

Les interactions entre atomes dans les gaz quantiques

Cours 2

Éléments de théorie de la diffusion

Jean Dalibard

Chaire *Atomes et rayonnement*

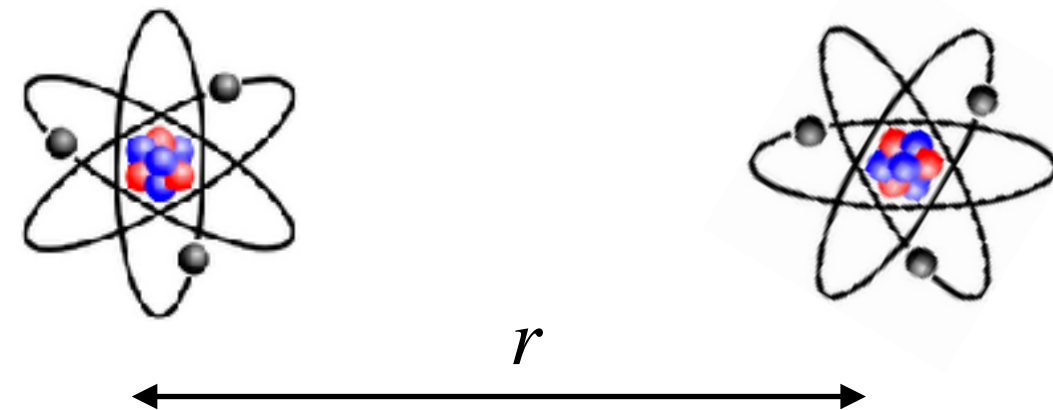
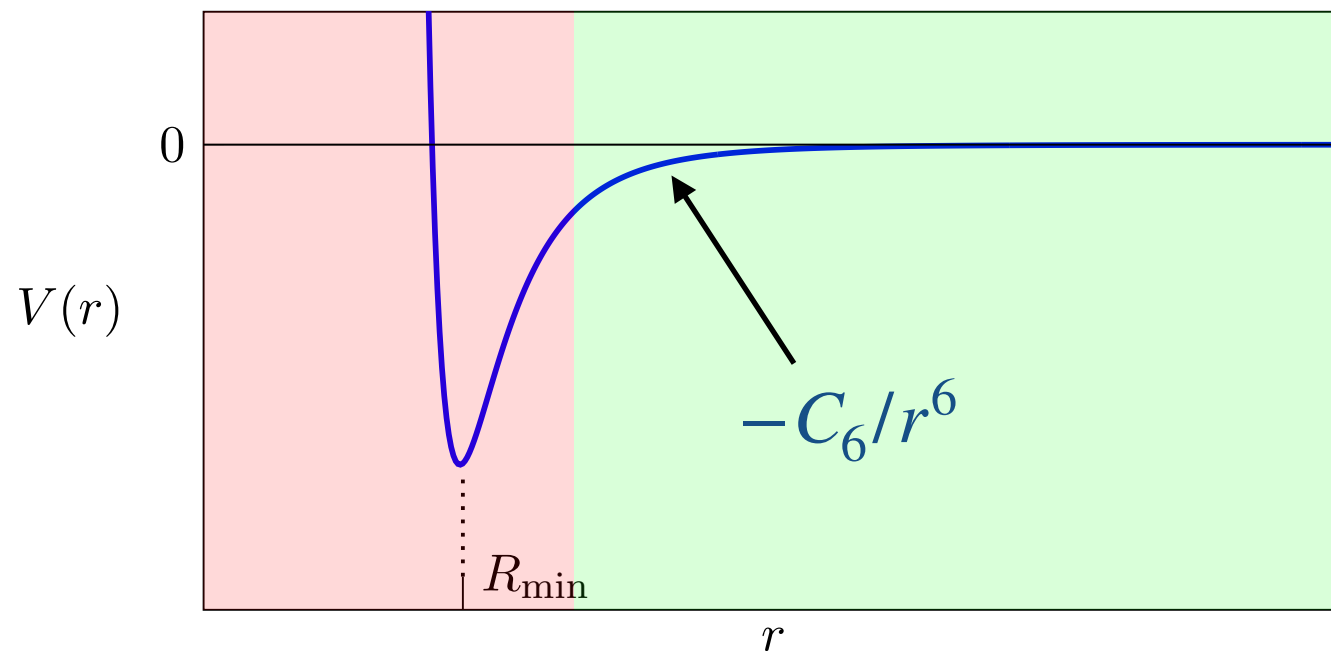
Année 2020-21



COLLÈGE
DE FRANCE
— 1530 —

Le but de ce cours

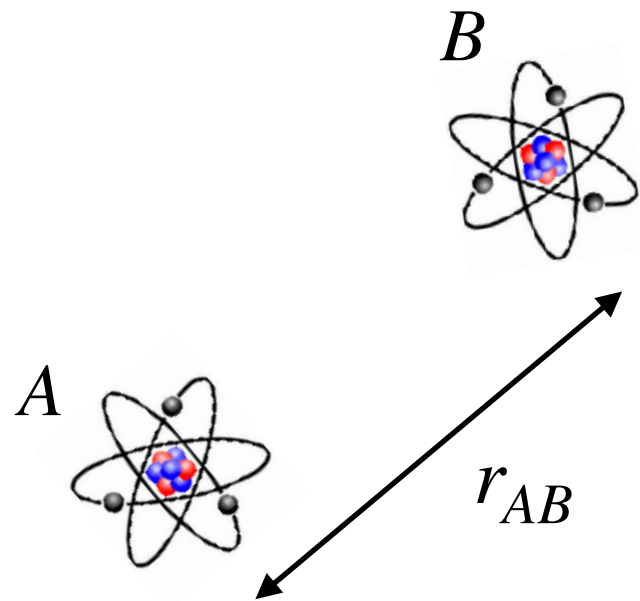
Potentiel d'interaction entre deux atomes neutres (état électronique fondamental)



Comment traiter une collision entre deux atomes interagissant via ce potentiel ?

- Formalisme général : aujourd'hui
- Simplifications émergeant à basse énergie : cours suivant

L'invariance par rotation



Si on néglige l'interaction dipôle-dipôle magnétique, le potentiel d'interaction vérifie :

$$V(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = V(r_{AB})$$

Conservation du moment cinétique relatif, associé au nombre quantique ℓ

Traitement via un développement en ondes partielles :

Un canal de collision (découplé des autres) par valeur de ℓ

Caractérisation par le déphasage $\delta_\ell(k)$ (k : nombre d'onde relatif)

Simplifie la prise en compte de l'indiscernabilité

Bosons sans spin (ou polarisés) : ℓ pair

Fermions polarisés : ℓ impair

1.

