

I- INTRODUCTION

L'utilisation des collisions en physique subatomique a joué et joue encore un rôle primordial :

- Découverte du noyau atomique (Rutherford 1911)
- Mesures de la répartition de masse et de charge du noyau (α , e^- , p , n) et « forme » du potentiel nucléaire
- Découverte de nouvelles particules « élémentaires » (mésons π , etc ...)
- Mise en évidence de la structure en quarks des nucléons
- ...

La classification des « intensités » des interactions élémentaires peut se faire au travers des probabilités d'interaction, les mesures étant celles des *sections efficaces*. Par ailleurs, l'équivalence masse – énergie permet la création et la transformation des particules, l'interprétation des résultats reposant sur la cinématique et la dynamique des collisions.

II- CINEMATIQUE ET DYNAMIQUE DES COLLISIONS

1°) Centre de masse, masse réduite, mobile fictif

a) Mobile fictif

Le problème de la déflexion d'une particule incidente dans le référentiel du laboratoire n'est pas simple à résoudre dans le cas général. Une formulation beaucoup plus simple peut se faire dans le référentiel du centre de masse (CM).

Le centre de masse G de deux particules M_1 et M_2 est défini par (avec O quelconque)

$$(m_1 + m_2)\vec{OG} = m_1\vec{OM}_1 + m_2\vec{OM}_2 \Rightarrow m_1\vec{GM}_1 + m_2\vec{GM}_2 = 0$$

ou, en dérivant par rapport au temps

$$(m_1 + m_2)\vec{V}_G = m_1\vec{v}_1 + m_2\vec{v}_2 \Leftrightarrow \boxed{\vec{P}_G = \vec{P}_1 + \vec{P}_2}$$

(la quantité de mouvement totale est donc nulle dans le CM, cette dernière définition restant valable en relativité restreinte).

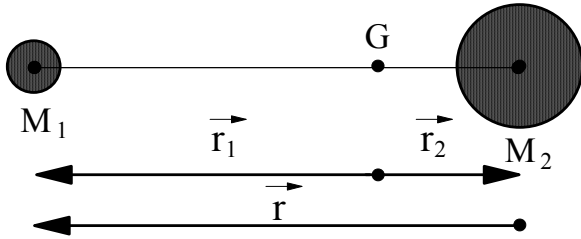
Si les particules 1 et 2 sont en interaction seulement entre elles, le système 1+2 est isolé et

$$\frac{d\vec{P}_G}{dt} = \frac{d\vec{P}_1}{dt} + \frac{d\vec{P}_2}{dt} = 0 \Rightarrow \vec{f}_1 = -\vec{f}_2$$

(et ces forces satisfont au principe de l'action et de la réaction).

\vec{V}_G est donc constante : le référentiel du centre de masse R_G , lié à G, est donc animé d'un mouvement rectiligne uniforme par rapport à celui du laboratoire, et si l'un des deux est galiléen, l'autre aussi.

Nous allons donc nous intéresser désormais au mouvement des particules dans le référentiel du C.M.



$$\left. \begin{aligned} \vec{r}_1 &= \overrightarrow{GM_1} \\ \vec{r}_2 &= \overrightarrow{GM_2} \end{aligned} \right\} \Rightarrow m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2 = 0 \quad \Rightarrow \begin{cases} \vec{r}_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{r} \\ \vec{r}_2 = -\frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{r} \end{cases}$$

$$\vec{r} = \overrightarrow{M_2 M_1} = \overrightarrow{GM_1} - \overrightarrow{GM_2} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

→ si on connaît \vec{r} , on en déduit \vec{r}_1 et \vec{r}_2

$$\text{PFD} \rightarrow \vec{f}_1 = m_1 \frac{d^2 \vec{r}_1}{dt^2} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \mu \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2}$$

en posant $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

- μ s'appelle **masse réduite** du système $\{M_1, M_2\}$
- le point M dont la position est définie par $\vec{r} = \overrightarrow{GM} = \overrightarrow{M_2 M_1} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

s'appelle le **mobile fictif** associé au système des deux particules. Sa masse est la masse réduite du système.

L'étude du mouvement dans R_G se ramène alors simplement à celle du mobile fictif ; les trajectoires des deux particules en interaction se déduisent de celle du mobile fictif par une simple homothétie.

Il y a lieu de rappeler que dans ces conditions, on a des relations du genre $T = T_1 + T_2$ et $\vec{L} = \mu \vec{r} \wedge \vec{v} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$

b) Exemple d'une cible immobile

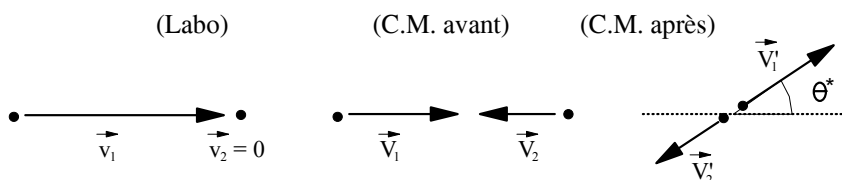
Soit une particule de masse m_1 et de vitesse \vec{v}_1 subissant une collision élastique sur une masse m_2 au repos. Ces conditions initiales sont données dans le référentiel du laboratoire. Dans le référentiel du centre de masse mentionné plus tôt, les particules sont animées avant le choc de vitesses \vec{V}_1 et \vec{V}_2 données par :

$$\left. \begin{aligned} \vec{V}_1 &= \vec{v}_1 - \vec{V}_G = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{v}_1 \\ \vec{V}_2 &= 0 - \vec{V}_G = -\frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{v}_1 \end{aligned} \right\} \text{ compte tenu de } \vec{V}_G = \frac{m_1 \vec{v}_1}{m_1 + m_2}$$

On montre facilement que pour les vitesses \vec{V}'_1 et \vec{V}'_2 après le choc, les lois de conservation de \vec{P} et E_c conduisent à :

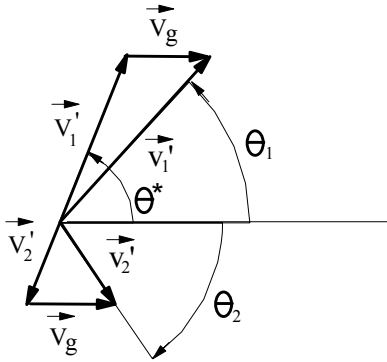
$$|\vec{V}'_1| = |\vec{V}_1| \text{ et } |\vec{V}'_2| = |\vec{V}_2|$$

On calcule alors \vec{v}'_1 et \vec{v}'_2 dans le référentiel du laboratoire à l'aide de la construction :



puis :

$$\vec{v}'_1 = \vec{V}'_1 + \vec{V}_G \quad \vec{v}'_2 = \vec{V}'_2 + \vec{V}_G \quad (\text{avec } V'_2 = V_2 = V_G)$$



θ^* étant l'angle de diffusion dans le CM, on peut montrer (TD) que θ_1 et θ_2 se calculent à partir de θ^* par les relations :

$$\text{tg}\theta_1 = \frac{\sin\theta^*}{\cos\theta^* + \frac{m_1}{m_2}} \quad \text{tg}\theta_2 = \frac{\sin\theta^*}{\cos\theta^* - 1} = -\cot g \frac{\theta^*}{2}$$

il en résulte que θ_2 peut varier de $-\pi/2$ à 0 pour θ^* variant de 0 à π et que pour θ_1 , il existe deux cas :

- si $m_1 < m_2$, θ_1 croît de 0 à π quand θ^* croît de 0 à π

- si $m_1 > m_2$, θ_1 croît de 0 à θ_{\max} puis redécroit vers zéro quand θ^* croît de 0 à π . En ce cas, θ_{\max} est donné par :

$$\sin\theta_{\max} = \frac{m_2}{m_1}$$

Enfin on peut montrer en ce qui concerne l'énergie transférée à la cible par le projectile que

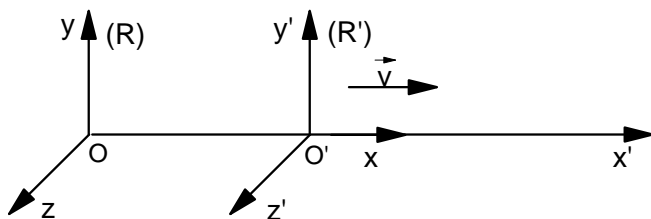
$$E_{\text{recul}} = E_{\text{init}} \times \frac{4m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2} \cos^2\theta_2$$

Dans la suite, nous nous placerons implicitement dans le référentiel du centre de masse et noterons simplement θ l'angle de diffusion du projectile (mobile fictif).

2°) Cinématique et dynamique relativiste

a) Transformation de Galilée

Soient R et R' deux référentiels galiléens, R' étant animé d'une vitesse uniforme \vec{v} par rapport à R. On peut toujours choisir les axes de R et R' de façon que $\vec{Ox} \parallel \vec{O'x'} \parallel \vec{v}$; $\vec{Oy} \parallel \vec{O'y'}$; $\vec{Oz} \parallel \vec{O'z'}$ et que pour $t = t' = 0$ les origines O et O' coïncident.



$$\text{transformation de Galilée : } \begin{cases} x' = x - vt \\ y' = y \\ z' = z \\ t' = t \end{cases}$$

$t' = t \rightarrow$ temps absolu

$$\rightarrow \text{transformation des vitesses : } \frac{dx'}{dt'} = \frac{dx - vdt}{dt} = \frac{dx}{dt} - v \quad (\vec{v}_r = \vec{v}_a - \vec{v}_e)$$

b) Insuffisances de la transformation de Galilée et principe de relativité restreinte

Le **principe de relativité restreinte** s'énonce de la façon suivante : "les lois de la physique sont invariantes vis à vis des translations et rotations des systèmes d'axe, des translations dans le temps, des symétries planes dans l'espace et **des changements de référentiels Galiléens**".

Or on constate facilement que les lois de l'électromagnétisme ne satisfont pas ce principe lorsqu'on utilise la transformation de Galilée.

- Equations de Maxwell $\rightarrow c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$ (non infinie !)

- ϵ_0 et μ_0 identiques dans tout référentiel $\Rightarrow c$ indépendante du référentiel

- transformation de Galilée $\rightarrow c' = c - v \neq c$ dans un référentiel en mouvement.

