin{cases} A_b &= A'_b - B'_b \frac{\pi}{\sqrt{3}} \\ B_b &= B'_b \frac{\pi}{\sqrt{3}} \end{cases}$$

On a de plus

$$z_a + z_b = \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(q) dq = \frac{1}{\hbar} I.$$

On obtient les relations

$$\left(e^{-i\frac{\pi}{3}} + 1 \right) B'_a - e^{-i\frac{\pi}{3}} \frac{\sqrt{3}}{\pi} A'_a - e^{-i\frac{I}{2\hbar}} B'_b \left(e^{-i\frac{\pi}{3}} + 1 \right) = 0 \quad (\text{A.1})$$

$$\left(1 + e^{i\frac{\pi}{3}} \right) B'_a - e^{i\frac{\pi}{3}} \frac{\sqrt{3}}{\pi} A'_a - e^{i\frac{I}{2\hbar}} B'_b \left(1 + e^{i\frac{\pi}{3}} \right) = 0 \quad (\text{A.2})$$

En soustrayant ces deux relations (A.1)–(A.2), on obtient

$$\left(e^{-i\frac{\pi}{3}} - e^{i\frac{\pi}{3}} \right) B'_a - e^{-i\frac{I}{2\hbar}} B'_b \left(e^{-i\frac{\pi}{3}} + 1 \right) + e^{i\frac{I}{2\hbar}} B'_b \left(1 + e^{i\frac{\pi}{3}} \right) = 0$$

et avec $\sin(\pi/3) = \sqrt{3}/2$ on trouve

$$B'_a = -\frac{2}{\sqrt{3}} B'_b \left[\sin\left(\frac{I}{2\hbar}\right) + \sin\left(\frac{I}{2\hbar} + \frac{\pi}{3}\right) \right]$$

soit

$$B'_a = -\frac{2}{\sqrt{3}}B'_b \left[\sin\left(\frac{I}{2\hbar}\right)\left(1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\right) + \frac{1}{2}\cos\left(\frac{I}{2\hbar}\right) \right]$$

Dans la relation (A.1) on obtient

$$\begin{aligned} A'_a &= \frac{\pi}{\sqrt{3}}e^{i\frac{\pi}{3}} \left[\left(1 + e^{-i\frac{\pi}{3}}\right)\left(B'_b e^{-i\frac{I}{2\hbar}} - B'_a\right) \right] \\ &= \frac{\pi}{\sqrt{3}}e^{i\frac{\pi}{3}}B'_b \left[\left(1 + e^{-i\frac{\pi}{3}}\right)\left(e^{-i\frac{I}{2\hbar}} + \frac{2}{\sqrt{3}}\left[\sin\left(\frac{I}{2\hbar}\right) + \sin\left(\frac{\pi}{3} + \frac{I}{2\hbar}\right)\right]\right) \right] \\ &= \frac{\pi}{\sqrt{3}}B'_b \left[\left(e^{i\frac{\pi}{3}} + 1\right)\left(e^{-i\frac{I}{2\hbar}} + \frac{2}{\sqrt{3}}\left[\sin\left(\frac{I}{2\hbar}\right) + \sin\left(\frac{\pi}{3} + \frac{I}{2\hbar}\right)\right]\right) \right] \end{aligned}$$

A.2 Le théorème adiabatique

A.3 Théorie classique des collisions

1. (S.4.1. Collision classique) Calculer la section efficace différentielle et totale dans le cas où le potentiel $V(r)$ est

(a) cœur dur

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & r \leq d \\ 0 & r > d \end{cases}$$

Dans le cas d'un cœur dur on a

$$b = d \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

d'où

$$db = \frac{1}{2}d \cos(\theta/2)d\theta$$

et

$$\sigma(\Omega) = \left| \frac{b db}{\sin(\theta) d\theta} \right| = \left| \frac{d^2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) d\theta}{2 \sin(\theta) d\theta} \right| = \frac{d^2}{4}$$

et

$$\sigma_{\text{tot}} = \pi \frac{d^2}{2} \int_0^\pi \sin(\theta) d\theta = \pi d^2.$$

(b) coulombien $V(r) = \frac{qq'}{r}$

Dans ce cas, on a,

$$\frac{d\phi}{dr} = \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{qq'}{\epsilon r}}}$$

et pour $r < a$, avec a la distance d'approche minimale

$$\phi(r) = \int_{-\infty}^r \frac{b dr'}{r'^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r'^2} - \frac{qq'}{\epsilon r'}}}$$

et pour $r > a$

$$\phi(r) = \int_a^r \frac{b dr'}{r'^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r'^2} - \frac{qq'}{\epsilon r'}}$$