Les états stationnaires de diffusion

$\psi_k(\mathbf{r})$: états propres particuliers de l'hamiltonien total
associés à un vecteur d'onde incident $\mathbf{k}$

Le problème à deux corps (classique ou quantique)

Hamiltonien :
$$H_{\text{tot}} = \frac{\mathbf{p}_A^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_B^2}{2m} + V(|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|)$$

Séparation “centre de masse - variable relative”

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_A + \mathbf{r}_B)$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_A + \mathbf{p}_B$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B$$

$$\mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_A - \mathbf{p}_B)$$

respecte les crochets de Poisson ou les commutateurs $[\hat{r}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar \delta_{\alpha\beta}$

Réécriture de l'hamiltonien total : $H_{\text{tot}} = H_{\text{cdm}} + H_{\text{rel}}$

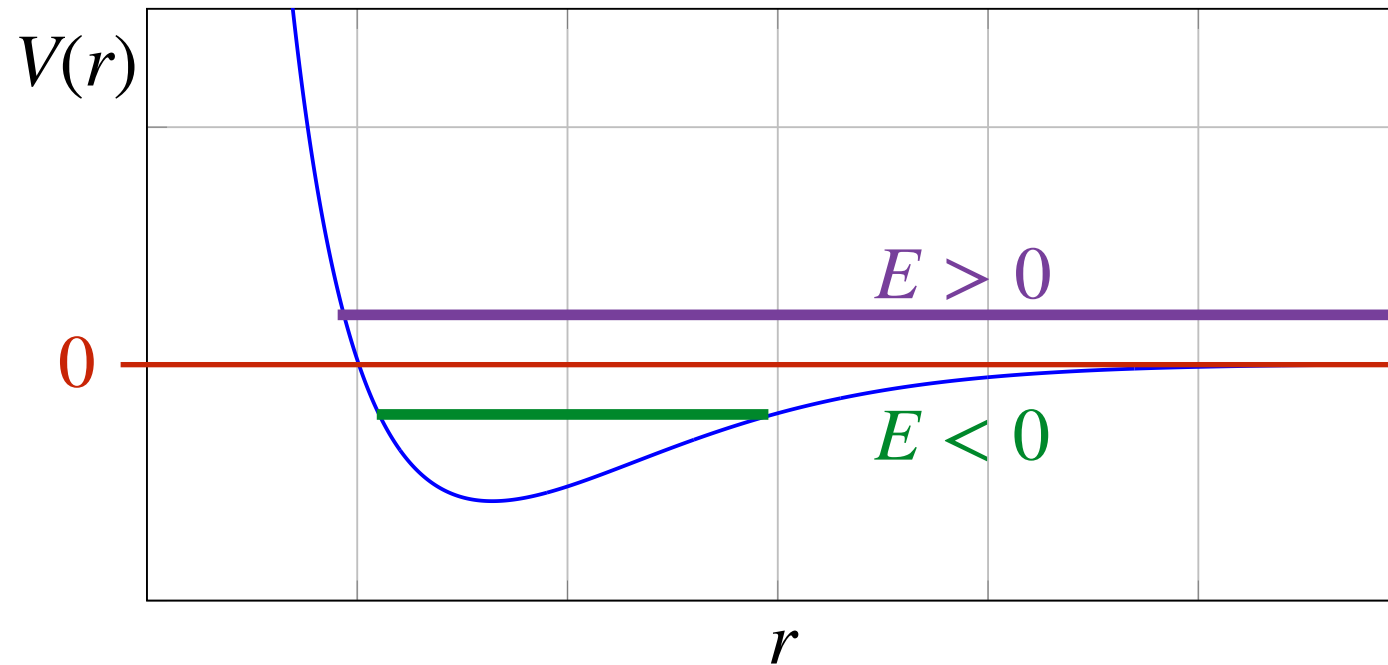
$$H_{\text{cdm}} = \frac{\mathbf{P}^2}{4m}$$

mouvement libre d'une
particule de masse $2m$

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

mouvement à étudier d'une
particule de masse $m_r = m/2$

Etats de diffusion vs. états liés



$E > 0$: états de diffusion, les deux atomes sont asymptotiquement libres

Spectre continu : on posera $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}$ où $k > 0$ est un nombre d'onde

$E < 0$: états liés, formation d'un dimère

Spectre discret, noté E_n , où chaque n correspond à un état de vibration

Etats d'énergie bien définie

On cherche les états propres de l'hamiltonien relatif d'énergie positive

$$\hat{H} \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad \text{avec} \quad \hat{H} \equiv \hat{H}_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

En posant $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}$, on obtient

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

considérée comme une équation différentielle avec le second membre $V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$

On commence par s'intéresser d'abord à l'équation sans second membre ("libre") :

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

Solutions particulières : ondes planes $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$

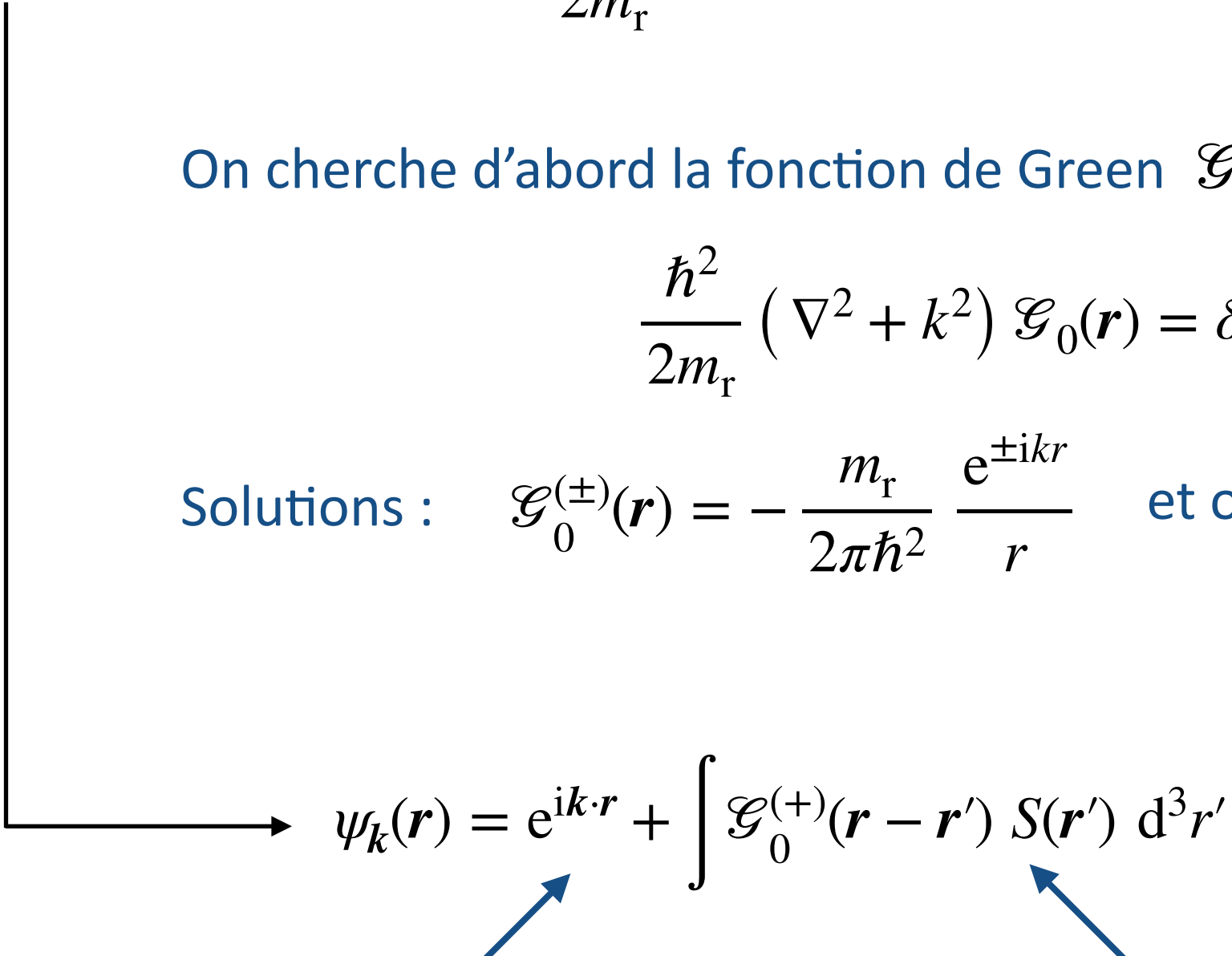
Utilisation de la fonction de Green libre