Par ailleurs, toutes les expériences entreprises montrent que c est effectivement indépendante du référentiel galiléen utilisé (Michelson et Morley, ...).

c) Postulats de la relativité restreinte (Einstein, 1905)

- principe de relativité restreinte (voir plus haut)

- **invariance de C**

- validité de la mécanique newtonienne pour v

d) Transformation de Lorentz

L'étude des phénomènes électromagnétiques par Lorentz a joué un rôle historique important. Ayant constaté que **les lois de l'électromagnétisme** n'étaient **pas invariantes par transformation de Galilée**, il put néanmoins établir qu'elles l'étaient dans une transformation caractérisée par les équations (relatives au cas spécial où R et R' sont définis dans le cas particulier mentionné plus haut) :

$$\begin{cases} x' = \gamma(x - vt) & \text{avec } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c} \\ y' = y \quad z' = z \\ t' = \gamma \left(t - \frac{vx}{c^2} \right) \end{cases}$$

Tandis que Lorentz s'est contenté de considérer que cette transformation pouvait s'appliquer au cas particulier des lois de Maxwell et de la "force de Lorentz" $\vec{f} = q(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$, Einstein choisit de postuler que le principe de relativité impliquait la validité générale de la transformation de Lorentz (on peut noter aussi le rôle joué par Poincaré). Pour des vitesses faibles devant c , on retrouve *la transformation de Galilée qui n'apparaît plus que comme un cas limite de celle de Lorentz valable pour $v \ll c$.*

e) Transformation des vitesses

Soit un objet animé d'une vitesse $\vec{u} = \frac{dx}{dt} \vec{i}$ // à \vec{v} (dans (R))

$$\left. \begin{cases} dx' = \gamma(dx - vdt) \\ dt' = \gamma \left(dt - \frac{v}{c^2} dx \right) \end{cases} \right\} \rightarrow u' = \frac{dx'}{dt'} = \frac{\frac{dx}{dt} - v}{1 - \frac{v}{c^2} \frac{dx}{dt}} = \frac{u - v}{1 - \frac{vu}{c^2}} \quad (\text{dans (R')})$$

pour $u = c$, on trouve bien $u' = \frac{c-v}{1-\frac{v}{c}} = c$

Remarque : pour $\vec{u} = u_x \vec{i} + u_y \vec{j}$, on a $\vec{u}' = \frac{(u_x - v)\vec{i} + (u_y/\gamma)\vec{j}}{1 - \frac{vu_x}{c^2}}$

f) Invariance de l'intervalle et notion de quadrivecteur

Considérons deux "événements" de R : ceux-ci doivent être caractérisés par la donnée de la position **et** du temps (voir notion de simultanéité), soit (x_1, y_1, z_1, t_1) et (x_2, y_2, z_2, t_2) .

On peut montrer facilement que la quantité habituelle $\Delta M^2 = [(x_2-x_1)^2 + (y_2-y_1)^2 + (z_2-z_1)^2]$ (norme du vecteur distance à 3 dimensions) n'est pas invariante par changement de référentiel dans la transformation de Lorentz. On montre par contre également facilement que **la quantité ΔS** dont le carré est donné par (le choix du signe - sera justifié plus loin) :

$$\Delta S^2 = c^2(t_2-t_1)^2 - [(x_2-x_1)^2 + (y_2-y_1)^2 + (z_2-z_1)^2]$$

est un **invariant** dans une transformation de Lorentz, c'est à dire que : $\Delta S'^2 = \Delta S^2$

ΔS est appelé **intervalle** séparant les deux événements.

On peut considérer qu'un point est repéré dans l'espace et le temps par **quatre** coordonnées x, y, z et ct (homogénéité). On peut alors munir cet espace à 4 dimensions (appelé espace-temps ou univers de Minkowski) d'une **métrique pseudo-euclidienne** de signature $(---+)$ où l'intervalle représente la **pseudo-norme du quadrivecteur** $\vec{OM} = (\vec{r}, ct)$ et est invariante par changement de référentiel galiléen. Ce changement de référentiel peut alors être défini sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ ct' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\gamma\beta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ ct \end{pmatrix}$$

où la matrice 4×4 ainsi définie est la **matrice de Lorentz**.

On note que pour une particule en mouvement, on a $d\vec{OM} = \vec{v} dt$, et $dS^2 = c^2 dt^2 - v^2 dt^2 = \frac{c^2}{\gamma^2} dt^2$. Donc, pour une particule en mouvement, la quantité $\frac{dt}{\gamma}$ est un invariant. On l'appelle **temps propre** de la particule, et on note

$$\boxed{d\tau = \frac{dt}{\gamma}}$$

De façon générale, la transformation de Lorentz se traduit par une dilatation des temps et une contraction des longueurs pour la particule en mouvement.

g) Quadrivecteur énergie – impulsion

Nous avons introduit précédemment le quadrivecteur $\vec{OM} = (\vec{r}, ct)$ dont la (pseudo-) norme est invariante par changement de référentiel galiléen. En mécanique classique, le vecteur vitesse est défini par $\vec{v} = \frac{d\vec{OM}}{dt}$. L'extrapolation au quadrivecteur vitesse ne peut se faire par $\frac{d\vec{OM}}{dt}$ (la pseudo-norme de $d\vec{OM}$ est invariante, mais dt ne l'est pas \rightarrow vecteur de norme non invariante).

Nous définirons donc ici le quadrivecteur vitesse par : $\vec{v} = \frac{d\vec{OM}}{d\tau}$

où $d\tau$ est le temps propre (invariant) de la particule. La pseudo-norme de ce quadrivecteur est alors bien un invariant.

$$d\tilde{O}M \begin{vmatrix} dx \\ dy \\ dz \\ cdt \end{vmatrix} \quad d\tau = \frac{dt}{\gamma} \rightarrow \tilde{v} \begin{vmatrix} \gamma v_x \\ \gamma v_y \\ \gamma v_z \\ \gamma c \end{vmatrix}$$

Soit m la masse de la particule : m est un scalaire invariant. Le quadrivecteur $\tilde{P} = m\tilde{v}$ est donc aussi de pseudo-norme invariante. On a :

$$\tilde{P} = \begin{vmatrix} \gamma m v_x \\ \gamma m v_y \\ \gamma m v_z \\ \gamma m c \end{vmatrix}$$

Pour $v \ll c$, les trois premières composantes de ce 4-vecteur tendent vers celles du vecteur impulsion \vec{p} (ou quantité de mouvement). La définition relativiste de l'impulsion est alors :

$$\boxed{\vec{p} = \gamma m \vec{v}}$$

Examinons la dernière composante. Pour $v \ll c$,

$$\gamma m c = \frac{m c}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \rightarrow m c \left(1 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} \right) = m c + \frac{1}{2} \frac{m v^2}{c}$$

En posant :

$$\boxed{E = \gamma m c^2}$$

$$\text{on a : } \lim_{v \ll c} E = m c^2 + \frac{1}{2} m v^2$$

On reconnaît dans le 2^{ème} terme l'expression classique de l'énergie cinétique. Le premier terme, **dû à la masse de la particule**, est appelé **énergie de masse de la particule**.

Finalement, on peut poser

$$\tilde{O}M = (\vec{r}, ct) \rightarrow \tilde{P} = (\vec{p}, E/c)$$

Pseudo-norme de \tilde{P} :

$$(\tilde{P})^2 = -p^2 + E^2/c^2 = -\gamma^2 m^2 v^2 + \gamma^2 m^2 c^2 = \gamma^2 m^2 (c^2 - v^2) = m^2 c^2 \frac{1}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \times \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) = m^2 c^2$$

(Ceci justifie la métrique $---+$ adoptée plus haut), relation que l'on écrit habituellement :

$$\boxed{E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4} \Leftrightarrow \boxed{(\tilde{P})^2 = m^2 c^2}$$

Notons que la transformation du 4-vecteur \tilde{P} est la même que celle du 4-vecteur $\tilde{O}M$

$$\begin{pmatrix} p'_x \\ p'_y \\ p'_z \\ E'/c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\beta\gamma \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\beta\gamma & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \\ E/c \end{pmatrix}$$

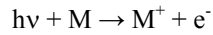
Energie cinétique : pour les faibles vitesses, $\vec{p} \cong m\vec{v}$ et $E \cong m c^2 + \frac{1}{2} m v^2$

Dans le cas général, on pose $\boxed{T = E - m c^2 = (\gamma - 1) m c^2}$ ($\rightarrow \frac{1}{2} m v^2$ pour $v \ll c$), T étant l'énergie cinétique de la particule.

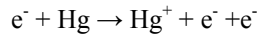
III- NOTIONS DE THEORIE DES COLLISIONS

1°) Historique abrégé

- Hertz (1887) : effet photoélectrique

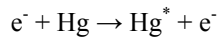


- Lennard (1902) : potentiels d'ionisation

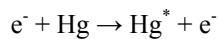


(He, Ne, Ar, Kr, Xe ; Li, Na, K, Rb, Cs, ...)

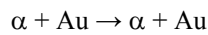
- Franck et hertz (1913) : potentiels de résonance



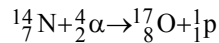
- Franck et Einsporn (1920) : potentiels critiques (plus précis ...)



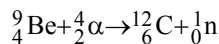
- Geiger et Marsden (1911) : diffusion élastique « Rutherford »



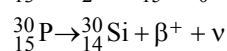
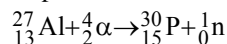
- 1919 : réaction nucléaire, mise en évidence de l'éjection de protons



- 1932 : découverte du neutron par Chadwick



- 1934 : découverte de la radioactivité artificielle par F. et I. Joliot-Curie.



- 1931 : Van der Graaf, premier accélérateur

.....

2°) Section efficace, généralités et présentation du problème

Il s'agit de trouver une quantité qui caractérisera le processus de collision, c'est-à-dire qui permettra de prévoir la probabilité du processus dans des conditions expérimentales données. Nous commençons par simplifier le problème en exigeant dans un premier temps que chacune des particules n'interagisse qu'une seule fois au plus avec les particules constituant la cible : on parle de cible mince, ou de *condition de collision unique* (condition à préciser plus tard).

De même, nous commencerons par envisager des cas où le projectile interagit de façon individuelle avec les particules cibles : en particulier, gardant présent à l'esprit que plus loin nous aborderons le cas quantique, nous imposerons tout d'abord qu'il n'y ait *pas de cohérence* entre les ondes diffusées par les différentes particules composant la cible. Dans le cadre de la mécanique ondulatoire, ceci revient pour l'instant à dire que l'extension spatiale des paquets d'ondes associés aux projectiles est petite devant la distance moyenne entre particules cibles. Ce type de traitement exclu en particulier des phénomènes tels que la diffraction de Bragg. Dans ces conditions, le flux total de particules diffusées est simplement égal au flux diffusé par une particule, multiplié par le nombre de particules cibles.

Le même souci de simplification nous amènera à considérer des particules sans spin, à ignorer pour l'instant tout éventuel problème lié à l'indiscernabilité des particules, ainsi que les effets liés à la structure interne (quantique) des particules cibles. De façon générale, nous nous limiterons pour commencer aux collisions élastiques.

