THEORIE DES COLLISIONS

Table des matières

Chapitre 1

Méthode des Ondes partielles

1.1 Principe de la méthode des ondes partielles

1.1.1 Condition d'application de cette méthode

- Méthode mathématique qui consiste à trouver l'état stationnaire de collision $\psi(\vec{r})$; l'équation de Schrödinger

$$\left(\Delta + k^2 - \bar{V}(r)\right)\psi(\vec{r}) = 0 \tag{1.1}$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \bar{V}(r) = \frac{2mE}{\hbar^2}V(r)$$

telle que la condition aux limites : $\lim_{r\to\infty}\left(\psi(\vec{r}) - e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right) = \frac{e^{ikr}}{r}f(\theta,\phi)$ soit vérifiée.

- Méthode particulièrement adaptée au cas de potentiel $V(r)$.
Les solutions particulières de l'éq. (1.1) sont fonctions propres simultanées de $\mathbf{L^2}$ et $\mathbf{L_z}$

$$\frac{\phi_l(r)}{r}\,Y_l^m(\theta,\phi) \tag{1.2}$$

avec l entier ≥ 0 et $-l \leq m \leq l$.
$\phi_l(r)$ étant solution de l'èquation différentielle suivante :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \bar{V}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\phi_l(r) = 0 \tag{1.3}$$

La solution générale de léq. (1.1) est une combinaison linéraire des fonctions (1.2) :

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{m=+l} a_{l,m}\,\frac{\phi_l(r)}{r}\,Y_l^m(\theta,\phi)$$

c'est un développement en ondes partielles de $\psi(\vec{r})$.

1.1.2 Propriétés des solutions de l'équation radiale

α) *Comportement à l'origine*

Si $V(r)$ vérifie la condition : $\mid V(r) \mid \leq \frac{C}{r^{3/2}}$ quand $r \to 0$ alors $\bar{V}(r)$ est négligeable devant $\frac{l(l+1)}{r^2}$ dans l'équation (1.3). Dans ce cas on a :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]_{r\to 0} \phi_l(r) = 0 \tag{1.4}$$

$\lim_{r\to 0} \phi_l(r)$ est solution de l'équation (1.4), d'autre part, si on pose $\phi_l(r) \longrightarrow_{r\to 0} Cr^{\alpha}$ on obtient : $\alpha(\alpha-1) - l(l-1) = 0$
soit $\alpha = -l$, et $\alpha = l+1$
donc l'équation différentielle radiale (1.3) admet deux solutions :

- $\phi_l(r) \longrightarrow_{r\to 0} Cr^{l+1}$ elle est régulière à l'origine (acceptable physiquement)
- $\phi_l(r) \longrightarrow_{r\to 0} Cr^{-l}$ elle est irrégulière à l'origine, solution inacceptable physiquement.

β) Comportement à l'infini de la solution radiale (régulière)

− Définition des déphasages

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \bar{V}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] \phi_l(r) = 0$$

- $\frac{l(l+1)}{r^2} \longrightarrow 0_{r\to\infty}$
- la condition (1.1) : $\mid V(r) \mid \leq \frac{C}{r}$ quand $r \to \infty$

Donc, on aura : $\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right]_{r\to\infty} \phi_l(r) = 0$ dont la solution générale est donnée par :

$$\phi_l(r)_{r\to\infty} = C\sin(kr - \beta_l)$$

on pose : $\beta_l = l\frac{\pi}{2} - \delta_l$ i.e. $\phi_l(r)_{r\to\infty} = C\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)$
δ_l dépend de l, k et de $V(r)$. $\delta_l(k)$ est appelé le déphasage de la $l^{ième}$ onde partielle.

1.2 Expressions de $\psi(\vec{r})$, $f(\theta)$ et $\sigma(\theta)$ en fonction des déphasages

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{l,m} a_{l,m} \frac{\phi_l(r)}{r} Y_l^m(\theta,\phi)$$
$$\phi_l(r)_{r\to\infty} \longrightarrow C \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)$$

$a_{l,m} =?$
On impose la normalisation suivante des $\phi_l(r)$:

$$C = \frac{i^l \sqrt{4\pi(2l+1)}}{k}$$

On détermine les coefficients $a_{l,m}$ en exploitant la condition aux limites

$$\lim_{r\to\infty}\left[\psi(\vec{r})-e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right]=\frac{e^{ikr}}{r}\,f(\theta,\phi) \tag{1.5}$$

Autrement dit, on suppose que $\vec{k}//(OZ)$

$$\begin{aligned} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l\,\sqrt{4\pi(2l+1)}\,j_l(kr)\,Y_l^0(\theta,\phi) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{m=+l}\delta_{m,0}\,i^l\,\sqrt{4\pi(2l+1)}\,j_l(kr)\,Y_l^m(\theta,\phi) \end{aligned}$$

$j_l(kr)_{r\to\infty}\longrightarrow\frac{\sin(kr-l\pi/2)}{kr}$

$$\left(\psi(\vec{r})-e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right)_{r\to\infty}\longrightarrow\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{m=+l}\frac{i^l\,\sqrt{4\pi(2l+1)}}{kr}\,Y_l^m(\theta,\phi)\Big[a_{l,m}\,\sin(kr-l\pi/2+\delta_l)-\delta_{m,0}\,\sin(kr-l\pi/2)\Big]$$

($\delta_{m,0}$: symbole de Kronecker)

Posons :

$$\begin{aligned} \mathcal{Q} &= a_{l,m}\,\sin(kr-l\pi/2+\delta_l)-\delta_{m,0}\,\sin(kr-l\pi/2) \\ &= a_{l,m}\,\frac{e^{i(kr-l\pi/2+\delta_l)}-e^{-i(kr-l\pi/2+\delta_l)}}{2i}-\delta_{m,0}\,\frac{e^{i(kr-l\pi/2)}-e^{-i(kr-l\pi/2)}}{2i} \\ &= \frac{i^{-l-1}}{2}\,e^{ikr}\Big(a_{l,m}\,e^{i\delta_l}-\delta_{m,0}\Big)-\frac{i^{l-1}}{2}\,e^{-ikr}\Big(a_{l,m}\,e^{-i\delta_l}-\delta_{m,0}\Big) \end{aligned}$$