On veut résoudre $\frac{\hbar^2}{2m_r} (\nabla^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = \text{terme source } S(\mathbf{r})$

On cherche d'abord la fonction de Green $\mathcal{G}_0(\mathbf{r})$ satisfaisant

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

Solutions : $\mathcal{G}_0^{(\pm)}(\mathbf{r}) = -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm ikr}}{r}$ et on va utiliser $\mathcal{G}_0^{(+)}$


$$\psi_k(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \int \mathcal{G}_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') S(\mathbf{r}') d^3r'$$

solution de
l'équation libre

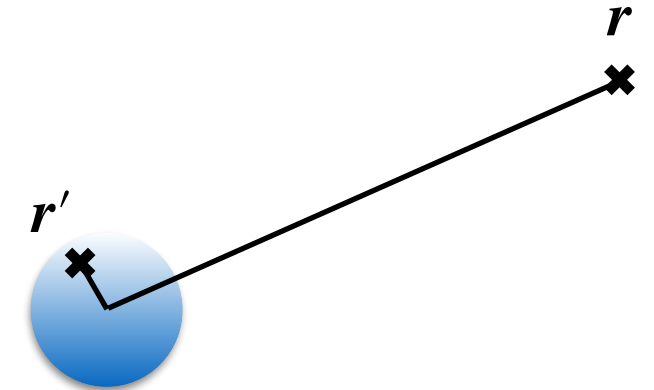
solution particulière de
l'équation avec second membre

Equation intégrale de la diffusion (Lippmann-Schwinger)

Le terme source est ici $S(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$:

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

état stationnaire de diffusion



Equation implicite mais dont l'intérêt est bien réel dès que $V(\mathbf{r})$ a une portée limitée

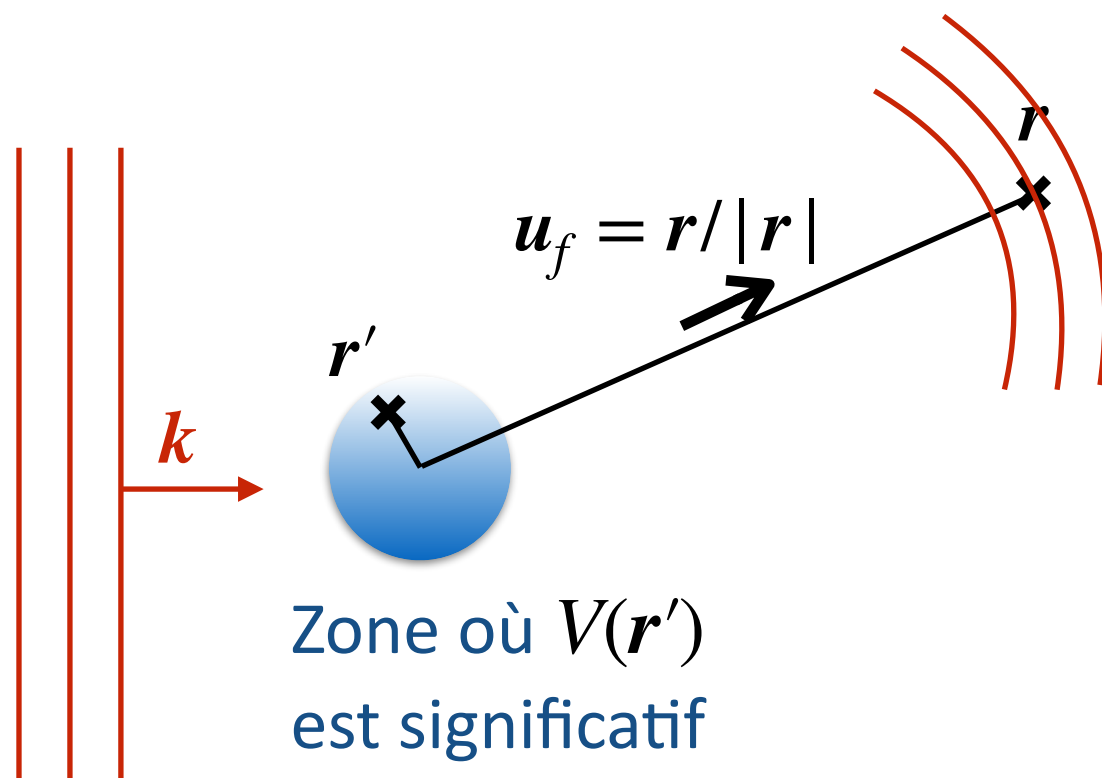
Relie la valeur de ψ en un point $\mathbf{r}$ arbitraire aux valeurs de $\psi(\mathbf{r}')$ en des points $\mathbf{r}'$ où $V(\mathbf{r}')$ prend des valeurs significatives

- Equation de Fredholm du second type : solution unique
- L'ensemble des $\psi_k^{(+)}$ ainsi obtenu est orthonormé
- On peut faire la même chose avec $\mathcal{G}_0^{(-)}$ et définir l'ensemble des $\psi_k^{(-)}$

Forme asymptotique d'un état stationnaire de diffusion

$$\begin{aligned}\psi_k(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int \mathcal{G}_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_k(\mathbf{r}') d^3r' \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi_k(\mathbf{r}') d^3r'\end{aligned}$$

$$\mathcal{G}_0^{(+)}(\mathbf{r}) = -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r}$$



Développement aux grands r

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \sim \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{r}'} \quad \text{pour } r \rightarrow \infty$$

qui conduit à :

$$\psi_k(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\mathbf{k}, \mathbf{u}_f) \frac{e^{ikr}}{r}$$

onde plane incidente
onde sphérique sortante

$$-\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi_k(\mathbf{r}') d^3r'$$

amplitude de diffusion
(facteur angulaire)

L'approximation de Born

Développement perturbatif en puissances du potentiel $V(\vec{r})$

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \underbrace{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}_{\text{ordre 0}} + \int \mathcal{G}_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \underbrace{V(\mathbf{r}') \psi_k(\mathbf{r}')}_{\text{ordre } \geq 1} d^3r'$$

Si on se limite à l'ordre 1 inclus en V , on a:

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

que l'on peut itérer pour aller à des ordres arbitrairement élevés :

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

Critères de convergence subtils... A basse énergie, une condition nécessaire est l'absence d'états liés dans le potentiel $V(\mathbf{r})$

2.