Enfin, nous n'aborderons que des situations relevant d'un potentiel d'interaction scalaire à *deux corps*, du type

$$V_{12} = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2),$$

ce qui nous permettra de ramener, *dans le référentiel du centre de masse*, le problème envisagé à celui d'un mobile fictif de masse μ placé dans un potentiel $V(\vec{r})$ avec $\vec{r} = \frac{\vec{GM}}{M_2 M_1} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

Dans la suite, nous nous placerons implicitement dans le référentiel du centre de masse et noterons simplement θ l'angle de diffusion du projectile (mobile fictif).

3°) Sections efficaces totales

Dans les conditions évoquées ci-dessus, le nombre de collisions (ou chocs) est certainement proportionnel au nombre de particules incidentes et au nombre de cibles que peut rencontrer chaque particule. Ce nombre de collisions est plus précisément proportionnel au nombre de projectiles par unité de surface, car augmenter ce nombre revient à augmenter la probabilité qu'a chaque projectile de passer au voisinage d'une cible. On a donc la relation (où S est la surface du faisceau de particules incidentes)

$$N_{\text{chocs}} \propto \frac{N_{\text{proj}} \cdot N_{\text{cibles}}}{S},$$

avec une constante de proportionnalité qui ne dépend plus que des caractéristiques physiques de la collision. On note d'ailleurs que l'argument sur la « densité surfacique » est symétrique vis-à-vis du nombre de projectiles (N_{proj}/S) et du nombre de cibles (N_{cibles}/S). Pour des raisons d'analyse dimensionnelle, la constante de proportionnalité doit être homogène à une surface : on l'appelle « section efficace » ou « section de choc », et on la note σ , soit

$$N_{\text{chocs}} = N_{\text{proj}} \cdot N_{\text{cibles}} \frac{\sigma}{S}.$$

Notant que pour une cible d'épaisseur ℓ et de densité (atomique) n , on a

$$N_{\text{cibles}} = n \cdot V = n S \ell,$$

la dépendance en S disparaît de la formule, et on a pour la probabilité totale d'interaction

$$P = \frac{N_{\text{chocs}}}{N_{\text{proj}}} = \frac{\sigma}{S} N_{\text{cibles}} = \sigma n \ell$$

Ceci nous permet de préciser maintenant ce que nous entendons par condition de collision unique ou cible mince : cette probabilité doit rester petite devant 1 et on doit avoir

$$n \sigma \ell \ll 1$$

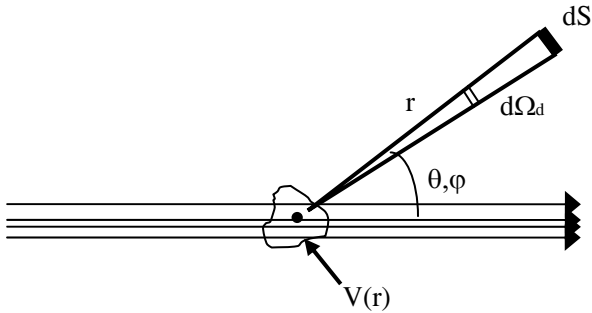
Nous donnons dès à présent une formule utile dans le cadre de la théorie quantique des collisions. Nous verrons que dans ce cas, on raisonne plutôt en termes de courant, ou flux de particules, c'est-à-dire nombre de particules par unité de surface et par unité de temps, ce qui s'écrira

$$\Phi_d = \Phi_i \cdot N_{\text{cibles}} \cdot \frac{\sigma}{S} = \Phi_i n \sigma \ell,$$

où Φ_i et Φ_d sont respectivement le flux de particule incident et le flux diffusé.

4°) Section efficace différentielle angulaire

a) section efficace de diffusion dans la direction θ, φ



$d\Omega$ autour de $\vec{\Omega}(\theta, \varphi)$

Section efficace totale : $\sigma_T \rightarrow P = \frac{N_{\text{cibles}}}{S} \sigma_T$

Section efficace différentielle dans la direction $\vec{\Omega}(\theta, \varphi)$ dans $d\Omega$: $d\sigma \rightarrow dP = \frac{N_{\text{cibles}}}{S} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$

$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ est aussi souvent notée simplement $\sigma(\theta, \varphi)$. On a bien évidemment

$$\sigma_T = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int \sigma(\theta, \varphi) d\Omega$$

- détection des particules (dN particules détectées dans $d\Omega$):

$$dN = N_p \frac{N_{\text{cibles}}}{S} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = N_p n \ell \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

- calcul théorique (on fait le calcul pour *une cible*) :

$$dN = \frac{N_p}{S} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{N_p}{S} \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad \text{soit aussi} \quad dN = \frac{dN_p}{dS} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{dN_p}{dS} \sigma(\theta, \varphi) d\Omega$$

ou encore

$$\frac{dN}{d\Omega} = \frac{dN_p}{dS} \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dN_p}{dS} \sigma(\theta, \varphi) \quad \text{soit par unité de temps} \quad \frac{d^2N}{d\Omega dt} = \frac{d^2N_p}{dS dt} \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d^2N_p}{dS dt} \sigma(\theta, \varphi)$$

ou, finalement, en termes de flux,

$$\Phi_d = \frac{d^2N}{dS dt} = \frac{d^2N}{r^2 d\Omega dt} = \frac{1}{r^2} \frac{d^2N_p}{dS dt} \sigma(\theta, \varphi) = \frac{1}{r^2} \Phi_i \sigma(\theta, \varphi) \Rightarrow$$

$$\sigma(\theta, \varphi) = r^2 \frac{\Phi_d}{\Phi_i}$$

5°) Collisions en mécanique classique

a) Trajectoire : limite classique

Exemples : boule de billard, théorie cinétique des gaz, diffusion neutron – noyau sous certaines conditions, ...

Pas d'influence de la structure de la cible et/ou du projectile

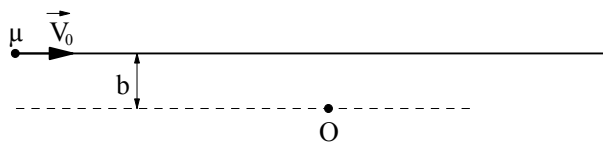
Notion de trajectoire ? $\lambda = \frac{h}{p}$ « dimensions caractéristiques

Exemple : proton de 0.082 eV $\rightarrow \lambda = 1 \text{ \AA} \Rightarrow \lambda \ll$ dimensions atomiques si $E \gg 1 \text{ eV}$

Ce qui compte, c'est p, donc plus m est grande, plus E doit être petite ...

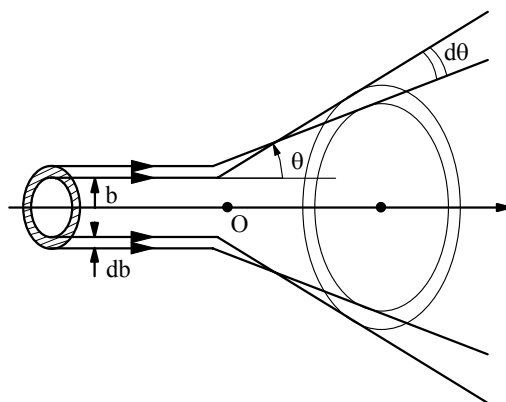
b) Paramètre d'impact

La notion de trajectoire permet de définir celle de paramètre d'impact : c'est la distance à laquelle le projectile passerait de la cible s'il n'y avait pas d'interaction (ou la distance entre l'axe défini par la direction du vecteur vitesse \vec{v}_0 du projectile **avant** collision et le centre de force). On le notera b.



c) Section efficace différentielle et paramètre d'impact

Dans le cas de la diffusion par un *potentiel central*, on a une symétrie de révolution autour de l'axe défini par la direction du vecteur vitesse \vec{v}_0 du projectile **avant** collision et le centre de force. Dans ces conditions, la dépendance en φ disparaît et seule la variable θ demeure ($\frac{d\sigma}{d\Omega}$ ne dépend que de θ). De façon très générale, l'angle de diffusion, θ , du projectile est alors lié au paramètre d'impact, et θ dépend de b (et réciproquement). En ce cas, autour d'une direction moyenne θ et d'un paramètre d'impact b correspondant, les variations de θ et b sont également directement liées. Par exemple, pour un potentiel répulsif (qui décroît en général quand r augmente), θ diminue quand b augmente. D'où la figure :



Les particules ayant un paramètre d'impact compris entre b et b+db sont celles passant dans la couronne de surface

$$d\sigma = 2\pi b db$$

Elles sont déviées à l'intérieur d'un angle solide

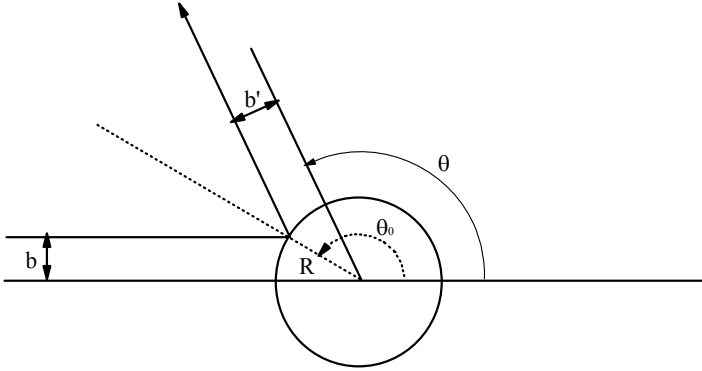
$$d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$$

d'où

$$\sigma(\theta, \varphi) = \sigma(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi b db}{2\pi \sin \theta d\theta} = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|$$

La relation entre b et θ est caractéristique du potentiel $V(r)$, et $\sigma(\theta, \varphi)$ caractérise le processus de diffusion par ce potentiel.

d) Exemple : le modèle des sphères dures



$$b = R \sin \theta_0$$

Choc élastique, conservation énergie : $p_f = p_i = p$

Force centrale, conservation moment cinétique : $p_i b = p_f R \sin \theta_0 = p_f b' = p R \sin(\theta_0 - \theta)$

$$\Rightarrow \theta_0 = (\theta_0 - \theta) \quad (!) \quad \text{ou} \quad \theta_0 = \pi - (\theta_0 - \theta) \Rightarrow \theta = 2\theta_0 - \pi \quad \cos \frac{\theta}{2} = \cos(\theta_0 - \frac{\pi}{2}) = \sin \theta_0 = \frac{b}{R}$$

$$\boxed{\cos \frac{\theta}{2} = \frac{b}{R}} \Rightarrow \frac{db}{d\theta} = -\frac{R}{2} \sin \frac{\theta}{2} \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \theta} \frac{R}{2} \sin \frac{\theta}{2} = \frac{R \cos \frac{\theta}{2}}{\sin \theta} \frac{R}{2} \sin \frac{\theta}{2} = \frac{R^2}{4}$$