Ainsi

$$\begin{aligned} \theta &= \pi - \phi(+\infty) \\ &= \pi - 2I \end{aligned}$$

avec

$$I = \int_a^{+\infty} \frac{b dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{qq'}{\epsilon r}}}$$

Posons $\alpha = \frac{qq'}{2Eb^2}$. On a alors, en posant $x = \frac{1}{r}$ et $a = \frac{qq'}{2E} + b\sqrt{1 + \alpha^2}$

$$\begin{aligned} I &= \int_a^{+\infty} \frac{b dr}{r^2 \sqrt{1 + \alpha^2 b^2 - (\frac{b}{r} + b\alpha)}} \\ &= b \int_0^{\frac{1}{a}} \frac{dx}{\sqrt{1 + (\alpha b)^2 - b^2(x + \alpha)^2}} \end{aligned}$$

Posons alors

$$x + \alpha = \frac{\sqrt{1 + (\alpha b)^2}}{b} y$$

On obtient alors

$$\theta = \pi - 2 \int_{\alpha b}^{\sqrt{1 + b^2 \alpha^2}} \frac{dy}{\sqrt{1 - y^2}} = \pi - 2(\arcsin(1) - \arcsin(\frac{\alpha b}{\sqrt{1 + \alpha^2 b^2}}))$$

Ainsi

$$\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{\alpha b}{\sqrt{1 + \alpha^2 b^2}}$$

Avec

$$(\alpha b)^2 = \tan^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad \text{et} \quad b = \frac{qq'}{2E} \cotan\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

on obtient

$$\sigma = \left| \frac{b db}{\sin(\theta) d\theta} \right| = \left(\frac{qq'}{2E} \right)^2 \frac{\cotan\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sin(\theta)} \frac{d}{d\theta} \cotan\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

d'où

$$\sigma = \left(\frac{qq'}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}$$

2. (S.4.2. **Fonction de Green libre**) Calculer, par la méthode des résidus, la fonction de Green

$$G_z^0(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{z - k^2} d^3k$$

d'une particule libre (noter que $G_z(\vec{r}) = G_z(|\vec{r}|)$). En déduire la section efficace du potentiel de Yukawa dans l'approximation de Born.

Prenons k selon z

$$\begin{aligned}
 G_z^0(\vec{r}) &= -\frac{1}{(2\pi)^3} \int d(\cos(\theta)) d\phi k^2 dk \frac{e^{ikr \cos(\theta)}}{z - k^2} \\
 &= -\frac{2\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \int_1^{-1} d(\cos(\theta)) dk k^2 \frac{e^{ikr \cos(\theta)}}{z - k^2} \\
 &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \frac{k^2}{ikr} \frac{e^{-ikr} - e^{ikr}}{z - k^2} \\
 &= \frac{2}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \frac{k \sin(kr)}{r(z - k^2)} \\
 &= -\frac{2}{(2\pi)^2} \frac{1}{r} \partial_r \int_0^\infty dk \frac{\cos(kr)}{z - k^2} \\
 &= -\frac{2}{(2\pi)^2} \frac{1}{r} \partial_r \int_{-\infty}^\infty dk \frac{1}{2} \frac{e^{ikr}}{z - k^2} \\
 &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{r} \partial_r \int_{-\infty}^\infty dk f(k)
 \end{aligned}$$

où $f(k) = \frac{e^{ikr}}{z - k^2}$.

Cette dernière intégrale se calcule par la méthode des résidus. Si $\Im(z) > 0$, alors $z = \zeta + i\epsilon$ et l'intégrand a un pôle en $k = \sqrt{z}$. On obtient ainsi

$$\text{Res}(f(k), \sqrt{z}) = 2\pi i f(k)(k - \sqrt{z}) \Big|_{k=\sqrt{z}}$$

soit

$$G_z^0(\vec{r}) = -(2\pi i) \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{r} \partial_r \left[-\frac{e^{ikr}}{\sqrt{z} + k} \right]_{k=\sqrt{z}} = -\frac{e^{i\sqrt{z}r}}{4\pi r}$$