Donc pour que la condition aux limites soit satisfaite, on impose ceci : $\Big(a_{l,m}\,e^{-i\delta_l}-\delta_{m,0}\Big)=0$

Autrement dit : $a_{l,m}\,e^{-i\delta_l}-\delta_{m,0}=0$, d'où :

$$\mathbf{a_{l,m}=\delta_{m,0}\,e^{i\delta_l}}$$

finalement la quantité :

$$\mathcal{Q}=\frac{i^{-l-1}}{2}\,e^{ikr}\big(a_{l,m}\,e^{i\delta_l}-\delta_{m,0}\big)=\frac{i^{-l-1}}{2}\,e^{ikr}\,\delta_{m,0}\,\big(e^{2i\delta_l}-1\big)$$

$$\begin{aligned} \left(\psi(\vec{r})-e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right)_{r\to\infty} &\longrightarrow\sum_{m,l}\frac{i^l\,\sqrt{4\pi(2l+1)}}{k}\,Y_l^m(\theta,\phi)\,\frac{i^{-l-1}}{2}\,\delta_{m,0}\,\big(e^{2i\delta_l}-1\big)\,\frac{e^{ikr}}{r} \\ &\to_{r\to\infty}\sum_l\frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{2ik}\,Y_l^0(\theta)\,\big(e^{2i\delta_l}-1\big)\,\frac{e^{ikr}}{r} \\ &= f(\theta)\,\frac{e^{ikr}}{r} \end{aligned}$$

d'où

$$\mathbf{f}(\theta)=\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2ik}}\sum_{\mathbf{l}}\sqrt{\mathbf{4\pi(2l+1)}}\,\big(\mathbf{e^{2i\delta_l}-1}\big)\,Y_{\mathbf{l}}^{\mathbf{0}}(\theta)$$

amplitude de diffusion (totale)

On peut la mettre sous la forme :

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(\theta)$$

avec

$$f_l(\theta) = \frac{1}{2ik}\sqrt{4\pi(2l+1)}\left(e^{2i\delta_l} - 1\right) Y_l^0(\theta)$$

amplitude de diffusion de la $l^{ième}$ onde partielle

$f_l(\theta)$ dépend uniquement de θ du fait que $\vec{k}//OZ$

1.2.1 Calcul de la section efficace différentielle

$$\sigma(\theta) = \mid f(\theta) \mid^2 = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} \sqrt{(2l+1)(2l'+1)}\ \left(e^{2i\delta_l} - 1\right)\left(e^{2i\delta_{l'}} - 1\right) Y_l^0(\theta)\, Y_{l'}^0(\theta)$$

-section efficace intégrée :

$$\begin{aligned} \sigma = \int \sigma(\theta)\, d\Omega &= \int \sigma(\theta)\ \sin\theta\, d\theta\, d\phi \\ &= 2\pi \int \sigma(\theta)\ \sin\theta\, d\theta \end{aligned}$$

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\ \mid e^{2i\delta_l} - 1 \mid^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\ \sin^2 \delta_l$$

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l$$

avec

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}\,(2l+1)\ \sin^2 \delta_l$$

section efficace intégrée de la $l^{ième}$ onde partielle

1.3 Théorème optique

on a :

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2ik}\sqrt{4\pi(2l+1)}\left(e^{2i\delta_l} - 1\right) Y_l^0(\theta)$$

$$\frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2i} = e^{i\delta_l}\left(\frac{e^{i\delta_l} - e^{-i\delta_l}}{2i}\right) = e^{i\delta_l} \sin\delta_l$$

et

$$Y_l^0(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, P_l(\cos\theta)$$

donc

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,e^{i\delta_l}\,\sin\delta_l\,P_l(\cos\theta)$$

Remarque : Pour $\theta = 0 \quad P_l(1) = 1$
Dans ce cas on aura :

$$f(0) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,e^{i\delta_l}\,\sin\delta_l$$

or $e^{i\delta_l} = \cos\delta_l + i\sin\delta_l$ D'où

$$Im\,f(0) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,\sin^2\delta_l$$

On obtient finalement :

$$\sigma = \frac{4\pi}{k}\,Im\,f(0)$$

Théorème optique

1.4 Calcul de déphasage dans le cas d'un potentiel de portée finie

soit :

$$\begin{cases} V = V(r) & r < R \\ \quad = 0 & r > R \end{cases}$$

On doit résoudre l'équation :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \bar{V}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\phi_l(r) = 0 \tag{1.6}$$

avec $\bar{V}(r) = \frac{2m}{\hbar^2}\,V(r)\,, \qquad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\,E$

dans deux régions distinctes :

$$\begin{cases} region\,I & 0 \leq r < R \\ region\,II & r > R \end{cases}$$

dans la région I : $V(r) \neq 0$.
L'équation différentielle radiale (1.6) admet des solutions régulières à l'origine. Notons cette solution :

$$\frac{\phi_l(r)}{r} = C\,F_\rho(r)$$

$C = Cte$
dans la région II : $V(r) = 0$. L'équation (1.6) se réduit à :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\phi_l(r) = 0$$

c'est l'équation différentielle radiale de la particule libre. La solution générale est :

$\frac{\phi_l(r)}{r} = \alpha\, j_l(kr) + \beta\, \eta_l(kr) \quad$ pour $r > R, \quad (\alpha, \beta = ctes)$

Les conditions de continuité au point $r = R$ s'écrivent :

$$C\, F_l(R) = \alpha\, j_l(kR) + \beta\, \eta_l(kR)$$

$$C\, F_l'(R) = \alpha\, k j_l'(kR) + \beta\, k\eta_l'(kR)$$

$F_l'(R), j_l'(kR)$ et $\eta_l'(kR)$ sont les dérivées respectives de $F_l(r)$, $j_l(k)$ et $\eta_l(kr)$ /à r au point $r = R$

$$\frac{F_l'(R)}{F_l(R)} = k\, \frac{j_l'(kR) + \beta/\alpha\, \eta_l'(kR)}{j_l(kR) + \beta/\alpha\, \eta_l(kR)}$$

on pose : $\gamma_l = R\, \frac{F_l'(R)}{F_l(R)}$. On obtient :

$$\beta/\alpha = -\frac{kR j_l'(kR) - \gamma_l\, j_l(kR)}{kR\, \eta_l'(kR) - \gamma_l\, \eta_l(kR)}$$

d'autre part la limite de $\frac{\phi_l(r)}{r} = \alpha\, j_l(kr) + \beta\, \eta_l(kr)$ est :

$$\frac{\phi_l(r)}{r}_{r\to\infty} \longrightarrow \alpha\left[\frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} + \beta/\alpha\, \frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr}\right]$$

$$= C\, \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \beta/\alpha)}{kr} \qquad \text{(pour un potentiel de portée finie)}$$