La formulation opératorielle

Formulation qui permet de traiter également des problèmes dépendant du spin, la diffusion de photons par des atomes ou de phonons par des défauts cristallins

L'opérateur de Green $\hat{G}_0$

Formulation opératorielle pour la résolution de $(\hat{H}_0 + \hat{V}) |\psi\rangle = E |\psi\rangle$:

$$\frac{\hbar^2}{2m_r} (\nabla^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad \longleftrightarrow \quad (E - \hat{H}_0) |\psi\rangle = \hat{V} |\psi\rangle$$

avec $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m_r$

Etat stationnaire de diffusion :

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int \mathcal{G}_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}') d^3r' \quad \longleftrightarrow \quad |\psi_k^{(+)}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \hat{G}_0^{(+)}(E) \hat{V} |\psi_k^{(+)}\rangle$$

avec :

$$\langle \mathbf{r} | \hat{G}_0^{(+)} | \mathbf{r}' \rangle = \mathcal{G}_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad \hat{G}_0^{(+)}(E) = \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0_+}$$

La limite 0_+ est à comprendre au sens des distributions :

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

L'opérateur de Green $\hat{G}$

Passage de $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m_r$ à $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$

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

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

Algèbre très simple : $\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}\hat{V}\hat{G}_0 = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}$ *relations implicites entre opérateurs*

Ces relations peuvent être itérées à l'infini:

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \hat{G}_0(\hat{V}\hat{G}_0)^2 + \dots \quad \text{à la base du développement de Born}$$

$$|\psi_k\rangle = |k\rangle + \hat{G}_0 \hat{V} |\psi_k\rangle$$

La matrice de transfert $\hat{T}(E)$

En terme opératoirel, le développement de Born s'écrit

$$|\psi_k\rangle = |k\rangle + \hat{G}_0 \hat{V} |k\rangle + (\hat{G}_0 \hat{V})^2 |k\rangle + (\hat{G}_0 \hat{V})^3 |k\rangle + \dots$$

On introduit l'opérateur $\hat{T}(E) = \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0(E) \hat{V} + \hat{V} (\hat{G}_0(E) \hat{V})^2 + \dots$

de sorte que : $|\psi_k\rangle = |k\rangle + \hat{G}_0 \hat{T} |k\rangle$

On a transféré le problème de la resommation de la série infinie de $|\psi_k\rangle$ à $\hat{T}$

La relation itérative entre $\hat{G}$ et $\hat{G}_0$

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

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

conduit à $\hat{T}(E) = \hat{V} + \hat{V} \hat{G}(E) \hat{V}$

pôle de $\hat{G}(E)$ (i.e. état lié de $\hat{H}$) $\longrightarrow$ pôle de $\hat{T}(E)$ $\longrightarrow$ pôle de l'amplitude de diffusion

Une série d'expressions utiles

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}$$

Le point de départ pour un état stationnaire de diffusion

$$|\psi_k\rangle = |k\rangle + \hat{G}_0 \hat{V} |\psi_k\rangle$$

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

peut être transformé en

$$|\psi_k\rangle = |k\rangle + \hat{G}_0 \hat{T} |k\rangle$$

$$\hat{T} \equiv \hat{T}(E) = \hat{V} + \hat{V} \hat{G}(E) \hat{V}$$

et

$$|\psi_k\rangle = |k\rangle + \hat{G} \hat{V} |k\rangle$$

$$\hat{G} \equiv \hat{G}(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + i0_+}$$

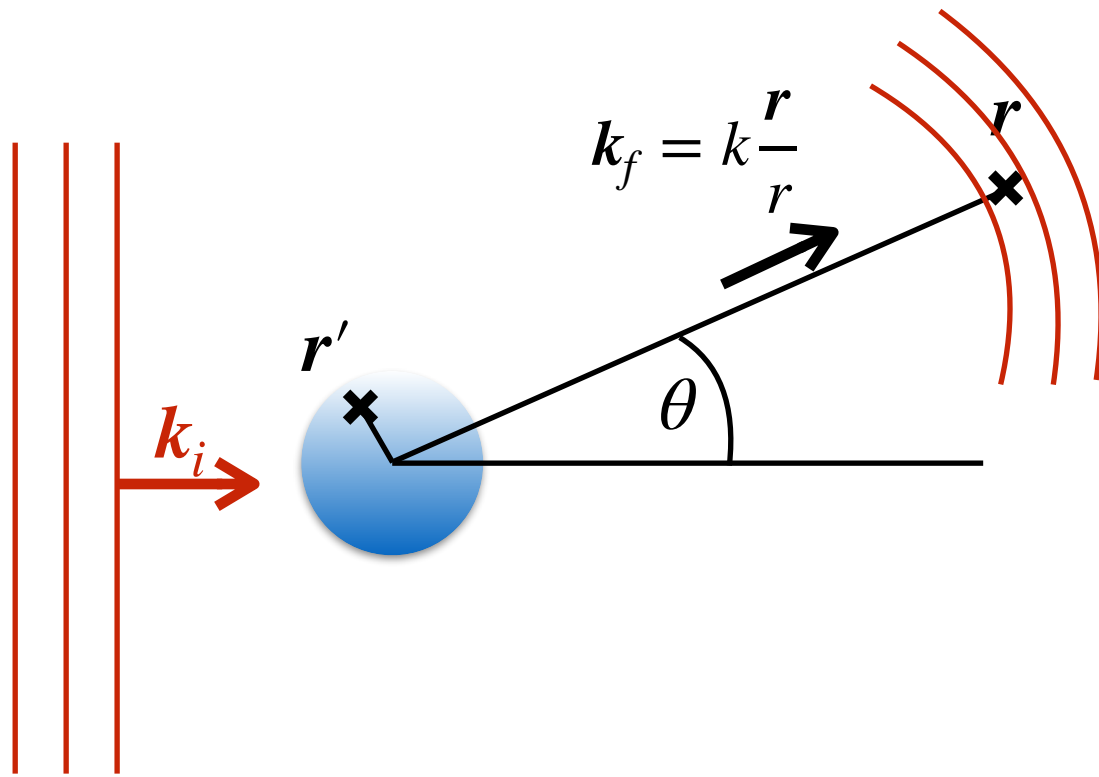
Pas de miracle ! Chacune de ces expressions contient un terme difficile à évaluer...

3.