Si $\Im(z) < 0$, alors $z = \zeta - i\epsilon$ et le pôle se trouve en $k = -\sqrt{z}$ avec

$$G_z^0(\vec{r}) = -(2\pi i) \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{r} \partial_r \left[\frac{e^{ikr}}{\sqrt{z} - k} \right]_{k=-\sqrt{z}} = -\frac{e^{-i\sqrt{z}r}}{4\pi r}$$

Ainsi, à la limite $\epsilon \rightarrow 0$ on obtient

$$\boxed{\lim_{\epsilon \rightarrow 0} G_z^0(\vec{r}) = G_\zeta^\pm(\vec{r}) = -\frac{e^{\pm i\sqrt{\zeta}r}}{4\pi r}}$$

3. S.5.1. On considère la diffusion d'électrons rapides par des atomes. En supposant celle-ci élastique, on peut considérer que le potentiel d'interaction des atomes avec les électrons est donné par

$$V(r) = -e\varphi(r)$$

où $\varphi(r)$ est une solution de l'équation de Poisson $\Delta\varphi = -4\pi\rho(r)$ et $\rho(r)$ est la densité de charge de l'atome

$$\rho(r) = Ze\delta(r) - en(|\vec{r}|)$$

et $n(r)$ est la densité de charge électronique.

Calculer la section efficace dans l'approximation de Born.

Discuter en particulier les cas

(a) $k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ petit.

(b) $k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ grand.

(c) Atome d'hydrogène dans l'état fondamental $n(r) = \left|\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r}\right|^2$

[contenu...](#)

4. S.5.2. Étudier la diffusion d'une onde par une sphère dure. Calculer δ_l .

5. S.5.3. Calculer δ_l dans le cas où $U(r)$ est un puits attractif

$$U(r) = \begin{cases} -\lambda^2 & r < d \\ 0 & r \geq d. \end{cases}$$

[contenu...](#)

6. S.5.4. Calculer δ_0 et la fonction d'onde ψ_0 dans le cas où $U(r)$ est un puits

(a) attractif

(b) répulsif

$$U(r) = \begin{cases} \lambda^2 & r < d \\ 0 & r \geq d \end{cases}$$

- i) Calculer la limite de haute énergie et comparer avec l'approximation de Born.
- ii) Calculer la limite de basse énergie dans le cas répulsif. Comparer avec le cas des sphères dures.
- iii) Expliquer la différence physiquement.
- iv) Calculer la limite de basse énergie dans le cas attractif, lorsque le potentiel n'a pas d'état lié.
- v) Calculer la section efficace $\sigma_0(\theta)$ à basse énergie dans les deux cas, répulsifs et attractifs.

[contenu...](#)

Annexe B

Résultats divers

B.1 Brachistochrone

Ce problème variationnel consiste à déterminer la trajectoire la plus rapide, qui mène une masse ponctuelle m sujette à la pesanteur, d'un point $A(a_1, a_2)$ à un point $B(b_1, b_2)$ dans un plan vertical.

Le temps de parcours sur un élément de trajectoire δs est clairement

$$\delta t = \frac{\delta s}{v}$$

où la vitesse v est déterminée par l'équation de conservation de l'énergie mécanique

$$E = mga_2 = \frac{1}{2}mv^2 + mgy \Leftrightarrow v = \sqrt{\frac{2E}{m} - 2gy}$$

Prenons $A = O(0, 0)$ et avec $E = 0$ on obtient (en choisissant Oy vers le bas)

$$\delta t = \frac{\sqrt{dx^2 + dy^2}}{\sqrt{2gy}} = \frac{1}{\sqrt{2g}} \sqrt{\frac{1 + y'^2}{y}} dx = f(y, y') dx$$

et le temps qui s'écoule lorsque la masse m passe de A jusqu'à B en suivant la trajectoire $y = y(x)$ est ainsi

$$T(A, B) = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_0^{b_1} \sqrt{\frac{1 + y'^2}{y}} dx = \int_{a_1}^{b_1} f(y, y') dx$$

Le chemin optimal est celui qui rend stationnaire le temps de parcours

$$\delta T(A, B) = 0 = \delta \int_{a_1}^{b_1} f(y, y') dx$$

soit celui pour lequel

$$\int_{a_1}^{b_1} f(y + \delta y, y' + \delta y') - f(y, y') dx = 0$$

avec $\delta y(a_1) = \delta y(b_1) = 0$.