D'autre part, on a vu aussi que :

$$\phi_l(r)_{r\to\infty} \longrightarrow C\, \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) \qquad \text{pour un potentiel central quelconque}$$

. Et ce qui est valable pour un potentiel central quelconque est aussi valable pour un potentiel central de portée finie, donc par identification :

$$\delta_l = \arctan\frac{\beta}{\alpha} \Longrightarrow \frac{\beta}{\alpha} = \tan\delta_l$$

On obtient alors :

$$\tan\delta_{\mathbf{l}} = -\frac{\mathbf{kR}j_{\mathbf{l}}'(\mathbf{kR}) - \gamma_{\mathbf{l}}\, j_l(kR)}{\mathbf{kR}\, \eta_{\mathbf{l}}'(\mathbf{kR}) - \gamma_{\mathbf{l}}\, \eta_{\mathbf{l}}(\mathbf{kR})}$$

avec $\gamma_l = R\, \frac{F_l'(R)}{F_l(R)}$.

1.5 Comportement des déphasages et des sections efficaces en fonction de l'énergie et de la profondeur du potentiel pour un puits de portée finie

- $a)\, E \to \infty$

$$\mid V(r) \mid \leq \frac{1}{r^{3/2}} \qquad \text{quand } r \to 0$$

quand $E \to \infty$, on néglige $V(r)$ devant l'énergie E dans la région I : $0 \leq r < R$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] \phi_l(r)_{k\to\infty} = 0$$

sa solution est :

$$\frac{\phi_l(r)}{r} = C\, F_l(r)_{k\to\infty} \longrightarrow C\, j_l(kr)$$

et

$$\gamma_l = R\, \frac{F_l'(R)}{F_l(R)}_{k\to\infty} \longrightarrow \frac{kRj_l'(kR)}{j_l(kR)}$$

$$\tan\delta_l = -\frac{kRj_l'(kR) - \gamma_l\, j_l(kR)}{kR\, \eta_l'(kR) - \gamma_l\, \eta_l(kR)}_{k\to\infty} \longrightarrow 0$$

$\Longleftrightarrow \delta_l(k \to \infty) = n\pi$

• $b)$ **$\mathbf{E} \to \mathbf{0}$ (basses énergies)**

$$j_l(kR)_{k\to 0} \longrightarrow \frac{(kR)^l}{(2l+1)!} \Longrightarrow j_l'(kR)_{k\to 0} \longrightarrow \frac{l(kR)^{l-1}}{(2l+1)!}$$

$$\eta_l(kR)_{k\to 0} \longrightarrow \frac{(2l+1)!}{(2L+1)(kr)^{l+1}} \Longrightarrow \eta_l'(kR)_{k\to 0} \longrightarrow -\frac{(l+1)(2l+1)!}{(2l+1)(kR)^{l+2}}$$

$$\tan\delta_{l_{k\to 0}} \longrightarrow \frac{(kR)^l}{(2l+1)!}\, \frac{l-\gamma_l}{\frac{(2l+1)!}{(2l+1)(kR)^{l+1}}\,(l+1+\gamma_l)} = \frac{(2l+1)}{[(2l+1)!]^2}\,(kR)^{2l+1}\, \frac{l-\gamma_l}{l+1+\gamma_l} = -\mathbf{a_l}\, k^{2l+1}$$

a_l est appelé longueur de diffusion.

$$\mathbf{a_l} = R^{2l+1}\, \frac{(2l+1)}{[(2l+1)!]^2}\, \frac{l-\gamma_l(E=0)}{(l+1+\gamma_l(E=0))}$$

Développement limité de $\tan\delta_l$ en k^2

$$k^{2l+1}\, \cot\delta_l(k) \simeq -\frac{1}{a_l} + \frac{r_l}{2}\, k^2 + \mathcal{O}(k^4)$$

a_l est la longueur de diffusion et r_l est la portée effective.

Comportement des sections efficaces

quand $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \longrightarrow 0 \Rightarrow \tan\delta_{l_{k\to 0}} \longrightarrow -\mathbf{a_l}\, k^{2l+1}$

*** section efficace intégrée partielle**

$$\sigma_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2}\, \sin^2\delta_l \qquad \text{devient :}$$

$$\sigma_{l_{k\to 0}} \longrightarrow \frac{4\pi(2l+1)}{k^2}\, \delta_l^2 \simeq 4\pi(2l+1)\, a_l^2\, k^{4l}$$

pour $l > 0$: $\sigma_l \longrightarrow 0$

pour $l = 0$: $\sigma_l \longrightarrow 4\pi\, a_0^2$

la section efficace intégrée est : $\sigma = \sum_l \sigma_{l\ k\to 0} \longrightarrow 4\pi\, a_0^2$
Seules les ondes s $(l = 0)$ qui contribuent au processus de diffusion (à basse énergie).

*** section efficace différentielle :**
pour $l = l' = 0$:

$$\sigma(\theta) = \frac{\pi}{k^2}\big(e^{2i\delta_0} - 1\big) Y_0^0(\theta)\, Y_0^0(\theta) = \frac{1}{k^2}\, \sin^2\delta_0 \qquad \text{tel que :} Y_0^0(\theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

or $\delta_0 \simeq -a_0\, k$, ce qui donne pour la section efficace différentielle :

$$\sigma(\theta) \simeq \frac{1}{k^2}\,\delta_0^2 \simeq a_0^2 = C^{te}$$

quand $E \longrightarrow 0$, la section efficace différentielle est isotrope (i.e. la même dans tout l'espace).