L'amplitude de diffusion
et le théorème optique

Retour sur la forme d'un état stationnaire de diffusion

On considère un potentiel diffusant V invariant par rotation : $V(r)$



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

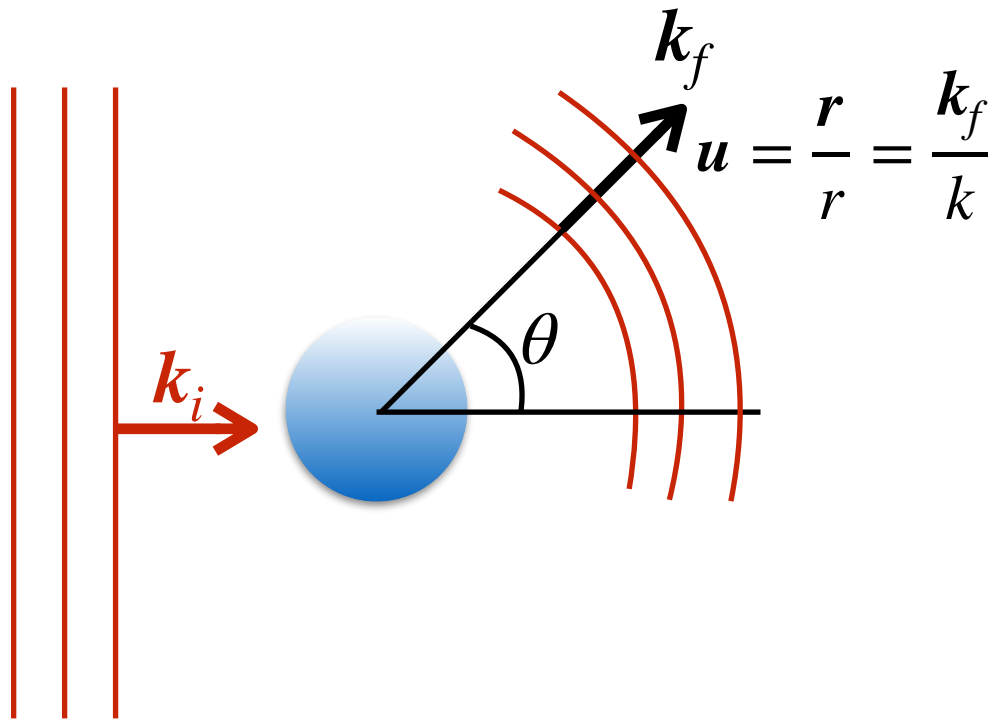
$$\sim \psi^{(\text{inc})} + \psi^{(\text{dif})}$$

amplitude de diffusion :

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

$$= -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \langle \mathbf{k}_f | \hat{T} | \mathbf{k}_i \rangle$$

Section efficace de diffusion



Flux incident dans la direction k_i
particules/(m² x seconde)

Flux sortant autour d'un angle solide Ω donné
particules/seconde

Rapport des deux flux (surface): $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega)$

Flux évalués à partir du courant de probabilité pour l'état $\psi_k(\mathbf{r}) \sim \psi^{(\text{inc})} + \psi^{(\text{dif})}$

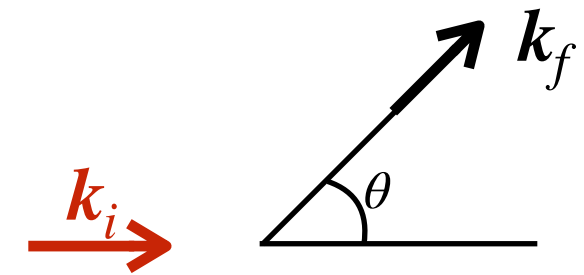
formule générale : $\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \psi^*(\mathbf{r}) \nabla [\psi(\mathbf{r})] \right\}$

$$\mathbf{J}^{(\text{inc})}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar \mathbf{k}_i}{m_r}$$

$$\mathbf{J}^{(\text{dif})}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar k}{m_r} |f(k, \theta)|^2 \frac{\mathbf{u}}{r^2}$$

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

Le théorème optique



On a donné la forme asymptotique de l'état de diffusion

$$\psi_k(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

mais toute fonction complexe $f(k, \theta)$ n'est pas éligible !

Une contrainte forte provient de l'unitarité de toute évolution quantique

Conservation de la probabilité : $\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ $\rho = |\psi|^2$

Pour un état propre de l'hamiltonien (état stationnaire): $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$

$$\begin{aligned} \psi_k(\mathbf{r}) &\sim \psi^{(\text{inc})} + \psi^{(\text{dif})} \\ \mathbf{J}(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \psi^*(\mathbf{r}) \nabla [\psi(\mathbf{r})] \right\} \end{aligned} \quad \longrightarrow \quad \mathbf{J} = \mathbf{J}^{(\text{inc})} + \mathbf{J}^{(\text{dif})} + \mathbf{J}^{(\text{interf})}$$

Après un calcul relativement long : $0 + \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}} - \text{Im} [f(k, \theta = 0)] = 0$

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

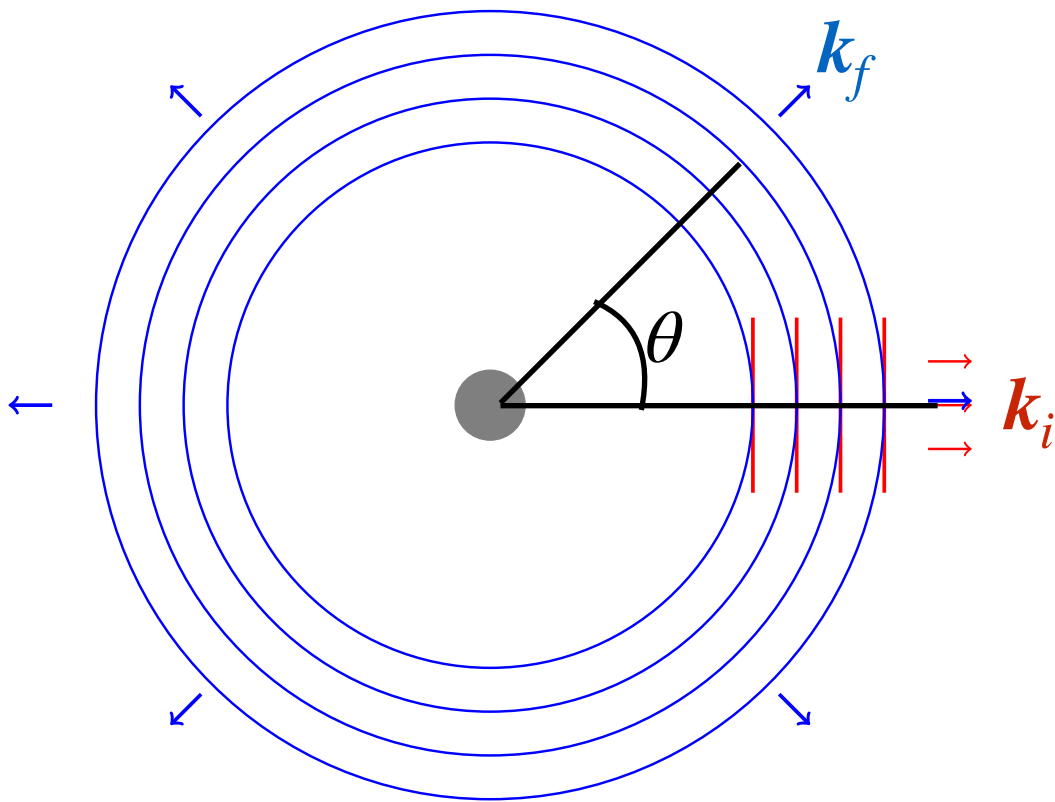
Signification du théorème optique

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

Rien ne se perd, rien ne se crée...

$$\psi_{k_i}(\mathbf{r}) \sim e^{ik_i \cdot \mathbf{r}} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Les particules diffusées dans des directions $\mathbf{k}_f \neq \mathbf{k}_i$ sont prélevées sur le faisceau incident, qui est donc atténué



Cette atténuation semble absente de l'expression de ψ_k , mais elle se cache dans l'interférence (destructive) “vers l’avant”, c’est-à-dire pour $\theta = 0$

Le théorème optique dans le cas isotrope

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

On suppose que $f(k, \theta) = f(k)$, ce qui est bien vérifié à basse énergie [cf. cours 3]

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

Le théorème optique s'écrit alors : $\text{Im} [f(k)] = k |f(k)|^2$

ou encore : $\text{Im} \left[\frac{1}{f(k)} \right] = -k \quad \longrightarrow \quad \frac{1}{f(k)} = \text{fonction réelle}(k) - ik$

Impose une borne supérieure à la section efficace :

$$\frac{1}{|f(k)|} \geq k \quad \Rightarrow \quad \sigma_{\text{tot}} = 4\pi |f(k)|^2 \leq \frac{4\pi}{k^2} \quad \textit{limite unitaire}$$

4.