On a alors

$$\int_{a_1}^{b_1} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \delta y + \frac{\partial f}{\partial y'} \delta y' \right) dx = 0$$

et en intégrant par partie le dernier terme et en utilisant $\delta y(a_1) = \delta y(b_1) = 0$, on obtient

$$\int_{a_1}^{b_1} \left(\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'} \right) \delta y dx$$

Comme on veut que ce résultat reste vrai pour un quelconque écart δy , il faut que le terme entre parenthèse soit nul

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'} = 0$$

or le membre de gauche peut s'écrire sous la forme d'une dérivée (selon Beltrami)

$$\frac{d}{dx} \left(f - y' \frac{\partial f}{\partial y'} \right) = 0$$

en effet, on a alors

$$\frac{\partial f}{\partial y} y' + \frac{\partial f}{\partial y'} y'' - y'' \frac{\partial f}{\partial y'} - y' \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'} = y' \left(\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'} \right)$$

Ainsi, on est ramené à résoudre (en éliminant $\sqrt{\frac{m}{2E}}$)

$$\sqrt{\frac{1+y'^2}{y}} - y' \frac{\partial}{\partial y'} \sqrt{\frac{1+y'^2}{y}} = K$$

où K est une constante. On obtient

$$\sqrt{\frac{1+y'^2}{y}} - y' \frac{y'}{\sqrt{(1+y'^2)y}} = K$$

en multipliant l'égalité par le dénominateur de la deuxième fraction

$$1 + y'^2 - y'^2 = K \sqrt{(1+y'^2)y}$$

et en éliminant la racine en posant $\kappa = \frac{1}{K^2}$

$$\kappa = (1 + y'^2)y$$

En isolant y' on trouve

$$y' = \sqrt{\frac{\kappa}{y} - 1}$$

et ainsi

$$dx = \sqrt{\frac{y}{\kappa - y}} dy$$

En effectuant le changement de variable $v = \sqrt{\frac{y}{\kappa - y}}$, on obtient

$$y = \kappa \frac{v^2}{1 + v^2} \quad dy = 2\kappa \frac{v dv}{(1 + v^2)^2}$$

Ainsi, avec $x(A) = a_1 = 0$ et $y(A) = a_2 = 0$, on a $v_1 = 0$ et

$$x = 2\kappa \int_0^{v_2} \frac{v^2}{(1 + v^2)^2} dv$$

En intégrant par parties

$$\begin{cases} u &= v \\ dw &= \frac{v}{(1 + v^2)^2} dv \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} du &= dv \\ w &= -\frac{1}{2} \frac{1}{1 + v^2} \end{cases}$$

on obtient

$$x = -\kappa \left[\frac{v}{1+v^2} \right]_0^{v_2} + \kappa \int_0^{v_2} \frac{1}{1+v^2} dv$$

soit, en remplaçant v_2 par v pour alléger l'écriture

$$x = -\kappa \frac{v}{1+v^2} + \kappa \arctan(v)$$

Posons $\theta = \arctan(v)$

$$\tan(\theta) = v = \sqrt{\frac{y}{\kappa - y}} \Leftrightarrow y = \kappa \frac{\tan^2(\theta)}{1 + \tan^2(\theta)} = \kappa \sin^2(\theta)$$

soit

$$y = \frac{\kappa}{2}(1 - \cos(2\theta))$$

De plus, on a

$$\frac{v}{1+v^2} = \tan(\theta) \cos^2(\theta) = \sin(\theta) \cos(\theta) = \frac{1}{2} \sin(2\theta).$$

Ainsi, on peut récrire l'expression de x

$$x = \kappa \left(\theta - \frac{1}{2} \sin(2\theta) \right)$$

soit

$$x = \frac{\kappa}{2}(2\theta - \sin(2\theta))$$

La détermination des constantes κ et θ_B se fait avec les conditions de bords

$$\frac{y_B}{x_B} = \frac{1 - \cos(2\theta_B)}{2\theta_B - \sin(2\theta_B)} = \frac{b_2}{b_1} = m$$

pour trouver θ_B , et avec m la pente de la droite $(AB) = (OB)$.