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{R^2}{4}} \quad \boxed{\sigma = \pi R^2}$$

e) Déviation par un potentiel central : relation générale entre b , θ et $V(r)$

Théorème du moment cinétique : $\vec{L} = (\vec{r} \wedge \vec{p}) = \mu \vec{r} \wedge \vec{v} = \mu \vec{r} \wedge \frac{d\vec{r}}{dt} \Rightarrow \vec{L}$ constante du mouvement :

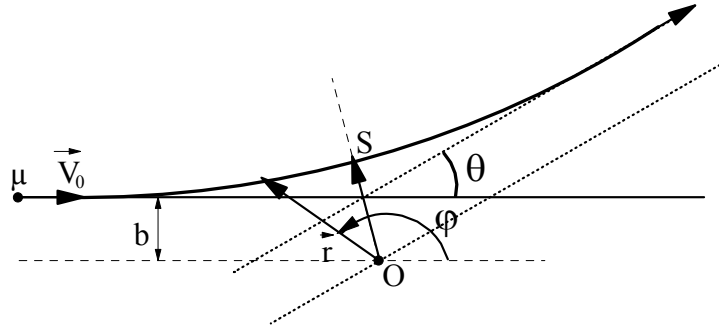
Energie mécanique totale : Système isolé $\rightarrow E_T = E_p + E_c = \text{cste} \rightarrow E = \frac{1}{2} \mu v^2 + V(r) = \text{cste}$

$$\frac{1}{2} \mu v^2 = \frac{1}{2} \mu [\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2] \quad \text{or} \quad \vec{L} = \mu \vec{r} \wedge \vec{v} \Rightarrow L = |\vec{L}| = \mu r^2 \dot{\varphi} \quad (= \text{cste}) \quad \rightarrow r^2 \dot{\varphi}^2 = \left(\frac{L}{\mu r} \right)^2 \Rightarrow E = \frac{\mu}{2} \dot{r}^2 + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) \Rightarrow$$

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \pm \sqrt{\frac{2}{\mu} (E - V(r)) - \frac{L^2}{\mu^2 r^2}} \quad \text{et} \quad \frac{d\varphi}{dt} \frac{dt}{dr} = \frac{d\varphi}{dr} = \frac{\dot{\varphi}}{\dot{r}} \Rightarrow \frac{d\varphi}{dr} = \pm \frac{L/\mu r^2}{\sqrt{\frac{2}{\mu} (E - V(r)) - \frac{L^2}{\mu^2 r^2}}}$$

L étant une constante du mouvement, on peut l'évaluer pour $r = \infty$ ("avant" la collision), ce qui donne $L = \mu v_0 b$ et on peut écrire (avec $\frac{2E}{\mu} = v_0^2$)

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



On a finalement :

$$-\Delta\varphi = (\pi - \theta) = -\int \frac{d\varphi}{dr} dr = -2 \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{d\varphi}{dr} dr = 2b \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}}} \frac{dr}{r^2} \quad \text{soit} \quad \boxed{\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) = b \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}}} \frac{dr}{r^2}}$$

r_{\min} se détermine en remarquant que pour $r = r_{\min}$ (=OS, distance d'approche), on a

$$\dot{r} = \pm \sqrt{\frac{2E}{\mu} \left(1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}\right)} = 0 \quad \text{soit donc} \quad \boxed{\left(1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}\right) = 0 \quad \text{en} \quad r = r_{\min}}$$

Note : pour une particule libre, on a (en posant $u = \frac{b}{r} \Rightarrow du = -\frac{b}{r^2} dr$)

$$\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) = b \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2}}} \frac{dr}{r^2} = -\int_1^0 \frac{1}{\sqrt{1 - u^2}} du = -[\arcsin(u)]_1^0 = -\left[0 - \frac{\pi}{2}\right] = \frac{\pi}{2} \quad \text{et donc} \quad \boxed{\theta = 0} \quad (!)$$

f) Potentiel coulombien, diffusion Rutherford

On obtient, à partir de la formule générale du b) et avec $u = \frac{b}{r}$ (et $a = \frac{C}{E}$, a étant appelée distance minimum d'approche) :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) &= b \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}}} \frac{dr}{r^2} = \int_0^{u_{\min}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{Cu}{Eb} - u^2}} du = \int_0^{u_{\min}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{a}{b}u - u^2}} du = \int_0^{u_{\min}} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{a}{2b}\right)^2 - \left(u + \frac{a}{2b}\right)^2}} du \\ \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) &= \left[\text{Arcsin} \frac{u + \frac{a}{2b}}{\sqrt{1 + \left(\frac{a}{2b}\right)^2}} \right]_0^{u_{\min}} = \text{Arcsin}(1) - \text{Arcsin} \frac{\frac{a}{2b}}{\sqrt{1 + \left(\frac{a}{2b}\right)^2}} \Rightarrow \sin \frac{\theta}{2} = \frac{\frac{a}{2b}}{\sqrt{1 + \left(\frac{a}{2b}\right)^2}} \Rightarrow \boxed{\text{tg}\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{a}{2b}} \end{aligned}$$

La section efficace s'obtient en écrivant

$$\begin{aligned} \text{tg} \frac{\theta}{2} = \frac{a}{2b} \Rightarrow \frac{1}{\cos^2 \frac{\theta}{2}} \frac{d\theta}{2} &= -\frac{a}{2b^2} db \Rightarrow \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{b^2}{a \cos^2 \frac{\theta}{2}} = \frac{a^2}{a \cos^2 \frac{\theta}{2} 4 \text{tg}^2 \frac{\theta}{2}} = \frac{a}{4 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \\ \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| &= \frac{a}{2 \text{tg} \frac{\theta}{2} 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} 4 \sin^2 \frac{\theta}{2}} = \frac{a^2}{16 \sin^4 \frac{\theta}{2}} = \left(\frac{C}{4E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{16\pi\epsilon_0 E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{8\pi\epsilon_0 \mu v_0^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}}$$

6°) Collisions élastiques en mécanique quantique

a) **Etats stationnaires : onde incidente, onde diffusée, courants de probabilité**

Dans l'esprit de ce qui se fait pour le cas à une dimension (transmission d'une barrière de potentiel par exemple), nous considérerons des *états stationnaires de diffusion*. La direction du faisceau incident étant prise suivant l'axe Oz, l'état stationnaire $\varphi_{k_i}(\vec{r})$ associé au flux de particules incidentes peut s'écrire, loin du centre diffuseur (c'est à dire dans une région où le potentiel d'interaction est négligeable)

$$\varphi_{k_i}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} = e^{ikz} \quad (\text{onde plane})$$

Le courant de probabilité associé à $\varphi_{k_i}(\vec{r})$ est donné par :
$$\vec{J}_i(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2\mu i} \left[\varphi_{k_i}^*(\vec{r}) (\vec{\nabla} \varphi_{k_i}(\vec{r})) - (\vec{\nabla} \varphi_{k_i}^*(\vec{r})) \varphi_{k_i}(\vec{r}) \right] = \frac{\hbar \vec{k}_i}{\mu}$$

et le flux incident associé (nombre de particules par seconde et par unité de surface) est proportionnel à $\vec{J}_i(\vec{r})$: $\Phi_i = C |\vec{J}_i|$.

Aux particules diffusées correspond de même un flux diffusé, Φ_d , proportionnel au courant de probabilité associé à l'état stationnaire de diffusion. La plupart des particules incidentes ne sont pas déviées, et il subsistera une composante onde plane de même forme que $\varphi_{k_i}(\vec{r})$. En ce qui concerne les particules diffusées dans une direction $\Omega(\theta, \varphi)$, nous considérerons celles qui sont émises dans un angle solide $d\Omega$ avec une probabilité reliée à la section efficace différentielle angulaire de diffusion, $\frac{d\sigma}{d\Omega}$. Soit Φ_i le flux de particules incidentes, dn le nombre de particules diffusées par unité de temps et arrivant sur un

détecteur de surface dS situé à la distance r , et Φ_d le flux de particules diffusées dans l'angle solide $d\Omega$. On a

$$dn = \Phi_d dS$$

$$d\sigma = \frac{dn}{\Phi_i} = \frac{\Phi_d}{\Phi_i} dS = \frac{\Phi_d}{\Phi_i} r^2 d\Omega$$

$$\text{soit} \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = r^2 \frac{\Phi_d}{\Phi_i} = r^2 \frac{|\vec{J}_d|}{|\vec{J}_i|}$$

(avec le même facteur de proportionnalité C entre Φ et \vec{J} pour flux incident et flux réfléchi).

La quantité $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ doit bien évidemment être indépendante de r : ceci est lié au fait que si Φ_i et $d\Omega$ sont constants, le nombre de particules diffusées dans $d\Omega$ doit se conserver (et est donc constant). $|\vec{J}_i|$ étant une constante, on en déduit que $|\vec{J}_d|$ doit être proportionnel à $1/r^2$.

L'onde diffusée ne peut donc pas être décrite par une onde plane $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$. Il est par contre facile de vérifier qu'on obtient un comportement convenable avec une onde sphérique du type

$$f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

La fonction $f_k(\theta, \varphi)$ rend compte du fait que la diffusion est en général anisotrope, et que donc l'amplitude de l'onde diffusée dépend des angles θ et φ . $f_k(\theta, \varphi)$ est appelée **amplitude de diffusion**.

Le courant de probabilité associé est essentiellement radial et donné par :

$$\vec{J}_r = \frac{\hbar}{2\mu i} |f_k(\theta, \varphi)|^2 \left(\left(\frac{i\vec{k}}{r^2} - \frac{1}{r^3} \right) - \left(-\frac{i\vec{k}}{r^2} - \frac{1}{r^3} \right) \right) \vec{e}_r = \frac{\hbar \vec{k}_r}{\mu} \frac{1}{r^2} |f_k(\theta, \varphi)|^2$$

Finalement, l'état stationnaire de diffusion est une superposition de l'onde incidente et de l'onde diffusée, et son comportement asymptotique (c'est à dire pour $r \rightarrow \infty$), est de la forme

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} + f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

La section efficace différentielle, quand à elle, est donc donnée par (avec $k_i = k_f$ pour une collision élastique):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r^2 \frac{\Phi_d}{\Phi_i} = r^2 \frac{|\vec{J}_f|}{|\vec{J}_i|} = |f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi)|^2$$

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

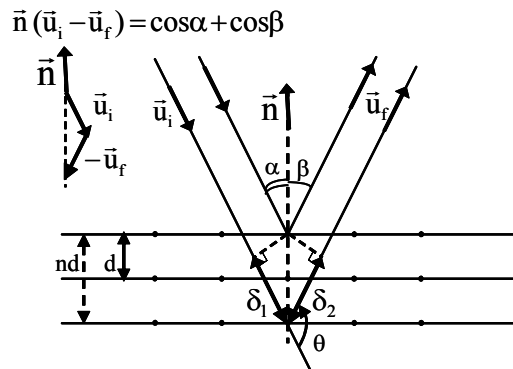
Même si le raisonnement ci-dessus n'est peut-être pas une véritable démonstration, on peut démontrer à priori que les états stationnaires de diffusion doivent effectivement avoir le comportement de $\Psi_{\mathbf{k}}(\vec{r})$: ce doit bien entendu être par ailleurs une solution de l'équation de Schrödinger pour les états non liés, soit

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\vec{r}) \right] \Psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = E \Psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) \quad (E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu})$$

b) Diffusion cohérente, diffraction de Bragg

Bien que nous ayons à priori exclu le cas de la diffusion cohérente de notre sujet d'étude, il est cependant instructif d'examiner brièvement cette situation, en nous intéressant à la diffraction de Bragg par un cristal. Nous verrons en particulier qu'il est possible d'en tirer quelques conclusions générales sur des situations telles que la diffusion d'électrons rapides par un noyau constitué de nucléons.