1.6 Section efficace d'absorption

On a vu que la solution générale de l'équation de Schrödinger :

$$\Big[\Delta + k^2 - \bar{V}(r)\Big]\, \psi(\vec{r}) = 0$$

est une combinaison linéaire de fonctions d'onde $\frac{\phi_l(r)}{r}\, Y_l^m(\theta, \phi)$:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=+l} a_{l,m}\, \frac{\phi_l(r)}{r}\, Y_l^m(\theta, \phi)$$

La forme asymptotique de $\psi(\vec{r})$ est :

$$\psi(\vec{r})_{r\to\infty} \longrightarrow \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=+l} a_{l,m}\, \frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{kr}\, i^l\, \sin(kr - l\pi/2) + \delta_l\, Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$\text{or} \qquad a_{l,m} = \delta_{m,0}\, e^{i\delta_l}$$

$$\psi(\vec{r})_{r\to\infty} \longrightarrow \sum_{l=0}^{\infty} \frac{i^l\sqrt{4\pi(2l+1)}}{2ikr}\, \big(e^{i(kr-l\pi/2)}\, e^{2i\delta_l} - e^{-i(kr-l\pi/2)}\big)\, Y_l^0(\theta)$$

$$= \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} i^{l+1} \sqrt{4\pi(2l+1)} \left(\frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{r} - S_l\, \frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{r}\right)$$

$$\text{avec :} \qquad S_l = e^{2i\delta_l}$$

à la fin, on a :

$$\psi(\vec{r})_{r\to\infty} \longrightarrow \left(\sum_{l=0}^{\infty} A_l(\theta)\right) \frac{e^{-ikr}}{r} + \left(\sum_{l=0}^{\infty} B_l(\theta)\right) \frac{e^{ikr}}{r}$$

$A_l(\theta)\,\frac{e^{-ikr}}{r}$ est l'onde entrante
$B_l(\theta)\,\frac{e^{ikr}}{r}$ est l'onde sortante ou diffusée

Soit $\mathbb{P}_r = -i\hbar\big[\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\big]$ opérateur associé à la projection de l'opérateur quantité de mouvement sur le rayon $\vec{r}$
Posons :

$$\Phi_l^{entr} = A_l(\theta)\,\frac{e^{-ikr}}{r} \Longrightarrow \mathbb{P}_r\,\Phi_l^{entr} = -\hbar\,k\,\Phi_l^{entr}$$

$$\Phi_l^{sort} = B_l(\theta)\,\frac{e^{ikr}}{r} \Longrightarrow \mathbb{P}_r\,\Phi_l^{sort} = \hbar\,k\,\Phi_l^{sort}$$

Le flux d'ondes entrantes :

$$dn_l^{entr} = \frac{1}{2m}\left[\big(\Phi_l^{entr}\big)^*\big(\mathbb{P}_r\,\Phi_l^{entr}\big) + \big(\mathbb{P}_r\,\Phi_l^{entr}\big)^*\,\Phi_l^{entr}\right] dS$$

$$J = -\vec{J}\cdot\vec{e_r}$$

$$dn_l^{entr} = \frac{\hbar k}{m}\mid A_l(\theta)\mid^2\ \sin\theta\,d\theta\,d\phi$$

Flux élémentaire d'ondes sortantes :

$$\begin{aligned} dn_l^{sort} &= \frac{1}{2m}\left[\big(\Phi_l^{sort}\big)^*\big(\mathbb{P}_r\,\Phi_l^{sort}\big) + \big(\mathbb{P}_r\,\Phi_l^{sort}\big)^*\,\Phi_l^{sort}\right] dS \\ &= \frac{\hbar k}{m}\mid B_l(\theta)\mid^2\ \sin\theta\,d\theta\,d\phi \end{aligned}$$

Flux d'ondes absorbées par la cible :

$$dn_l^{abs} = (dn_l^{entr} - dn_l^{sort}) = \frac{\hbar k}{m}(\mid A_l(\theta)\mid^2 - \mid B_l(\theta)\mid^2)\,\sin theta\,d\theta\,d\phi$$

Section efficace différentielle partielle (i.e. celle qui correspond aux ondes l) d'absorption est donc :

$$d\sigma_l^{abs} = \frac{dn_l^{abs}}{I_0} = (\mid A_l(\theta)\mid^2 - \mid B_l(\theta)\mid^2)\,\sin theta\,d\theta\,d\phi$$

$$\text{or}\qquad A_l(\theta) = \frac{i^{l+1}}{2k}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,e^{il\pi/2}\,Y_l^0(\theta) = \frac{i^{2l+1}}{2k}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,Y_l^0(\theta)$$

$$B_l(\theta) = -\frac{i^{l+1}}{2k}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,S_l\,e^{-il\pi/2}\,Y_l^0(\theta) = -\frac{i}{2k}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,S_l\,Y_l^0(\theta)$$

Par suite :

$$d\sigma_l^{abs} = \frac{\pi}{k^2}(2l+1)(1-\mid S_l\mid^2)\,Y_l^{0*}(\theta)\,Y_l^0(\theta)\,\sin\theta\,d\theta\,d\phi$$

La section efficace partielle intégrée d'absorption est donc :

$$\sigma_l^{abs} = \frac{\pi}{k^2}(2l+1)(1-\mid S_l\mid^2)\int\int Y_l^{0*}(\theta)\,Y_l^0(\theta)\,\sin\theta\,d\theta\,d\phi$$

Finalement :

$$\boldsymbol{\sigma_l^{abs} = \frac{\pi}{k^2}(2l+1)\,(1-\mid S_l\mid^2)}$$

La section efficace intégrée d'absorption totale :

$$\sigma^{abs} = \sum_{l=0}^{\infty}\sigma_l^{abs} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,(1-\mid S_l\mid^2)$$

on a posé : $S_l = e^{2i\delta_l}$. Donc, si $\mid S_l \mid = 1 \implies$ il n'y a pas d'absorption. Cela signifie que les ondes entrantes libres pénètrent dans la zone du potentiel et donnent naissance à des ondes sortantes de même amplitude que les ondes entrantes.