La symétrie de rotation

La conservation du moment cinétique

Si $V(\mathbf{r}) = V(|\mathbf{r}|)$, alors $\hat{H}$ et $\hat{L}_i$ (avec $i = x, y, z$) commutent

on peut diagonaliser simultanément $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$

Imposer à $\psi(r, \theta, \varphi)$ d'être état propre de $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ détermine sa partie angulaire :

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

partie radiale
quelconque

harmonique
sphérique

Deux nombres quantiques : $\ell \geq 0, m \in \{-\ell, -\ell + 1, \dots, \ell\}$

$$\hat{L}^2 \psi = \hbar^2 \ell(\ell + 1) \psi$$

$$\hat{L}_z \psi = \hbar m \psi$$

Un cas particulier important : les états “s” tels que $\ell = m = 0$
correspondent à $Y_{0,0}$ constante, donc un état $\psi(\mathbf{r})$ isotrope

L'équation radiale

On injecte $\psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$ dans l'équation de Schrödinger

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_r} + V(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

en utilisant

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

On obtient une équation pour la fonction d'onde radiale réduite $u(r) = r \chi(r)$

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

Equation de Schrödinger effective sur la demi-droite $[0, +\infty[$ avec $u(0) = 0$

Canaux de diffusion

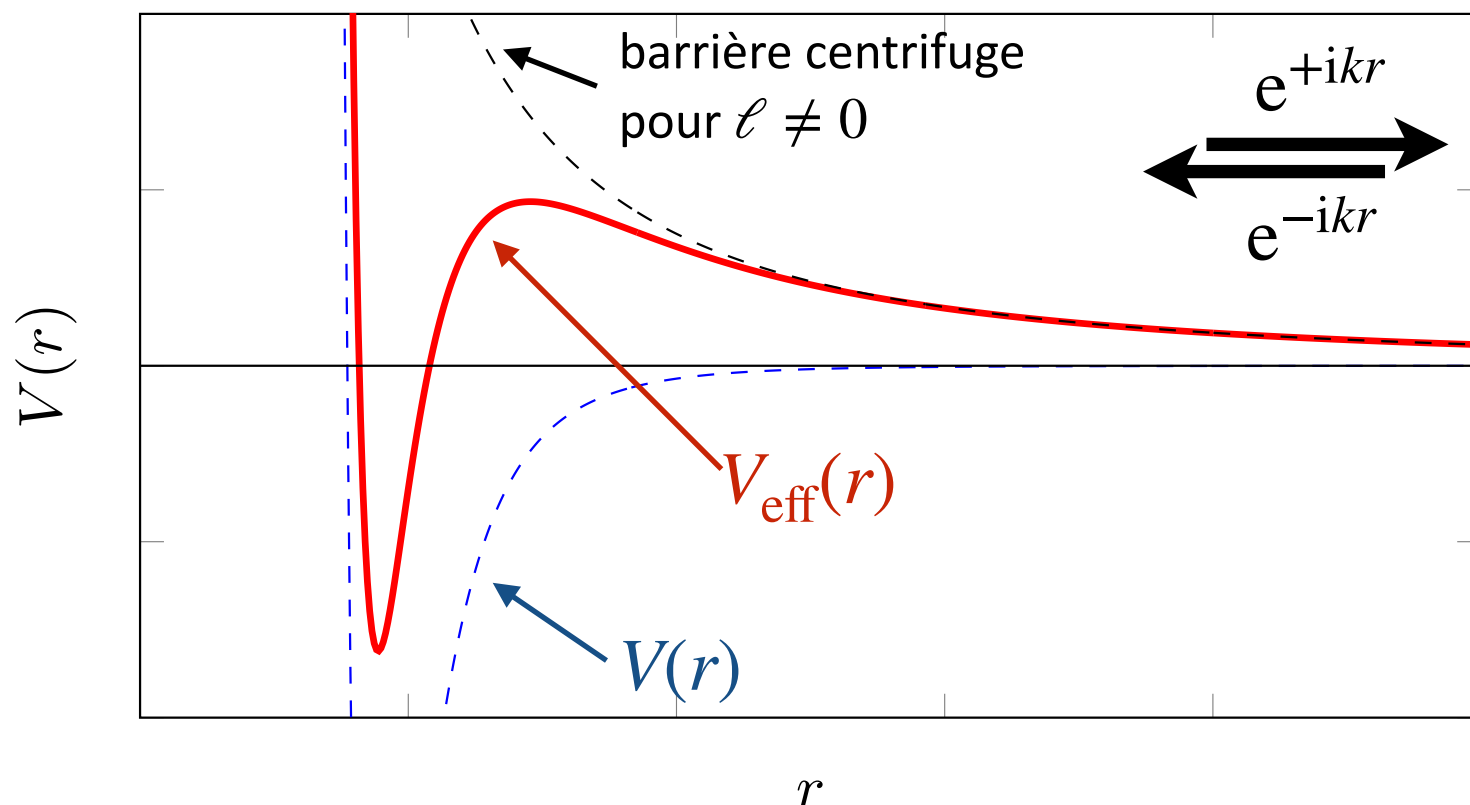
$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} \frac{d^2}{dr^2} u(r) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_r r^2} \right] u(r) = E u(r)$$

Pour chaque valeur de ℓ , on a un problème de diffusion 1D dans le potentiel effectif

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

“vrai”
potentiel

barrière centrifuge, toujours répulsive,
sauf pour le canal $\ell = 0$



Recherche des fonctions propres
sous la forme [à un $(-1)^\ell$ près]

$$u_\ell(r) \sim e^{-ikr} \mp e^{2i\delta_\ell} e^{+ikr}$$

Toute la physique est contenue
dans les déphasages $\delta_\ell(k)$

Lien entre déphasages et amplitude de diffusion

$$\begin{array}{c} \overleftarrow{e^{i(kr+2\delta_\ell)}} \\ \overrightarrow{e^{-ikr}} \end{array}$$

On décompose $\psi_k(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r}$ sur les harmoniques sphériques

et on pose
$$f(k, \theta) = \sum_{\ell} (2\ell + 1) \underbrace{P_{\ell}(\cos \theta)}_{\text{polynôme de Legendre}} \underbrace{f_{\ell}(k)}_{\text{amplitude de diffusion du canal } \ell}$$

Après identification terme à terme : $e^{2i\delta_\ell} = 1 + 2ikf_\ell \iff \frac{1}{f_\ell(k)} = \frac{k}{\tan \delta_\ell(k)} - ik$

Section efficace totale : $\sigma_{\text{tot}} = \sum_{\ell} \sigma_{\ell}$ avec $\sigma_{\ell} = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \sin^2 [\delta_\ell(k)]$

Le théorème optique $\frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}} = \text{Im} [f(k, \theta = 0)]$ est bien satisfait !

5.