Considérons la diffusion, dite diffraction de Bragg, de l'onde incidente associée à une particule incidente sur les noyaux (ou atomes) de l'arrangement régulier d'un cristal parfait. Nous nous intéressons tout d'abord aux interférences constructives de cette onde sur une rangée repérée par la quantité nd sur le dessin ci-dessous.



On a

$$\delta_1 = nd \cos \alpha \quad \delta_2 = nd \cos \beta \quad \delta = nd (\cos \alpha + \cos \beta) = nd \vec{n}(\vec{u}_i - \vec{u}_f)$$

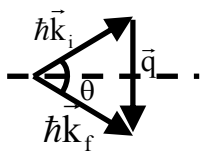
$$\text{Soit une différence de marche sur la rangée (avec } \vec{d} = \vec{n}d \text{)} \quad \delta = \Delta_n = n\vec{d}(\vec{u}_i - \vec{u}_f)$$

- un centre : $\Psi = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$
- une rangée : $\Psi = \sum_n f(\theta) \frac{e^{ik(r+\Delta_n)}}{r} = \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \left[\sum_n e^{ik\Delta_n} \right]$

On peut aussi écrire

$$k\Delta_n = n \vec{d} \cdot (\vec{k}_i - \vec{k}_f) = n \vec{d} \cdot (\vec{k}_i - \vec{k}_f) = -\frac{\vec{q} \cdot n\vec{d}}{\hbar}$$

en introduisant le *moment transféré* $\vec{q} = \hbar(\vec{k}_f - \vec{k}_i)$



On a pour la valeur de q : $|\vec{k}_f| = |\vec{k}_i| = k \Rightarrow q = 2\hbar k \sin \frac{\theta}{2}$

Finalement, on peut écrire

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \left| \sum_{n=1}^N e^{-i \frac{n\vec{q} \cdot \vec{d}}{\hbar}} \right|^2$$

On a donc un maximum d'intensité quand les amplitudes s'ajoutent de façon constructive, soit pour $\frac{\vec{q} \cdot \vec{d}}{\hbar} = 2p\pi$

On note que si $\alpha = \beta$, \vec{q} et \vec{d} sont colinéaires et on a alors $2d \sin \frac{\theta}{2} = p\lambda$

qui est la loi dite de Bragg si θ est la déviation totale. Au maximum de diffraction, $d\sigma/d\Omega$ est proportionnelle à $N^2 |f(\theta)|^2$ pour des rangées de N atomes.

Remarque 1 : Il y a en fait absorption (atténuation) de l'onde incidente au fur et à mesure qu'elle pénètre dans le cristal. Il faut aussi tenir compte de la structure exacte du cristal (cc, hc,...), des vibrations des centres diffuseurs dues à l'agitation thermique, etc..., pour un calcul exact de $d\sigma/d\Omega$.

Remarque 2 : Pour qu'il puisse y avoir diffusion cohérente, il faut que $\lambda < 2d$ ($n\lambda = 2d \sin\theta$), mais pas trop (disons $d/100 < \lambda < 2d$). Pour des électrons de 1 GeV/c, $\lambda \sim 1\text{F}$, et il y a donc possibilité de diffusion cohérente sur les divers protons du noyau séparés par des distances du même ordre de grandeur. L'expression établie plus haut peut être transposée en se servant non plus de la « distance », mais de la notion de densité de probabilité de présence des protons dans le noyau, $\rho(r)$, et en remplaçant alors la somme discrète par une intégrale sur le volume du noyau :

$$f(\theta) \sum_{n=1}^N e^{-i \frac{\vec{q} \cdot n\vec{d}}{\hbar}} \rightarrow f(\theta)_{\text{noyau}} = f(\theta)_{\text{proton}} \int \rho(r) e^{-i \frac{\vec{q}\vec{r}}{\hbar}} d\vec{r}$$

où $f(\theta)_{\text{proton}}$ est l'amplitude de diffusion élastique électron-proton (qui conduit à la formule de diffusion de Rutherford, valable même en mécanique quantique). On a alors

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{noyau}} = |f(\theta)_{\text{proton}}|^2 \left| \int \rho(r) e^{-i \frac{\vec{q}\vec{r}}{\hbar}} d\vec{r} \right|^2 = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{e-proton}} Z^2 |F(q)|^2$$

où $F(q)$ porte le nom de facteur de forme, et peut se calculer en faisant l'hypothèse d'une distribution de charge des protons dans le noyau : en définitive, on voit bien comment la mesure des sections efficaces différentielles angulaires de diffusion élastique des électrons sur les noyaux permet de remonter à un modèle de distribution de charge des noyaux.

Remarque supplémentaire : Pour une charge ponctuelle,

$$\int \rho(\vec{r}) e^{-i \frac{\vec{q}\vec{r}}{\hbar}} d\vec{r} = \int \delta(\vec{r}) e^{-i \frac{\vec{q}\vec{r}}{\hbar}} d\vec{r} = 1$$

7°) Diffusion par un potentiel central : méthode des déphasages

a) Introduction : principe de la méthode, ondes partielles et déphasages

Nous avons vu que la section efficace de diffusion est donnée par

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r^2 \frac{|\vec{J}_f|}{|\vec{J}_i|} = |f_k(\theta, \varphi)|^2$$

$f(k, \theta, \varphi)$ étant le coefficient intervenant dans la forme asymptotique de l'état stationnaire de diffusion qui s'écrit

$$\Psi_k(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\cong} e^{ikz} + f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Cet état stationnaire doit maintenant être déterminé en écrivant qu'il est solution de l'équation de Schrödinger pour des états non liés. Diverses méthodes existent pour trouver cet état, mais il faut noter qu'en tout état de cause, il n'est en général pas possible, sauf cas particulier, de trouver des solutions analytiques exactes et il faudra avoir recours à des méthodes d'approximation.

Dans le cas où le potentiel est central (et de courte portée pour que la méthode utilisée ici marche bien), le moment cinétique est une constante du mouvement (invariance par rotation). On peut donc chercher des états stationnaires qui soient des états propres communs à \hat{H} , \hat{L}^2 et \hat{L}_z . Ces états propres, dont la dépendance angulaire est donc celle des harmoniques sphériques, peuvent servir de base sur laquelle on peut développer la fonction d'onde : on appelle **ondes partielles** les fonctions d'onde associées à ces états (non liés), et nous les noterons $\varphi_{klm}(\vec{r})$.

Pour de grandes valeurs de r , ces états doivent tendre vers ceux de \hat{H}_0 , hamiltonien de la particule libre (cas du potentiel nul). Ces fonctions d'onde associées à des états d'une particule libre de moment cinétique bien défini sont appelés **ondes sphériques libres**, et seront notées $\varphi_{klm}^0(\vec{r})$. Elles sont l'équivalent à 3 dimensions des ondes planes des problèmes à une dimension. En particulier, nous verrons que leur comportement asymptotique ($r \rightarrow \infty$) est la superposition d'une onde entrante e^{-ikr}/r et d'une onde sortante e^{ikr}/r présentant une différence de phase égale à $\ell\pi$. Les ondes partielles, quand à elles, auront un caractère similaire, mais la différence de phase entre l'onde sortante et l'onde entrante diffère de $\ell\pi$ par une quantité δ_ℓ , appelée déphasage, et résultant de l'action du potentiel $V(r)$. **Toute l'action du potentiel sur ces ondes partielles étant contenue dans ce déphasage, les valeurs des δ_ℓ suffiront pour calculer la section efficace.**

b) Ondes sphériques libres

Le cas des ondes sphériques libres correspond à $V(\vec{r}) = 0$. On a donc à résoudre :

$$H_0 \left| \varphi_{klm}^{(0)} \right\rangle = E_k \left| \varphi_{klm}^{(0)} \right\rangle \quad \left(\text{avec } \hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2\mu} \right)$$

qui s'écrit en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E_{k\ell} \right] u_{k\ell}^{(0)}(r) = 0$$

où on a posé $\varphi_{klm}^{(0)}(\vec{r}) = R_{k\ell}^{(0)}(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ avec $R_{k\ell}^{(0)}(r) = \frac{1}{r} u_{k\ell}^{(0)}(r)$ à compléter par $u_{k\ell}^{(0)}(0) = 0$.

Aux grandes valeurs de r , l'équation devient

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E_{k\ell} \right] u_{k\ell}^{(0)}(r) \approx 0$$

Ce qui indique que E ne dépend pas de ℓ . Nous poserons donc $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$

On obtient comme solutions :

$$\varphi_{k,\ell,m}^{(0)}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_\ell(kr) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

où on a posé :

$$j_\ell(\rho) = (-1)^\ell \rho^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\sin \rho}{\rho}$$

$j_\ell(\rho)$ est appelée *fonction de Bessel sphérique d'ordre ℓ* .

Remarque : l'orthonormalisation s'écrit :

$$\langle \varphi_{k\ell m}^{(0)} | \varphi_{k'\ell' m'}^{(0)} \rangle = \frac{2}{\pi} k k' \int_0^\infty j_\ell(kr) j_{\ell'}(k'r) r^2 dr \int d\Omega Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \varphi) = \delta(k-k') \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

Allure générale et comportement aux limites des fonctions de Bessel sphériques :

Malgré leur forme à priori assez compliquée, ces fonctions ont un comportement aux limites assez simple, qui est ce qui nous intéressera plus particulièrement par la suite. Examinons ce comportement.

Premier cas : $r \rightarrow 0$.