Si $\mid S_l \mid < 1 \implies$ il y a absorption. Cela signifie que l'amplitude des ondes sortantes de moment cinétique l est plus faible que celle des ondes entrantes dont elles proviennent.

$$S_l = e^{2i\delta_l}$$

Il y a absorption $\iff \delta_l = \alpha_l + i\beta_l$
β_l : caractérise "l'absorption des particules par le centre diffuseur"

1.7 Section efficace totale

$$\sigma^{tot} = \sigma^{elast} + \sigma^{abs} \qquad , \sigma^{el} = \sigma^{diff}$$

$$\sigma^{el} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\ \mid 1 - S_l\mid^2 \qquad \text{et} \qquad \sigma^{abs} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[1-\mid S_l\mid^2\right]$$

alors,

$$\sigma^{tot} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[2-(S_l+S_l^*)\right]$$

$$\boldsymbol{\sigma^{tot} = \frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,(1-\Re e\, S_l)}$$

Chapitre 2

Equation de Lipmann-Schwinger et Développement de Born

On a vu que le problème de la diffusion d'une particule de masse m et de quantité de mouvement $\vec{P} = \bar{h}\vec{k}$ par un potentiel $V(r)$ consiste à résoudre l'équation de Schrödinger :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{2.1}$$

en tenant compte de la condition aux limites :

$$\psi(\vec{r}) \longrightarrow_{r\to\infty} \quad C\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + C\, f(\theta,\phi)\frac{e^{ik\cdot r}}{r} \tag{2.2}$$

avec

$$C = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}$$

$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{i\vec{\lambda}\cdot\vec{r}}$ s'écrit en notation de Dirac : $< \vec{r} \mid \vec{\lambda} >= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{i\vec{\lambda}\cdot\vec{r}}$ qui doit satisfaire
- la relation de normalisation :$< \vec{\lambda}' \mid \vec{\lambda} >= \delta(\vec{\lambda} - \vec{\lambda}')$
- la relation de fermeture :$\int \mid \vec{\lambda} >< \vec{\lambda} \mid d\vec{\lambda} = 1$

L'onde plane incidente est décrite par le ket $\mid \vec{k} >$; l'état stationnaire de collision par le ket : $\mid \psi^+_{\vec{k}} >$ tel que :

$$< \vec{r} \mid \psi^+_{\vec{k}} >= \psi^+_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$\psi^+_{\vec{k}}(\vec{r})$ est solution de l'équation (2.1) et satisfaisant la condition (2.2). L'équation (2.1) peut être réécrite sous la forme :

$$(E - H_0) \mid \psi^+_{\vec{k}} >= V \mid \psi^+_{\vec{k}} > \tag{2.3}$$

avec $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, on a de plus :

$$H_0 \mid \vec{k} >= E \mid \vec{k} > \tag{2.4}$$

équation de la particule libre.

2.1 Equation de Lippmann-Schwinger (L-S)

$H_0 \mid \vec{k} >= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \mid \vec{k} >, \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 0 \longrightarrow \infty$

Le spectre s'étend de zéro à l'infini, quelque soit $E > 0$ et réelle. L'opérateur $(E - H_0)$ a la valeur propre 0, donc l'inverse de $E-H_0$ n'est pas défini. Supposons qu'il le soit pour un instant et considérons un vecteur $\mid u>$ qui vérifie l'équation :

$$\mid u>=\mid \vec{k}>+\frac{1}{E-H_0}V\mid u> \tag{2.5}$$

multiplions le vecteur $\mid u>$ à gauche par $E-H_0$ dans l'équation précédente

$$(E-H_0)\mid u>=(E-H_0)\mid \vec{k}>+(E-H_0)\frac{1}{E-H_0}V\mid u>$$

d'après l'éq. (2.4), le premier membre à droite s'annule, il reste donc :

$$(E-H_0)\mid u>=V\mid u>$$

L'expression (2.5) du vecteur $\mid u>$ est solution de l'éq. (2.3). Considérons maintenant l'opérateur
$G_0^+(E)=\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}$, $\quad \epsilon>0$ (infiniment petit)
$G_0^+(E)$ est défini car $E-H_0+i\epsilon$ n'admet pas de valeur propre 0, $G_0^+(E)$ est appelé opérateur de Green de la particule libre.

$$\psi_{\vec{k}}^+=\mid \vec{k}>+\lim_{\epsilon\to 0^+}G_0^+(E)V\psi_{\vec{k}}^+ \tag{2.6}$$

équation de Lippmann-Schwinger (L-S)

2.2 Etude de l'opérateur de Green

2.2.1 Fonction de Green en représentation impulsion

$$G_0^+(E)=\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}\to(E-H_0+i\epsilon)G_0^+(E)=1$$

en représentation impulsion, on obtient l'élément de matrice

$$<\vec{\lambda}\mid(E-H_0+i\epsilon)G_0^+(E)\mid\vec{\lambda}'>=<\vec{\lambda}\mid\vec{\lambda}'>$$

Insérons la relation de fermeture : $\int\mid\vec{\lambda}"><\vec{\lambda}"\mid d\vec{\lambda}"=1$

$$I=\int<\vec{\lambda}\mid(E-H_0+i\epsilon)\mid\vec{\lambda}"><\vec{\lambda}"\mid G_0^+(E)\mid\vec{\lambda}'>d\vec{\lambda}"=<\vec{\lambda}\mid\vec{\lambda}'>$$

on a $H_0\mid\vec{\lambda}">=\frac{\hbar^2\lambda"^2}{2m}\mid\vec{\lambda}">$ d'où :

$$I=\int(E-\frac{\hbar^2\lambda"^2}{2m}+i\epsilon)<\vec{\lambda}\mid\vec{\lambda}"><\vec{\lambda}"\mid G_0^+(E)\mid\vec{\lambda}'>d\vec{\lambda}"=<\vec{\lambda}\mid\vec{\lambda}">$$

=

$$(E-\frac{\hbar^2\lambda"^2}{2m}+i\epsilon)<\vec{\lambda}\mid G_0^+(E)\mid\vec{\lambda}'>=<\vec{\lambda}\mid\vec{\lambda}'>$$

$$\to<\vec{\lambda}\mid G_0^+(E)\mid\vec{\lambda}'>=\frac{<\vec{\lambda}\mid\vec{\lambda}'>}{E-\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}+i\epsilon}$$

On peut l'écrire sous la forme avec $\eta=\frac{2m}{\hbar^2}E>0$

$$<\vec{\lambda}\mid G_0^+(E)\mid\vec{\lambda}'>=\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{k^2-\lambda^2+i\eta}\delta(\vec{\lambda}-\vec{\lambda}')$$