Collision de particules indiscernables

Prise en compte du principe de Pauli

On suppose que les deux partenaires de collision sont dans le même état de spin

pour la partie orbitale : $\Psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \pm \Psi(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A)$ + : bosons, - : fermions

Pour les variables “centre de masse - coordonnée relative”

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_A + \mathbf{r}_B)$$

Dans l'échange $\mathbf{r}_A \leftrightarrow \mathbf{r}_B$, on a $\mathbf{R}$ inchangé et $\mathbf{r} \leftrightarrow -\mathbf{r}$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B$$

La fonction d'onde de la variable relative doit donc satisfaire : $\psi(-\mathbf{r}) = \pm \psi(\mathbf{r})$

Particules indiscernables et moment cinétique relatif

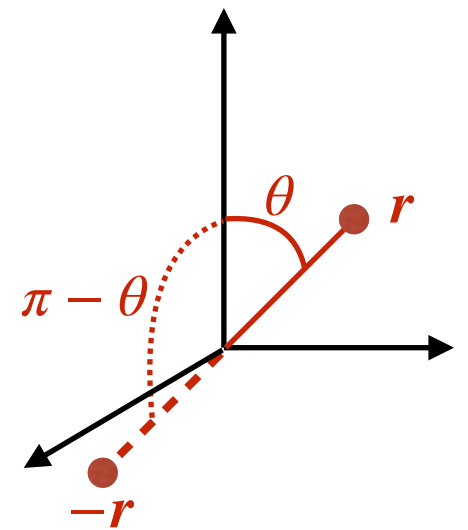
$$\psi(-\mathbf{r}) = \pm \psi(\mathbf{r})$$

Pour un potentiel invariant par rotation, on peut chercher ψ sous la forme

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

La passage de $\mathbf{r}$ à $-\mathbf{r}$ se décrit en coordonnées sphériques par :

$$r \rightarrow r, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi$$



et les harmoniques sphériques vérifient la propriété :

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

Bilan pour des particules indiscernables polarisées en spin :

- Pour des bosons, seules les valeurs paires de ℓ sont autorisées : $\ell = 0, 2, 4, \dots$
- Pour des fermions, seules les valeurs impaires de ℓ sont autorisées : $\ell = 1, 3, \dots$

Etat de diffusion pour des particules indiscernables

La forme “standard” utilisée jusqu’ici

$$\psi_k(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

devient après symétrisation

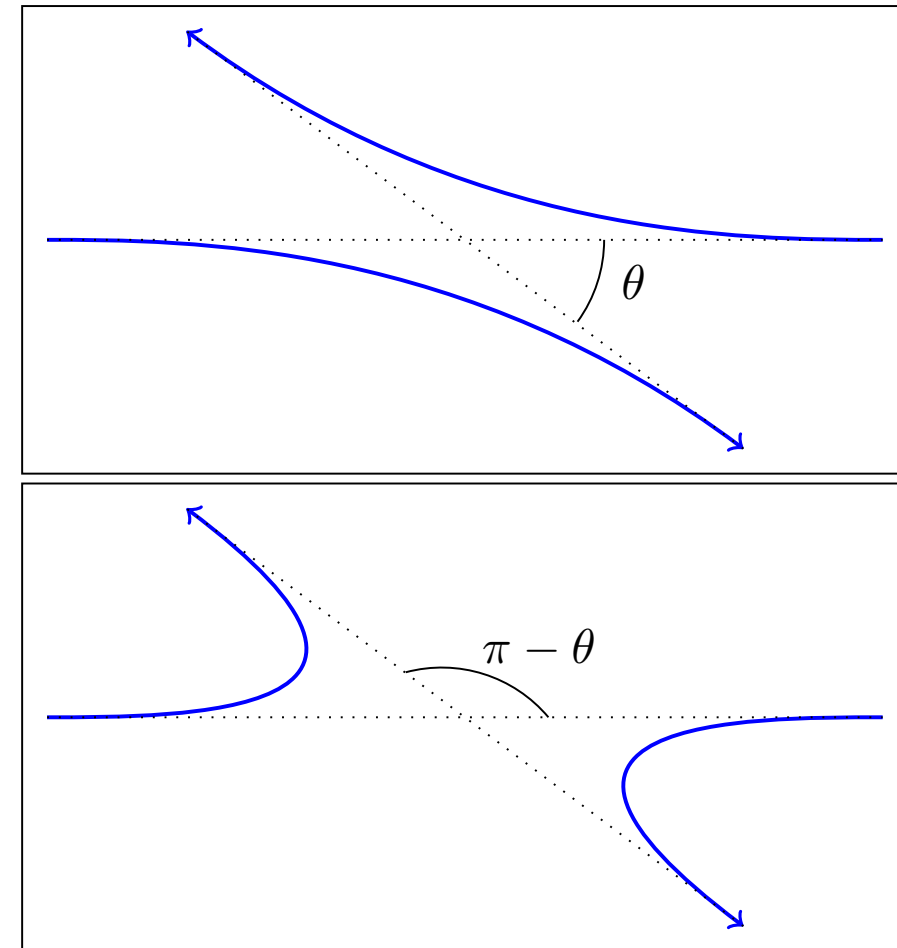
$$\psi_k(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \pm e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] + \frac{1}{\sqrt{2}} [f(k, \theta) \pm f(k, \pi - \theta)] \frac{e^{ikr}}{r}$$

Section efficace différentielle :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} \left| f(k, \theta) \pm f(k, \pi - \theta) \right|^2$$

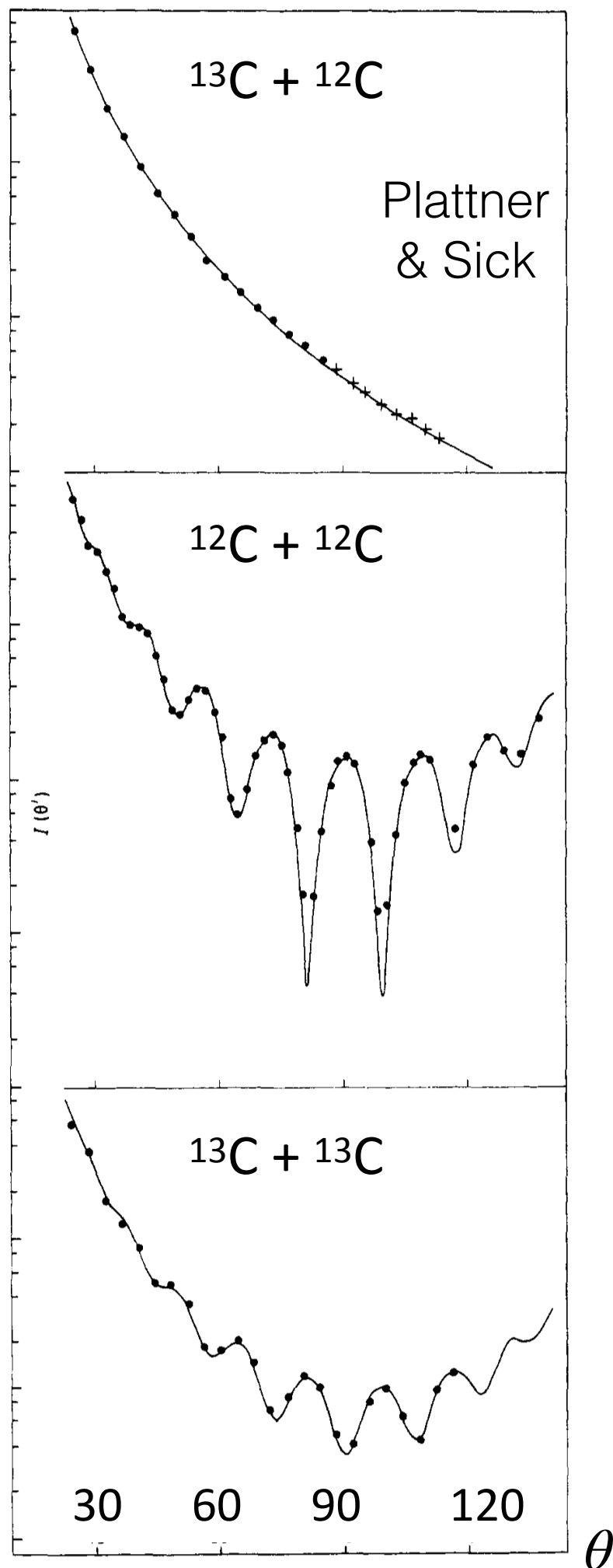
possibilité d’interférences !