On a :

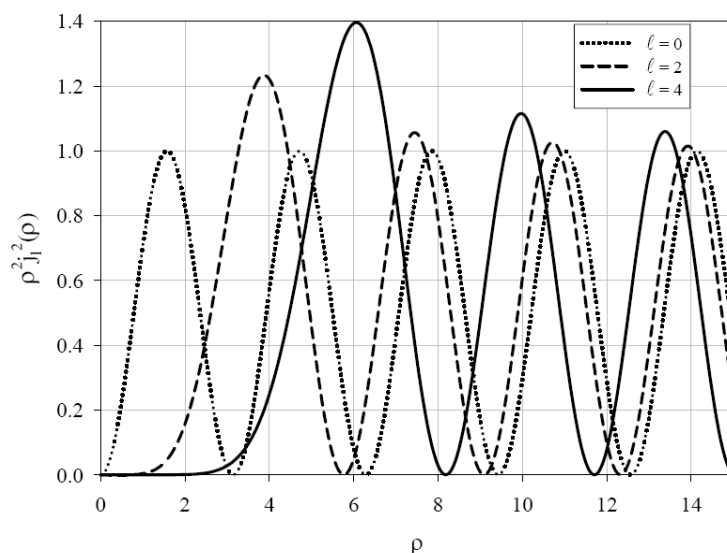
$$j_\ell(\rho) \underset{\rho \rightarrow 0}{\sim} = \frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!} \quad ((2\ell+1)!! = (2\ell+1)(2\ell-1)(2\ell-3)\dots) \Rightarrow \varphi_{k\ell m}^{(0)}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \frac{(kr)^\ell}{(2\ell+1)!!}$$

On remarque que la probabilité de présence en $r = 0$ est d'autant plus petite que ℓ est grand ; ceci peut s'interpréter en termes de *hauteur de la barrière centrifuge* : plus ℓ est grand, plus le potentiel effectif en $\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$ est grand au voisinage de

l'origine et "interdit" la pénétration dans la zone des petites valeurs de r .

Si on trace l'allure des variations de la fonction $\rho^2 j_\ell^2(\rho)$ qui donne la densité de probabilité de présence, on trouve d'ailleurs que cette fonction ne prend des valeurs notables que pour $\rho \geq \sqrt{\ell(\ell+1)}$ (premier point d'inflexion pour la fonction).

Fonctions de Bessel sphériques



La probabilité de présence est pratiquement nulle pour :

$$r \leq \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{k} = \frac{\sqrt{\hbar^2 \ell(\ell+1)}}{\hbar k}$$

On remarque que $\sqrt{\hbar^2 \ell(\ell+1)}$ est le "module" du vecteur moment cinétique et $\hbar k$ l'impulsion de la particule. Or ces quantités sont reliées au paramètre d'impact b ; classiquement, on a : $|L| = b|p|$

et on a donc : $\rho^2 j_\ell^2(\rho) \ll 1$ pour $r \leq b$

On remarquera finalement que L est d'autant plus grand que b est grand (pour p fixé).

Deuxième cas : $r \rightarrow \infty$.

On a :

$$j_\ell(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \ell \frac{\pi}{2}\right) \quad \Rightarrow \quad \varphi_{k\ell m}^{(0)}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \frac{\sin\left(kr - \ell \frac{\pi}{2}\right)}{kr}$$

On trouve donc pour $r \rightarrow \infty$, un comportement des ondes sphériques en $\frac{\sin kr}{r}$. **On notera la présence d'un déphasage égal à $\ell \frac{\pi}{2}$, par rapport au cas $\ell=0$ (fonction $\varphi_{k,0,0}^{(0)}(\mathbf{r})$) lié à l'existence de la barrière centrifuge.**

Ondes sphériques libres et ondes planes

Les ondes planes, comme les fonctions de Bessel sphériques, *constituent également une base d'états propres de \hat{H}_0* . On peut passer d'une base à l'autre par les formules (que nous ne démontrerons pas):

$$\varphi_{k\ell m}^{(0)}(\vec{r}) = \frac{(-1)^\ell}{4\pi} i^\ell \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} \int d\Omega_k Y_\ell^m(\theta_k, \varphi_k) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

ou, inversement :

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} i^\ell Y_\ell^{m*}(\theta_k, \varphi_k) j_\ell(kr) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

(ici θ_k et φ_k repèrent la direction de \vec{k} et θ et φ celle de \vec{r})

ou, dans le cas particulier où $\vec{k} // oz$ ($\vec{k} = k\vec{e}_z$):

$$e^{ikr \cos \theta} = e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} j_{\ell}(kr) Y_{\ell}^0(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell+1) j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta)$$

En tout état de cause, on remarque que d'une part, un état de moment cinétique bien défini (fonction de Bessel Sphérique) fait intervenir toutes les **directions** possibles de l'impulsion (ou vecteur d'onde) et que d'autre part, un état d'impulsion bien défini (onde plane) fait intervenir tous les moments cinétiques possibles.

Résumé

Les ondes sphériques libres s'écrivent :

$$\varphi_{k\ell m}^{(0)}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_{\ell}(kr) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

Le comportement asymptotique de ces ondes est régi par celui de $j_{\ell}(kr)$, et pour kr tendant vers l'infini, on a :

$$\varphi_{k\ell m}^{(0)}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \frac{\sin\left(kr - \ell \frac{\pi}{2}\right)}{kr} = -\sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr} e^{i\ell \frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\ell \frac{\pi}{2}}}{2ikr}$$

Le comportement de ces ondes pour r infini résulte donc de la superposition d'une *onde entrante* en $\frac{e^{-ikr}}{r}$ et d'une *onde sortante* en $\frac{e^{ikr}}{r}$; par ailleurs, leurs amplitudes sont déphasées de $\ell\pi$.

Il est utile de se souvenir que ces ondes sphériques libres constituent une base d'états propres de \hat{H}_0 , donc une base sur laquelle on peut développer tout vecteur d'état. En particulier, dans le cas des ondes planes dont le vecteur d'onde \vec{k} est dirigé suivant Oz, on a :

$$\varphi_{\mathbf{k}_i}(\vec{r}) = e^{ikz}$$

et le développement :

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} j_{\ell}(kr) Y_{\ell}^0(\theta)$$

Le fait que l'onde incidente corresponde à un état présentant la symétrie de révolution autour de Oz implique qu'elle est indépendante de l'angle azimuthal φ et que son développement ne comprend que les ondes partielles pour lesquelles m est nul : *ce type de propriété sera conservé pour les ondes partielles dans le cas d'un potentiel central*. Nous poursuivrons cependant le raisonnement en ignorant pour l'instant cette simplification.

c) Ondes partielles dans le potentiel $V(r)$: déphasages

i) équation radiale - déphasages :

Nous étudions maintenant explicitement l'effet du potentiel $V(r)$ sur l'état stationnaire de collision. Les ondes partielles $\varphi_{k\ell m}(\vec{r})$, de la forme :

$$\varphi_{k\ell m}(\vec{r}) = R_{k\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = \frac{u_{k\ell}(r)}{r} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

sont telles que $u_{k\ell}(r)$ soit solution de l'équation radiale :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{k\ell}(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} u_{k\ell}(r)$$

et satisfasse : $u_{k\ell}(0) = 0$

Pour r grand, l'équation radiale devient ($V(r) \rightarrow 0$ pour $r \rightarrow \infty$) :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] u_{k\ell}(r) \sim 0 \quad r \rightarrow \infty$$

et sa solution générale est :

$$u_{k\ell}(r) \sim A e^{ikr} + B e^{-ikr} \quad r \rightarrow \infty$$

Dans le cadre du pseudo problème à une dimension que nous examinons ici, ce comportement correspond à la superposition d'une onde plane "incidente" e^{-ikr} (onde entrante) et d'une onde plane "réfléchie" e^{ikr} (onde sortante) ; le coefficient de transmission est nul dans la région $r < 0$ (!) qui est interdite, et le "coefficient de réflexion" doit être égal à 1 (conservation du flux total dans une diffusion *sans absorption*), soit :

$$R = \frac{|A|^2}{|B|^2} = 1 \quad \Rightarrow \quad |A| = |B|$$

On peut donc écrire :

$$A = |A| e^{i\phi_A} \quad \text{et} \quad B = |A| e^{i\phi_B}$$

d'où :

$$u_{k\ell}(r) \sim |A| \left(e^{ikr} e^{i\phi_A} + e^{-ikr} e^{i\phi_B} \right) \quad r \rightarrow \infty$$

ou encore :

$$u_{k\ell}(r) \sim C \sin(kr - \beta_\ell) \quad r \rightarrow \infty$$

où la phase β_ℓ se calcule en cherchant la solution de l'équation radiale qui s'annule en $r = 0$. (ou toute autre condition particulière)

Dans le cas des ondes sphériques libres ($V(r) = 0$), on a :

$$u_{k\ell}^{(0)}(r) \sim C \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) \quad r \rightarrow \infty$$

soit $\beta_\ell = \frac{\ell\pi}{2}$. On convient de prendre cette valeur comme valeur de référence, et de poser :

$$\beta_\ell = \frac{\ell\pi}{2} - \delta_\ell$$

et donc d'écrire :

$$u_{k\ell}(r) \sim C \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right) \quad r \rightarrow \infty$$

Les ondes partielles ont donc un comportement asymptotique qui peut s'écrire :

$$\varphi_{k\ell m}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C \frac{\sin\left(kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_\ell\right)}{r} Y_\ell^m(\theta, \varphi) = -C Y_\ell^m(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr} e^{i\left(\ell \frac{\pi}{2} - \delta_\ell\right)} - e^{ikr} e^{-i\left(\ell \frac{\pi}{2} - \delta_\ell\right)}}{2ir}$$

Notation : pour faciliter la comparaison avec les ondes sphériques libres, on pose :

$$\tilde{\varphi}_{k\ell m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{kC} e^{i\delta_\ell} \varphi_{k\ell m}(\mathbf{r})$$

soit :

$$\tilde{\varphi}_{k\ell m}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -Y_\ell^m(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr} e^{i\ell \frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\ell \frac{\pi}{2}} e^{2i\delta_\ell}}{2ikr}$$

Sous cette forme, l'onde partielle apparaît comme la superposition d'une onde entrante e^{-ikr} de même phase que dans le cas de l'onde sphérique libre, et d'une onde sortante déphasée de $2\delta_\ell$ par rapport à l'onde sortante libre : *ce déphasage résume à lui seul tout l'effet du potentiel sur l'onde partielle.*

ii) *section efficace* :

Nous écrivons maintenant le développement de l'état stationnaire de diffusion $\Psi_{\mathbf{k}}(\vec{r})$ en termes d'ondes partielles, en tenant compte cette fois ci du fait, qu'en raison de la symétrie de révolution du problème, il ne doit pas dépendre de l'angle φ , et que donc son développement ne comprend que des ondes partielles pour lesquelles $m = 0$, soit :

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell \tilde{\varphi}_{k\ell 0}(\vec{r})$$

La direction du vecteur d'onde incident (qui sera plus tard noté \vec{k}_i) est celle de l'axe Oz, son module k suffit à le définir ; par ailleurs, toutes les $\tilde{\varphi}_{k\ell 0}(\vec{r})$ de diverses valeurs de ℓ sont néanmoins associées à la même énergie $\frac{\hbar k^2}{2\mu}$, et leur superposition reste donc un état propre.