2.2.2 Fonction de Green en représentation coordonnées

$< \vec{r} \mid G_0^+(E) \mid \vec{r}' >=?$

$$< \vec{r} \mid G_0^+(E) \mid \vec{r}' >=< \vec{r} \mid \mathbf{1}\, G_0^+(E)\, \mathbf{1} \mid \vec{r}' >= \int\int < \vec{r} \mid \vec{\lambda} >< \vec{\lambda} \mid G_0^+(E) \mid \vec{\lambda}' >< \vec{\lambda}' \mid \vec{r}' > d\vec{\lambda}\, d\vec{\lambda}'$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int\int e^{i\vec{\lambda}\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{\lambda}'\cdot\vec{r}'} < \vec{\lambda} \mid G_0^+(E) \mid \vec{\lambda}' > d\vec{\lambda}\, d\vec{\lambda}'$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{2m}{\hbar^2} \int\int e^{i\vec{\lambda}\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{\lambda}'\cdot\vec{r}'} \frac{\delta(\vec{\lambda} - \vec{\lambda}')}{k^2 - \lambda^2 + i\eta} d\vec{\lambda}\, d\vec{\lambda}' = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{\lambda}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2 - \lambda^2 + i\eta} d\vec{\lambda}$$

Calcul de l'intégrale suivante :

$$I' = \int \frac{e^{i\vec{\lambda}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2 - \lambda^2 + i\eta} d\vec{\lambda}$$

en utilisant les coordonnées sphériques (λ, α, β) en prenant comme axe polaire : $\vec{\rho} = \vec{r} - \vec{r}'$

$\lambda \geq 0$

$0 \leq \alpha \leq \pi$

$0 \leq \beta \leq 2\pi$

$\vec{\lambda}\vec{\rho} = \lambda\, \rho\, \cos\alpha$, on pose : $u = \cos\alpha$

$$I' = \int\int\int \frac{e^{i\lambda\rho u}}{k^2 - \lambda^2 + i\eta} \lambda^2 (-du)\, d\lambda\, d\beta = 2\pi \int_0^\infty \frac{\lambda^2 d\lambda}{k^2 - \lambda^2 + i\eta} \int_{-1}^{1} e^{i\lambda\rho u} (du)$$

$$= 2\pi \int_0^\infty \frac{\lambda^2 d\lambda}{k^2 - \lambda^2 + i\eta} \frac{1}{i\lambda\rho} (e^{i\lambda\rho} - e^{-i\lambda\rho}) = \frac{2\pi}{i\rho} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\lambda\rho} \lambda\, d\lambda}{k^2 - \lambda^2 + i\eta}$$

Posons $F(z) = \frac{e^{i\rho z}}{k^2 - z^2 + i\eta} z = -\frac{e^{i\rho z}}{z^2 - (k^2 + i\eta)}$ z : variable complexe

les racines de $z^2 - (k^2 + i\eta) = 0$ sont : $z = \pm(k^2 + i\eta)^{1/2}$ c'est-à dire $z_1 \simeq k + \frac{i\eta}{2k}$ et $z_2 \simeq -k - \frac{i\eta}{2k}$

Si $\rho > 0$:

$$\int_{C_1} F(z)\, dz = 2i\pi Res(F, z = z_1) = -i\pi\, e^{ik\rho}$$

or

$$Res(F, z = z_1) = -(k + \frac{i\eta}{2k}) \frac{e^{i\rho(k + \frac{i\eta}{2k})}}{2k + \frac{i\eta}{k}} = -\frac{1}{2} e^{i\rho k}\, e^{-\eta\rho/2k} = -\frac{1}{2} e^{i\rho k}$$

$$I' = \frac{2\pi}{i\rho}(-i\pi\, e^{ik\rho}) = -\frac{2\pi^2 e^{ik\rho}}{\rho}$$

finalement :

$$\left(G_0^+(\mid \vec{r}-\vec{r}'\mid) =< \vec{r} \mid G_0^+(E) \mid \vec{r}' >= -\frac{m}{2\pi\,\hbar^2}\,\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{\mid \vec{r}-\vec{r}'\mid} \right)$$

2.3 Forme asymptotique. Expression intégrale de l'amplitude de diffusion

D'après (2.2)

$$< \vec{r} \mid \psi_{\vec{k}}^+ >= \psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}) \longrightarrow_{r\to\infty} < \vec{r} \mid \vec{k} > + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} f(\theta,\phi)\frac{e^{ik\cdot r}}{r}$$

en utilisant l'équation de Lippmann-Schwinger :

$$\psi_{\vec{k}}^+ =\mid \vec{k} > + G_0^+(E)\, V \psi_{\vec{k}}^+$$

en représentation coordonnées l'éq. de **L-S** s'écrit :

$$< \vec{r} \mid \psi_{\vec{k}}^+ >=< \vec{r} \mid \vec{k} > + < \vec{r} \mid G_0^+(E)\, V \mid \psi_{\vec{k}}^+ >=< \vec{r} \mid \vec{k} > + \int < \vec{r} \mid G_0^+(E) \mid \vec{r}' >< \vec{r}' \mid V \mid \psi_{\vec{k}}^+ > d\vec{r}'$$

or

$$< \vec{r}' \mid V \mid \psi_{\vec{k}}^+ >= V(r') < \vec{r}' \mid \psi_{\vec{k}}^+ >= V(r')\, \psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}')$$

V : potentiel central local. On obtient :

$$\psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{m}{2\pi\,\hbar^2}\int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{\mid \vec{r}-\vec{r}'\mid} V(r')\psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}')\, d\vec{r}'$$

c'est l'équation de Lippmann-Schwinger en représentation coordonnées, elle a la forme d'une équation intégrale $V(r') \longrightarrow 0_{r'\to\infty}$ potentiel de courte portée, quand $r\to\infty$: $\frac{r'}{r}\to 0$ donc les valeurs de r' qui contribuent à l'intégrale sont bornées.

$$\mid \vec{r}-\vec{r}'\mid = \left[r^2 - 2\vec{r}\cdot\vec{r}' + r'^2\right]^{1/2} = r\left[1-\frac{2\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r^2}+\frac{r'^2}{r^2}\right]^{1/2}_{r\to\infty} \longrightarrow r\left[1-\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r^2}\right] = r - \frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r}$$

$$\frac{1}{\mid \vec{r}-\vec{r}'\mid} = \frac{1}{r\left[1-\frac{2\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r^2}+\frac{r'^2}{r^2}\right]^{1/2}} \mid_{r\to\infty}\longrightarrow \frac{1}{r}\left[1+\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r^2}\right] \simeq \frac{1}{r}$$

d'où

$$\psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{m}{2\pi\,\hbar^2}\,\frac{e^{ik\cdot r}}{r}\int e^{-ik\,\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r}} V(r')\, \psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}')\, d\vec{r}'$$