Exemple : pour des fermions polarisés et $\theta = \frac{\pi}{2}$, il ne peut pas y avoir de diffusion



Diffusion coulombienne d'ions carbone C⁺⁺

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}$$



¹²C : noyau de spin nul (boson)

¹³C : noyau de spin 1/2 (fermion)

Section efficace différentielle
pour la diffusion coulombienne :

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

Barrière centrifuge et atomes froids

On modélise le potentiel obtenu dans le cadre de Born-Oppenheimer par

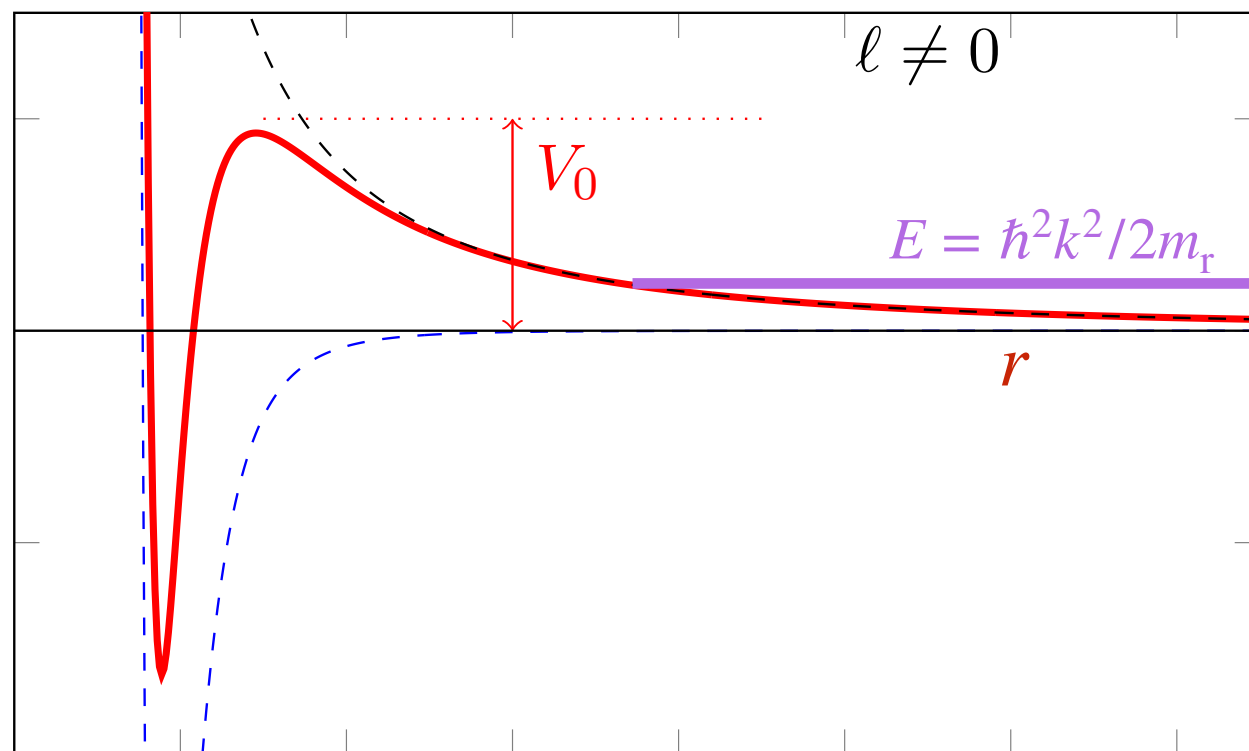
$$V(r) = -\frac{C_6}{r^6} + \frac{C_{12}}{r^{12}} \quad \text{Lennard-Jones}$$

et on ajoute pour $\ell \neq 0$ le potentiel centrifuge $\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_r r^2}$

Hauteur de la barrière pour $\ell = 1$:

$$V_0 \sim \frac{\hbar^3}{\sqrt{m_r^3 C_6}} \sim 30 \mu\text{K} \quad \text{pour Rb}$$

Si $E \sim k_B T \ll V_0$, les atomes en collision “ne voient pas” le potentiel $V(r)$



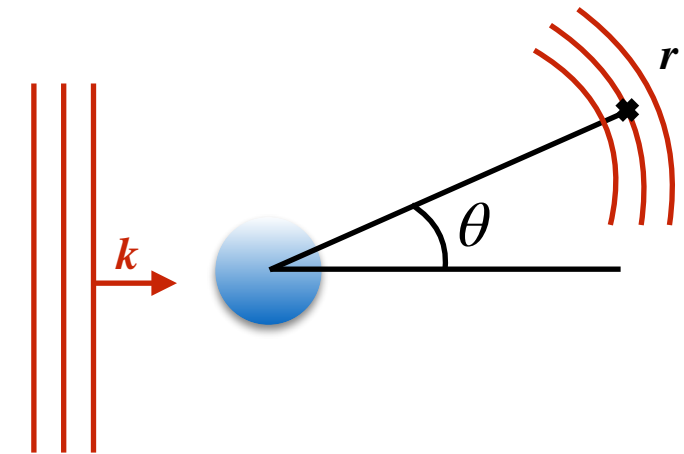
Seules les collisions en onde s ($\ell = 0$) jouent un rôle important, sauf cas très particulier

→ *un gaz de fermions polarisés est généralement un gaz parfait*

En résumé (1)

- Description d'une collision en termes d'état stationnaire de diffusion $|\psi_k\rangle$

$$\psi_k(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$



- L'amplitude de diffusion $f(k, \theta)$ contient toute l'information sur la collision

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

- L'amplitude de diffusion se calcule à partir de la matrice de transition $\hat{T}(E)$

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

avec

$$\hat{T}(E) = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}(E)\hat{V} \quad \hat{G}(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + i0_+}$$

En résumé (2)

Pour un potentiel invariant par rotation $V(r)$

- Canaux indépendants associés aux ondes partielles de moment cinétique donné
- Pour des particules indiscernables
 - ℓ pair pour des bosons sans spin ou polarisés
 - ℓ impair pour des fermions polarisés
- Pour une énergie suffisamment basse, seul le canal $\ell = 0$ contribue
diffusion isotrope

Le théorème optique impose dans ce cas :

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