Reste à vérifier que cet état propre a le bon comportement asymptotique. C'est justement l'étude du comportement asymptotique qui fixera les valeurs des coefficients C_ℓ du développement.

Dans la limite $V(r) \equiv 0$, on connaît ce développement : c'est celui de l'onde plane :

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} j_\ell(kr) Y_\ell^0(\theta)$$

Son comportement asymptotique est déterminé par celui des ondes sphériques libres qui interviennent dans son développement, soit

$$e^{ikz} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} - \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_\ell^0(\theta) \frac{e^{-ikr} e^{i\ell \frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\ell \frac{\pi}{2}}}{2ikr}$$

Nous avons vu que les ondes partielles $\tilde{\varphi}_{k\ell 0}(\vec{r})$ ne diffèrent des ondes sphériques libres, tout au moins dans leur comportement asymptotique, que par le déphasage $2\delta_\ell$. On doit donc pouvoir écrire :

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} \tilde{\varphi}_{k\ell 0}(\vec{r})$$

ce que nous vérifions de suite, en s'assurant que ce développement conduit au bon comportement asymptotique de $\Psi_k(\vec{r})$:

$$\Psi_k(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} - \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_\ell^0(\theta) \frac{e^{-ikr} e^{i\ell\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\ell\frac{\pi}{2}} e^{2i\delta_\ell}}{2ikr}$$

On a :

$$e^{2i\delta_\ell} = e^{i\delta_\ell} (e^{i\delta_\ell} - e^{-i\delta_\ell}) + 1 = 1 + 2i \sin \delta_\ell e^{i\delta_\ell}$$

$$\Rightarrow \Psi_k(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} - \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_\ell^0(\theta) \left[\frac{e^{-ikr} e^{i\ell\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\ell\frac{\pi}{2}}}{2ikr} - 2i \sin \delta_\ell e^{i\delta_\ell} \frac{e^{ikr} e^{-i\ell\frac{\pi}{2}}}{2ikr} \right]$$

soit :

$$\boxed{\Psi_k(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f_k(\theta)}$$

Nous avons donc retrouvé la forme asymptotique de l'état stationnaire de diffusion prévue au départ à partir de considérations portant sur les courants de probabilité. Les coefficients du développement que nous avons choisi sont donc "les bons" (forme de Ψ_k), et nous avons également obtenu l'expression de l'amplitude de diffusion $f_k(\theta)$.

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} \sin \delta_\ell e^{i\delta_\ell} e^{-i\ell\frac{\pi}{2}} Y_\ell^0(\theta)$$

Soit avec

$$e^{i\frac{\pi}{2}} = i \Rightarrow e^{-i\ell\frac{\pi}{2}} = i^{-\ell}$$

$$\boxed{f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell Y_\ell^0(\theta)}$$

On en déduit la section efficace différentielle angulaire :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell Y_\ell^0(\theta) \right|^2$$

et la section efficace totale :

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{1}{k^2} \sum_{\ell} \sum_{\ell'} 4\pi \sqrt{(2\ell+1)(2\ell'+1)} e^{i(\delta_\ell - \delta_{\ell'})} \sin \delta_\ell \sin \delta_{\ell'} \int d\Omega Y_{\ell'}^{0*}(\theta) Y_\ell^0(\theta)$$

Mais la relation d'orthogonalité des harmoniques sphériques :

$$\int d\Omega Y_{\ell'}^{m'*}(\theta, \varphi) Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

permet de simplifier cette expression qui devient :

$$\boxed{\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell}$$

iii) cas du potentiel de portée finie - exemples :

La méthode des déphasages est plus particulièrement intéressante dans le cas des *potentiels de courte portée* : en effet, dans ce cas, *seul un petit nombre de déphasages intervient*. Supposons par exemple que :

$$V(r) = 0 \quad \text{pour } r > r_0$$

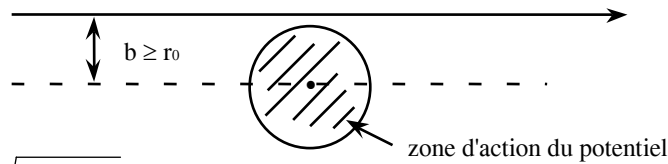
Nous avons vu qu'une onde sphérique libre ne "pénètre" pratiquement pas à l'intérieur d'une sphère de rayon b (b paramètre d'impact) avec :

$$b \sim \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{k}$$

Si donc $V(r) = 0$ pour $r > r_0$, toutes les ondes pour lesquelles :

$$\sqrt{\ell(\ell+1)} \geq kr_0$$

ne "verront" pratiquement pas le potentiel, suivant l'image naïve suivante :



$$|\bar{L}(b, k)| = |\bar{p}|b = \hbar kb \equiv \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar^2$$

Les déphasages seront donc tous nuls pour $\ell \geq \ell_M$ avec ℓ_M donné par :

$$\ell_M(\ell_M + 1) \sim (kr_0)^2$$

Considérons par exemple le cas de la *diffusion élastique par une "sphère dure"* :

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{pour } r > r_0 \\ \infty & \text{pour } r < r_0 \end{cases}$$

A *basse énergie*, on peut alors se trouver dans un cas tel que :

$$kr_0 \ll 1$$

d'où $\ell_M \approx 0$, et on peut négliger tous les déphasages, sauf celui de l'onde S ($\ell = 0$). On a alors :

$$f_k(\theta) = \frac{e^{i\delta_0} \sin \delta_0}{k} \quad \left(Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \right)$$

La section efficace différentielle ne dépend plus de θ . Elle est isotrope et vaut :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2}$$

et la section efficace totale vaut :

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0$$

Nous illustrons au passage le calcul du déphasage dans le cas simple envisagé ici. L'équation radiale s'écrit dans le cas envisagé :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] u_{k,0}(r) = 0 \quad \text{pour } r > r_0 \quad \text{avec} \quad u_{k,0}(r_0) = 0$$

Soit ici : $u_{k,0}(r) = C \sin(kr - \beta_0)$ β_0 étant fixé par $u_{k,0}(r_0) = 0$

$$\Rightarrow u_{k,0}(r) = C \sin k(r - r_0)$$

Ici la forme asymptotique de $u_{k,0}(r)$ se confond avec sa forme générale. Compte tenu de $\ell=0 \left(\frac{\ell\pi}{2} = 0 \right)$, on a donc simplement :

$$u_{k,0}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C \sin(kr - kr_0) \equiv C \sin(kr + \delta_0)$$

d'où : $\boxed{\delta_0 = -kr_0}$

et

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sin^2 kr_0}{k^2} \quad ; \quad \sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 kr_0$$

Soit, compte tenu du fait que $kr_0 \ll 1 \Rightarrow \sin kr_0 \approx kr_0$:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_0^2} \quad ; \quad \boxed{\sigma_{\text{tot}} = 4\pi r_0^2}$$

Cette section efficace est indépendante de l'énergie et quatre fois plus grande que la section efficace géométrique πr_0^2 : il s'agit là d'un effet analogue à celui de la diffraction des ondes lumineuses sur un objet opaque.

Le cas envisagé ici est particulièrement simple : bien souvent, le calcul des déphasages ne peut se faire que de façon numérique, connaissant la forme du potentiel. En fait, la méthode des déphasages est un guide utile à chaque fois que l'on a affaire à un potentiel de courte portée dont on ne connaît pas la forme analytique ; *les résultats expérimentaux suggèrent le nombre d'ondes partielles* à inclure dans le traitement théorique susceptible de reproduire ces résultats : une section efficace différentielle isotrope est le signe qu'il suffit de se limiter à une onde S . Si au contraire la section efficace présente une dépendance en θ , on peut en faire *l'analyse en ondes partielles* : connaissant la forme analytique des $Y_\ell^0(\theta)$, on peut chercher les valeurs des déphasages qui reproduisent $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ suivant la formule :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{\ell=0}^{\ell_M} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell Y_\ell^0(\theta) \right|^2$$

(où on cherchera à garder ℓ_M , c'est-à-dire le nombre de termes nécessaires, le plus petit possible). On peut ensuite utiliser cette détermination expérimentale des déphasages pour essayer d'élaborer un modèle théorique de potentiel.

Remarque : on peut bien sûr jouer sur la vitesse de collision (k) pour faire apparaître un nombre plus ou moins grand de déphasages ; la formule :

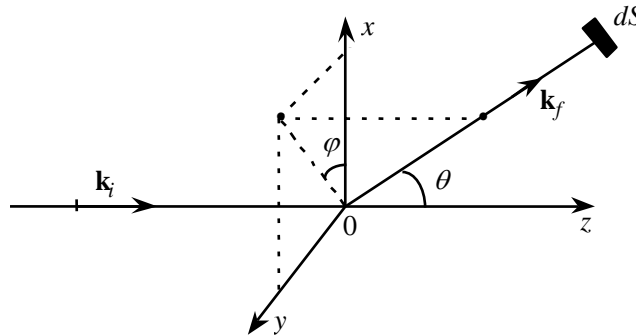
$$\ell_M(\ell_M + 1) \sim kr_0$$

indique que ce nombre augmente avec la vitesse (ou l'énergie) des projectiles. On notera aussi que les déphasages dépendent de la vitesse (k), et que leur variation avec celle-ci est également une information intéressante.