Une fois θ_B déterminé, on peut déterminer κ avec

$$\kappa = \frac{2b_2}{1 - \cos(2\theta_B)} = \frac{b_2}{\sin^2(\theta_B)}$$

Le temps mis pour atteindre B est alors donné par l'intégrale

$$T(A, B) = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_0^{b_1} \sqrt{\frac{1+y^2}{y}} dx$$

avec

$$\begin{cases} dx = \kappa(1 - \cos(2\theta)) d\theta = 2\kappa \sin^2(\theta) d\theta \\ dy = \kappa \sin(2\theta) d\theta \end{cases} \Rightarrow y' = \frac{dy}{dx} = \cot(\theta)$$

de sorte que

$$\sqrt{\frac{1+y'^2}{y}} dx = \sqrt{\frac{1 + \cot^2(\theta)}{\frac{\kappa}{2}(1 - \cos(2\theta))}} \kappa(1 - \cos(2\theta)) d\theta = \sqrt{2\kappa} \sqrt{\frac{1 - \cos(2\theta)}{\sin^2(\theta)}} d\theta = 2\sqrt{\kappa} d\theta$$

Ainsi

$$T(A, B) = \sqrt{\frac{2\kappa}{g}} \theta_B.$$

Pour comparaison, sur un plan incliné, l'accélération de A jusqu'à B est constante

$$a = g \frac{b_2}{\sqrt{b_1^2 + b_2^2}}$$

et le temps mis pour joindre B

$$T_{\text{p.i.}} = \sqrt{\frac{2\sqrt{b_1^2 + b_2^2}}{a}} = \sqrt{\frac{2(b_1^2 + b_2^2)}{gb_2}}.$$

On peut encore comparer ce résultat à celui obtenu pour une chute verticale, suivi d'une collision élastique propulsant le mobile horizontalement, avec une trajectoire en forme de L. Sur le tronçon vertical

$$t_1 = \sqrt{\frac{2b_2}{g}}, \quad \text{avec une vitesse finale } v_1 = gt_1 = \sqrt{2gb_2}$$

et sur le tronçon horizontal

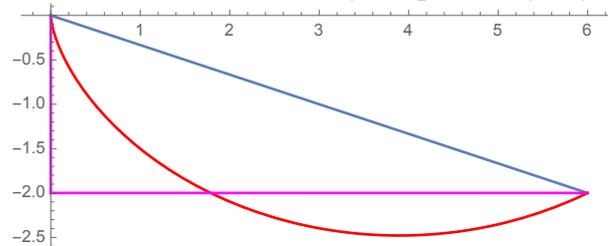
$$t_2 = \frac{b_1}{v_1} = \frac{b_1}{\sqrt{2gb_2}}$$

Le temps total est alors

$$T_L = t_1 + t_2 = \sqrt{\frac{2b_2}{g}} + \frac{b_1}{\sqrt{2gb_2}} = \frac{1}{\sqrt{gb_2}} \left(\sqrt{2}b_2 + \frac{b_1}{\sqrt{2}} \right)$$

Exemple 1

La figure illustre la chute brachistochrone (en rouge) depuis l'origine jusqu'au point $B(6, -2)$.



La valeur des paramètres et la durée du trajet sont

$$\theta_B = 2.02581, \quad \kappa = 2.47875, \quad T = 1.44011 \text{ s.}$$

Sur une trajectoire linéaire (bleue) on aurait un temps de parcours

$$T_{\text{p.i.}} = 2.019275 \text{ s}$$

et sur une trajectoire en L (magenta)

$$T_L = 1.59638 \text{ s.}$$

B.2 Autre dérivation de l'équation de Hamilton-Jacobi

En partant de l'action

$$S = \int_0^t \mathcal{L}(\dot{q}, q, t') dt'$$

où $q = q(t)$ est un chemin qui mène le système physique d'un état $q(0) = A$ à un état $q(t) = B$, et en calculant une variation de l'action en variant le chemin $q \rightarrow q' = q + \delta q$ ainsi que les états finaux et $B \rightarrow B + \delta B$, alors que le trajet s'étend sur un temps $t + \delta t$ on a

$$\delta S = \int_0^{t+\delta t} \mathcal{L}(\dot{q}', q', t') dt' - \int_0^t \mathcal{L}(\dot{q}, q, t') dt'$$

On obtient ainsi

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_t^{t+\delta t} \mathcal{L}(\dot{q}', q', t') dt' + \int_t^{t+\delta t} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \delta q \right] dt' + \int_0^t \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \delta q \right] dt' \\ &= \mathcal{L}(\dot{q}', q', t) \delta t + \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_0^{t+\delta t} + \int_0^{t+\delta t} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) \right] \delta q dt' \end{aligned}$$

La dernière intégrale s'annule sur une trajectoire physique qui satisfait aux équations d'Euler-Lagrange. Il reste ainsi, en définissant l'impulsion $p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}$

$$\delta S = \mathcal{L}(\dot{q}, q, t) \delta t + p(t + \delta t) \delta q(t + \delta t) - p(0) \delta q(0).$$