Par identification avec (2.2), on obtient :

$$f(\theta,\phi) = -\frac{(2\pi)^{1/2} m}{\hbar^2}\int e^{-ik\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r}}\, V(r')\, \psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}')\, d\vec{r}'$$

on pose : $\frac{ik\vec{r}}{r} = \vec{k}'$, avec $\vec{k}'$ le vecteur d'onde de longueur k dans la direction (θ,ϕ). Donc, c'est le vecteur d'onde des particules diffusées dans la direction (θ,ϕ).

$$f(\vec{k} \to \vec{k}') = -\frac{(2\pi)^{1/2} m}{\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'}\, V(r')\, \psi^+_{\vec{k}}(\vec{r}')\, d\vec{r}'$$

intégrale de l'amplitude de diffusion

$e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} = (2\pi)^{3/2} \;<\vec{k}' \mid \vec{r}'>$, notation de Dirac

$$V(r')\psi^+_{\vec{k}}(\vec{r}') = V(r') <\vec{r}' \mid \psi^+_{\vec{k}}> = <\vec{r}' \mid V \mid \psi^+_{\vec{k}}>$$

$$f(\vec{k} \to \vec{k}') = -\frac{m(2\pi)^2}{\hbar^2} \int \;<\vec{k}' \mid \vec{r}'><\vec{r}' \mid V \mid \psi^+_{\vec{k}}>\, d\vec{r}'$$

en notation de Dirac :

$$\left(f(\vec{k} \to \vec{k}') = -\frac{4(\pi)^2 m}{\hbar^2} <\vec{k}' \mid V \mid \psi^+_{\vec{k}}>\right)$$

2.4 Développement de Born

On veut résoudre l'équation intégrale donnant l'état stationnaire de collision.

$$\psi^+_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{m}{2\pi\,\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{\mid \vec{r}-\vec{r}' \mid} V(r')\psi^+_{\vec{k}}(\vec{r}')\, d\vec{r}'$$

Pour le faire, on procède par itération, en posant :

$$K(\vec{r},\vec{r}') = -\frac{m}{2\pi\,\hbar^2} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{\mid \vec{r}-\vec{r}' \mid} V(r')$$

On cherche

$$\psi^+_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int K(\vec{r},\vec{r}')\, \psi(\vec{r}')\, d\vec{r}'$$

on pose : $\psi(\vec{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi^{(n)}(\vec{r})$ avec $\psi^{(n)}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ (l'onde plane), on obtient :

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} \psi^{(n)}(\vec{r}) = \psi^{(0)}(\vec{r}) + \sum_{n=1}^{\infty} \int K(\vec{r},\vec{r}')\, \psi^{(n)}(\vec{r}')\, d\vec{r}'\right)$$

on identifie terme à terme on aura :

$$\psi^{(0)}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = \int K(\vec{r},\vec{r}')\, \psi^{(0)}(\vec{r}')\, d\vec{r}'$$

$$\vdots$$

$$\psi^{(n)}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int K(\vec{r},\vec{r}')\, \psi^{(n-1)}(\vec{r}')\, d\vec{r}'$$

Développement de Born de l'amplitude de diffusion

$$f(\theta,\phi) = -\frac{m\sqrt{2\pi}}{\hbar^2}\int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}V(r)\psi^{+}_{\vec{k}}(\vec{r})\,d\vec{r}$$

On pose :

$$f(\theta,\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} f^{(n)}(\theta,\phi)$$

et

$$\psi^{+}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi(\vec{r})\sum_{n=0}^{\infty}\psi^{(n)}(\vec{r})$$

donc,

$$\sum_{n=0}^{\infty} f^{(n)}(\theta,\phi) = -\frac{m\sqrt{2\pi}}{\hbar^2}\sum_{n=0}^{\infty}\int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}V(r)\psi^{(n)}(\vec{r})\,d\vec{r}$$

par identification, on obtient :

$$\mathbf{f^{(n)}}(\theta,\phi) = -\frac{\mathbf{m\sqrt{2}}\pi}{\hbar^{\mathbf{2}}}\int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}V(r)\psi^{(n)}(\vec{r})\,d\vec{r}$$

cette méthode est satisfaisante si le développement est convergent.

2.5 Approximation de Born

$$\begin{aligned} f^{(0)}(\theta,\phi) &= -\frac{m\sqrt{2\pi}}{\hbar^2}\int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}V(r)\psi^{(0)}(\vec{r})\,d\vec{r} \\ &= -\frac{m}{(2\pi)\,\hbar^2}\int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}V(r)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\,d\vec{r} \end{aligned}$$

Conditions de validité de l'approximation de Born.
Supposons que le développement de Born est convergent. Une condition suffisante de validité de l'approximation de Born est alors :

$$\mid f^{(1)}(\theta,\phi) \mid \ll \mid f^{(0)}(\theta,\phi) \mid$$

c'est-à dire : $(2\pi)^{3/2}\, mid\psi^{(1)}(\vec{r}) \mid \ll (2\pi)^{3/2}\, mid\psi^{(0)}(\vec{r}) \mid$ or $\mid \psi^{(0)}(\vec{r}) \mid = 1$ on suppose que : $V(r)$ est de portée finie i.e. négligeable pour $r > R$, R est la portée du potentiel. $V(r)$ est lentement variable, de profondeur V_0 pour $r < R$. Pour simplifier, considérons $\psi^{(1)}(0)$ on a :

$$(2\pi)^{1/2}\psi^{(1)}(\vec{r}) = -\frac{m}{2\pi\,\hbar^2}\int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{\mid \vec{r}-\vec{r}' \mid}V(r')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}\,d\vec{r}'$$

alors :

$$(2\pi)^{3/2} \mid \psi^{(1)}(0) \mid = \frac{m}{2\pi\,\hbar^2} \mid \int \frac{e^{ikr'}}{r'}V(r')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}\,d\vec{r}' \mid$$

on intègre par rapport à θ' et ϕ', on obtient donc :

$$\begin{aligned} (2\pi)^{3/2} \mid \psi^{(1)}(0) \mid &= \frac{2m}{\hbar^2} \mid V_0 \mid\mid \int_0^R \frac{e^{ikr'}}{r'}\frac{\sin kr'}{kr'}\,r'^2\,dr' \mid = \frac{m}{k\hbar^2} \mid V_0 \mid\mid \int_0^R \left(e^{2ikr'}-1\right)dr' \mid \\ &= \frac{m}{k\hbar^2} \mid V_0 \mid\mid \frac{e^{2ikR}-1-2ikR}{2ik} \mid \ll 1 \end{aligned}$$

Pour cela, nous nous plaçons dans deux cas extrêmes :

a) A basse énergie : $kR \ll 1$

$$e^{2ikR} \simeq 1 + 2ikR - \frac{4k^2R^2}{2\,!}$$

ce qui implique :

$$(2\pi)^{3/2} \mid \psi^{(1)}(0) \mid = \frac{m}{k\hbar^2} \mid V_0 \mid \; R^2 \ll 1$$

Donc à basse énergie l'approximation de Born à l'ordre 0 ne peut être utilisée que pour des potentiels suffisamment faibles pour satisfaire cette condition.

b) A haute énergie : $kR \gg 1$

$\mid e^{ikR} \mid \leq 1 \quad \longrightarrow \mid \frac{e^{2ikR}-1-2ikR}{2ik} \mid \leq R$
Ce qui donne :

$$(2\pi)^{3/2} \mid \psi^{(1)}(0) \mid = \frac{m}{k^2\hbar^2} \mid V_0 \mid \; \frac{e^{2ikR}-1-2ikR}{2ik} \mid \leq \frac{m}{k\hbar^2} \mid V_0 \mid \; R \ll 1$$

d'où la condition $k > \frac{m}{\hbar^2} \mid V_0 \mid \; R$. Cette condition est satisfaite quelque soit V_0 et R pourvu que

$$k \gg \frac{m}{\hbar^2} \mid V_0 \mid \; R$$

Donc l'approximation de Born à l'ordre zéro est généralement une approximation valable à haute énergie.

2.6 Calcul de l'amplitude de diffusion à l'aide de l'approximation de Born

$f^{(0)}(\theta, \phi) = ?$

on pose : $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}'$
$\hbar\vec{k}$ est la quantité de mouvement des particules incidentes.
$\hbar\vec{k}'$ est la quantité de mouvement des particules diffusées dans la direction (θ, ϕ).
$\mid \vec{k} \mid = \mid \vec{k}' \mid = k \qquad \hbar\vec{K}$ est la quantité de mouvement transférée
et

$$K^2 = 2k^2(1-\cos\theta) = 4k^2\sin^2\theta/2$$

$$f^{(0)}(\theta,\phi) = -\frac{m}{(2\pi)\,\hbar^2}\int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}V(r)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\,d\vec{r} = -\frac{m}{(2\pi)\,\hbar^2}\int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}V(r)\,d\vec{r}$$

$$\longrightarrow \left(f^{(0)}(\theta,\phi) = -\frac{m}{(2\pi)\,\hbar^2}\int e^{i(\vec{K}\cdot\vec{r})}V(r)\,d\vec{r}\right)$$

$f^{(0)}(\theta,\phi)$ est proprtionnelle à la transformée de Fourier du potentiel. ($f^{(0)}(\theta,\phi)$ ne dépend pas de ϕ du fait que le faisceau incident soit parallèle à OZ).

Calcul de la transformée de Fourier du potentiel

$$\overline{V}(\vec{K}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{r} e^{i(\vec{K}\cdot\vec{r})} V(r)$$

Calculons la valeur de $\overline{V}(\vec{K})$ pour un vecteur $\vec{K}$ déduit par rotation quelconque $\mathcal{R}$:

$$\vec{K'} = \mathcal{R}\,\vec{K}$$

$$\overline{V}(\vec{K'}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{r} e^{i(\vec{K'}\cdot\vec{r})} V(r)$$

changeons $\vec{r}$ en $\vec{r'}$ et posons $\vec{r'} = \mathcal{R}\,\vec{r}$, on a $d\vec{r'} = d\vec{r}$: le volume élémentaire est conservé, de plus, le produit scalaire est invariant par rotation, c'est-à dire : $\vec{K'}\cdot\vec{r} = \vec{K}\cdot\vec{r}$. Donc :

$$\overline{V}(\vec{K'}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{r'} e^{i(\vec{K'}\cdot\vec{r'})} V(r') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{r} e^{i(\vec{K}\cdot\vec{r})} V(r)$$
$$= \overline{V}(\vec{K})$$

d'où :

$$\overline{V}(\vec{K'}) = \overline{V}(\vec{K})$$

$\overline{V}$ ne dépend que du module du vecteur $\vec{K}$. On peut donc prendre $\vec{K}$ suivant l'axe Oz poue évaluer $\overline{V}(K)$.

$$\overline{V}(K) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{r} e^{iKz} V(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{iKr\cos\theta} V(r) r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\phi\, dr$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_0^\infty V(r) r^2\, dr \int_0^\pi e^{iKr\cos\theta} \sin\theta\, d\theta = \frac{2}{(K\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \sin(Kr)\, V(r)\, r dr$$

D'une part, on a maintenant :

$$\int d\vec{r} e^{i(\vec{K}\cdot\vec{r}} V(r) = (2\pi)^{3/2}\, \overline{V}(K) = \frac{4\pi}{K} \int_0^\infty \sin(Kr)\, V(r)\, r dr$$

D'autre part,

$$f^{(0)}(\theta,\phi) = -\frac{m}{(2\pi)\,\hbar^2} \int d\vec{r} e^{i(\vec{K}\cdot\vec{r})}\, V(r)$$

Finalement,

$$\left(\mathbf{f^{(0)}}(\theta,\phi) = -\frac{\mathbf{2m}}{\mathbf{K}\hbar^{\mathbf{2}}} \int_{\mathbf{0}}^\infty \sin(\mathbf{Kr})\, \mathbf{V(r)}\, \mathbf{rdr}\right)$$

on remarque que $f^{(0)}(\theta,\phi) = f^{(0)}(\theta)$ du fait que $\vec{K}//Oz$ ($K = 2k\sin\theta/2$).