En décomposant le chemin q' au temps $t + \delta t$ on peut écrire

$$A + \delta A = q(t + \delta t) + \delta q(t + \delta t) = q(t) + \delta q(t)$$

où $\delta q(t) = \delta A$ et où

$$q(t + \delta t) = A + \delta A' \quad \text{et} \quad \delta q(t + \delta t) = \delta A''$$

avec $\delta q(t) = \delta A = \delta A' + \delta A''$. On obtient alors

$$\delta q(t + \delta t) = q(t) - q(t + \delta t) + \delta q(t) = -\dot{q}(t) \delta t + \delta q(t).$$

Ainsi

$$\delta S = \left(\mathcal{L} - p(t) \dot{q}(t) \right) \delta t + p(t) \delta q(t) - p(0) \delta q(0)$$

En définissant l'hamiltonien $\mathcal{H} = p(t) \dot{q}(t) - \mathcal{L}$ et $\delta q(0) = 0$ on obtient

$$\delta S = -\mathcal{H} \delta t + p(t) \delta q(t)$$

Ainsi, en supposant que l'action dépende du temps et de la trajectoire, on a

$$dS = \partial_t S dt + \partial_q S dq$$

ce qui conduit à

$$\boxed{\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} = -\mathcal{H}(q, p) \\ \frac{\partial S}{\partial q} = p \end{cases}}$$

La première relation est l'équation de Hamilton-Jacobi, qui s'écrit, avec la deuxième relation

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\mathcal{H}\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right)$$

B.3 Encore une dérivation de l'équation de Hamilton-Jacobi

Partant de

$$S(q) = \int_0^t \mathcal{L}(\dot{q}, q, t') dt'$$

on a

$$\frac{dS}{dt} = \mathcal{L}(\dot{q}, q, t)$$

En calculant la variation de l'action pour des trajectoires $q = q(t)$ et $q' = q(t) + \delta q(t)$ à point de départ fixe $\delta q(0) = 0$, on obtient

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_0^t \left[\mathcal{L}(\dot{q} + \delta \dot{q}, q + \delta q, t') - \mathcal{L}(\dot{q}, q, t') \right] dt' \\ &= \int_0^t \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \delta q \right] dt' \\ &= \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_0^t + \int_0^t \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) \right] \delta q dt' \\ &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta q(t) \end{aligned}$$

Ce qui conduit à définir

$$p(t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial S}{\partial q}$$

Enfin, partant de la différentielle de l'action S

$$dS = \partial_t S dt + \partial_q S dq$$

et en utilisant les résultats précédents, on en déduit

$$\partial_t S = \frac{dS}{dt} - \partial_q S \dot{q} = \mathcal{L} - p\dot{q}$$

à savoir, en définissant l'hamiltonien $\mathcal{H} = p\dot{q} - \mathcal{L}$,

$$\boxed{\partial_t S = -\mathcal{H}},$$

qui est l'équation de Hamilton-Jacobi.

Index

- équation
 - de Schrödinger
 - dépendente du temps, 3
 - stationnaire, 3
 - de continuité, 7
 - de Hamilton-Jacobi, 4
 - de l'optique géométrique, 5
 - de Riccati, 51
 - eikonale, 5
- états
 - cohérents, 9
- approximation
 - de Born, 40
- barn, 35
- Binet, *voir* formule de Binet
- caustiques, 11
- conservation
 - de l'intensité, 5
- délai, 55
- eikonale, 5
- fonctions
 - de Bessel
 - demi-entière, 44
 - sphérique, 44
 - de Neumann, 46
- formule
 - de Binet, 31
 - de Breit-Wigner, 54
 - de Mott, 58
 - de Rayleigh, 42
 - de Rutherford, 41
- longueur
 - de diffusion, 51
- lorentzienne, *voir* formule de Breit-Wigner
- mbarn, 35
- millibarn, 35
- opérateurs
 - de Möller, 59
- phase
 - de Berry, 27
 - dynamique, 25
 - géométrique, 26
- principe
 - de Fermat, 1
- résonance
 - fenêtre, 54
- règle
 - de Bohr-Sommerfeld, 15
 - de quantification, 15
- section efficace, 34
 - différentielle, 34
 - totale, 34
- solution
 - perturbative, 40
- surface
 - caustique, 7
- temps
 - de retard, 55
- théorème
 - de Levinson, 50
- variable
 - d'action, 15
 - d'angle, 15
- window resonance, *voir* résonance fenêtre