8°) Equation intégrale de la diffusion :

a) **équation de Schrödinger** :

Nous allons nous intéresser dans ce qui suit au comportement asymptotique ($r \rightarrow \infty$) de l'onde stationnaire de diffusion $\Psi(\vec{r})$ en utilisant un formalisme différent et plus général. Dans le problème envisagé, nous nous limitons cependant pour l'instant aux diffusions élastiques, en étudiant la probabilité qu'a une particule de vecteur d'onde initial \vec{k}_i d'être diffusée dans une direction correspondant au vecteur d'onde \vec{k}_f , repérée par les angles polaires (θ, φ) (le vecteur d'onde \vec{k}_i définit la direction de l'axe Oz) :



Nous repèrerons par un vecteur d'onde \vec{k}_i dirigé vers les z positifs l'onde (plane) incidente, et par \vec{k}_f la direction des particules diffusées dans la direction $\vec{\Omega}(\theta, \varphi)$. Remarquons que dans un problème de diffusion élastique (le centre diffuseur est en 0), on aura :

$$E = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad \Rightarrow \quad |\vec{k}_i| = |\vec{k}_f| = k$$

Nous considérons donc une onde plane incidente de vecteur d'onde \vec{k}_i et posons :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(\vec{r}) \quad \text{avec} \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu}$$

et
$$\hat{V}(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \hat{U}(\vec{r}) \quad E = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2\mu}$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2\mu} \Psi(\vec{r})$$

soit aussi :
$$\boxed{[\Delta + k_i^2 - U(\vec{r})] \Psi(\vec{r}) = 0}$$

Soit $\varphi_{\mathbf{k}}(\vec{r})$ une solution de l'équation "libre" :

$$[\Delta + k^2] \varphi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = 0$$

$\varphi_{\mathbf{k}}(\vec{r})$ est donc l'onde plane, que nous "normaliserons" suivant la condition habituelle :

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\vec{\mathbf{r}}) = \langle \vec{\mathbf{r}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{r}}}$$

satisfaisant : $\langle \varphi_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}'} \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$

Les $\varphi_{\mathbf{k}}(\vec{\mathbf{r}})$ constituent une base complète pour les états d'énergie positive, et on peut donc toujours écrire $\Psi(\vec{\mathbf{r}})$ sous la forme :

$$\Psi(\vec{\mathbf{r}}) = \int C_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\vec{\mathbf{r}}) d^3k$$

Le calcul donne finalement :

$$\Psi_{\mathbf{k}_i}(\vec{\mathbf{r}}) = \varphi_{\mathbf{k}_i}(\vec{\mathbf{r}}) + \int d^3r' G_0(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}') V(\vec{\mathbf{r}}') \Psi_{\mathbf{k}_i}(\vec{\mathbf{r}}')$$

Où $G_0(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}') = \frac{\mu}{4\pi^3 \hbar^2} \int d^3k \frac{e^{i\vec{\mathbf{k}}(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}')}}{k_i^2 - k^2}$ est une intégrale appelée *fonction de Green*.

On montre que le calcul de la fonction de Green conduit à deux formes possibles :

$$G_0^\pm(\vec{\mathbf{R}}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm ik_i R}}{R}$$

Remarque : Un calcul simple montre que :

$$(\Delta + k_i^2) G_0^\pm(\vec{\mathbf{R}}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} \delta(\vec{\mathbf{R}})$$

Une procédure alternative à celle que nous avons choisie consiste à partir de cette "définition" de $G_0^\pm(\vec{\mathbf{R}})$ pour effectuer le calcul : on montre alors que l'onde stationnaire de diffusion est donnée par l'équation intégrale de diffusion qui s'écrit finalement :

$$\Psi_{\mathbf{k}_i}^\pm(\vec{\mathbf{r}}) = \varphi_{\mathbf{k}_i}(\vec{\mathbf{r}}) + \int d^3r' G_0^\pm(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}') V(\vec{\mathbf{r}}') \Psi_{\mathbf{k}_i}^\pm(\vec{\mathbf{r}}')$$

b) Formes asymptotiques de G_0^\pm ; section efficace :

La section efficace est reliée au courant de probabilité à une distance r du centre diffuseur, grande devant les dimensions linéaires de la zone d'action du potentiel (ce point sera précisé dans un instant). Il est donc intéressant d'examiner le comportement de $\Psi_{\mathbf{k}_i}^\pm(\vec{\mathbf{r}})$, c'est-à-dire de $G_0^\pm(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}')$, pour des valeurs asymptotiquement grandes de r . Nous allons en particulier examiner le comportement asymptotique de $G_0^\pm(\vec{\mathbf{r}})$ pour des grandes valeurs du rapport r/r' .

On a, au premier ordre en r'/r :

$$G_0^\pm(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm ik_i |\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}'|}}{|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}'|} \approx -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm ik_i r}}{|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}'|} e^{\mp i\vec{\mathbf{k}}_i \vec{\mathbf{r}}'} \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm ik_i r}}{r} e^{\mp i\vec{\mathbf{k}}_i \vec{\mathbf{r}}'}$$

d'où :

$$\Psi_{\mathbf{k}_i}^{\pm}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \varphi_{\mathbf{k}_i}(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm i\mathbf{k}_i r}}{r} \int d^3r' e^{\mp i\vec{k}_f \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi_{\mathbf{k}_i}^{\pm}(\vec{r}')$$

On voit qu'en toute rigueur, il est nécessaire que le potentiel diffuseur décroisse plus vite que $1/r$: si par exemple les valeurs significatives de r' (c'est-à-dire telles que $V(\vec{r}')$ ne soit pas négligeable) sont restreintes à un domaine tel que $r' \leq a$, pour les grandes valeurs de r ($r \gg a$), les valeurs de r' contribuant à l'intégrale sont toutes telles que $r'/r \ll 1$, et l'approximation au premier ordre en r'/r excellente.

Examinons finalement le comportement asymptotique obtenu : l'intégrale sur r' du deuxième membre n'est plus fonction de r mais seulement des angles polaires θ et φ repérant la direction de \vec{k}_f (voir §a). Nous poserons :

$$f^{\pm}(\mathbf{k}, \theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^{3/2} \int d^3r' e^{\mp i\vec{k}_f \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi_{\mathbf{k}_i}^{\pm}(\vec{r}')$$

ce qui donne (avec $k_i = k_f$) :

$$\Psi_{\mathbf{k}_i}^{\pm}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\cong} (2\pi)^{-3/2} \left(e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + f^{\pm}(\mathbf{k}, \theta, \varphi) \frac{e^{\pm i\mathbf{k}_f r}}{r} \right)$$

Un comportement en $\frac{e^{ikr}}{r}$ représente une onde sphérique se dirigeant du centre diffuseur vers le détecteur, ce qui est un résultat déjà vu et physiquement satisfaisant : on l'appelle *onde sortante*. Au contraire, un comportement en $\frac{e^{-ikr}}{r}$ représente une *onde entrante* se dirigeant du détecteur vers le centre de force, et c'est donc une solution à rejeter dans le cas présent (noter l'analogie avec le calcul de la transmission d'une barrière de potentiel dans les cas à une dimension). En définitive, l'onde stationnaire de diffusion ayant un comportement d'onde sortante s'écrit :

$$\Psi_{\mathbf{k}_i}^+(\vec{r}) = \varphi_{\mathbf{k}_i}(\vec{r}) + \int d^3r' G_0^+(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \Psi_{\mathbf{k}_i}^+(\vec{r}')$$

Cette équation intégrale de la diffusion est exacte sous cette forme : elle est équivalente à l'équation de Schrödinger de départ, complétée de conditions asymptotiques d'onde sortante correspondant à :

$$\Psi_{\mathbf{k}_i}^+(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \varphi_{\mathbf{k}_i}(\vec{r}) + (2\pi)^{-3/2} \frac{e^{i\mathbf{k}_f r}}{r} f(\mathbf{k}, \theta, \varphi)$$

avec

$$f(\mathbf{k}, \theta, \varphi) = -\frac{\mu(2\pi)^{3/2}}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi_{\mathbf{k}_i}^+(\vec{r}')$$

L'état stationnaire de diffusion correspond bien à la superposition de l'onde plane incidente $\varphi_{\mathbf{k}_i}(\vec{r})$ et de l'onde sortante, ce qui est physiquement satisfaisant. Nous donnons maintenant le résultat du calcul du courant de probabilité associé à chacun de ces termes. On a

$$\vec{J}_i = \frac{\hbar\vec{k}_i}{\mu} (2\pi)^{-3}$$

$$(\vec{J}_f)_r = \frac{\hbar k_f}{\mu} (2\pi)^{-3} \frac{1}{r^2} |f(\mathbf{k}, \theta, \varphi)|^2$$

(le courant diffusé est pratiquement radial). D'où :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r^2 \frac{|\vec{J}_f|}{|\vec{J}_i|} = |f(k, \theta, \varphi)|^2$$

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

La formule qui donne la quantité $f(k, \theta, \varphi)$, (*amplitude de diffusion*) :

$$f(k, \theta, \varphi) = -\frac{\mu(2\pi)^{3/2}}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi_{k_i}^+(\vec{r}') = -\frac{\mu(2\pi)^3}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \varphi_{k_f}^*(\vec{r}') V(\vec{r}') \Psi_{k_i}^+(\vec{r}')$$

peut aussi s'écrire :

$$f(k, \theta, \varphi) = -\frac{\mu 4\pi^2}{\hbar^2} \langle \varphi_{k_f} | \hat{V} | \Psi_{k_i}^+ \rangle$$

soit :

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{16\pi^4 \mu^2}{\hbar^4} \left| \langle \varphi_f | \hat{V} | \Psi_i^+ \rangle \right|^2}$$

avec des notations abrégées pour φ_{k_f} et $\Psi_{k_i}^+$.

Cette formule est rigoureusement exacte pour tout potentiel satisfaisant : $\lim_{r \rightarrow \infty} r|V(r)| = 0$

(ce qui exclut donc le potentiel coulombien en particulier).

9°) Approximation de Born :

Le calcul de la section efficace se résume maintenant au calcul de Ψ_i^+ . Celle-ci est donnée par la formule :

$$\Psi_i^+(\vec{r}) = \varphi_i(\vec{r}) + \int d^3r' G_0^+(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \Psi_i^+(\vec{r}')$$

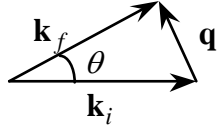
et peut ainsi être considérée comme une formule d'itération. En fait, *si le potentiel $V(r)$ est faible*, l'intégrale du 2^{ème} membre est une faible correction sur $\varphi_i(\vec{r})$. *L'approximation de Born au 1^{er} ordre* consiste à poser :

$$\Psi_i^+(\vec{r}) \approx \varphi_i(\vec{r})$$

soit :

$$f(k, \theta, \varphi) = -\frac{4\pi^2 \mu}{\hbar^2} \langle \varphi_f | \hat{V} | \varphi_i \rangle = -\frac{4\pi^2 \mu}{\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\vec{r}') \frac{e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i(\vec{k}_f - \vec{k}_i) \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}')$$

La quantité $\hbar \vec{q} = \hbar(\vec{k}_f - \vec{k}_i)$ est appelée *moment* (ou *impulsion transférée*) à la particule. Le vecteur d'onde transféré $\vec{q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$ est lié à l'angle de diffusion θ :



On a (avec $k = |\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_f|$) :

$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$$

d'où :

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)^{\text{BI}} = \frac{\mu^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int d^3 r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \right|^2$$

Cette section efficace est proportionnelle au carré du module de la composante de Fourier de $V(\mathbf{r})$ correspondant au vecteur d'onde transféré dans la collision.

Si le potentiel est central, cette formule se simplifie encore ; on a :

$$\begin{aligned} \int d^3 r' e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') &= - \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^\infty V(\mathbf{r}') r'^2 dr' \int_0^\pi e^{-iqr' \cos \theta'} d(\cos \theta') \\ &= -2\pi \int_0^\infty \frac{e^{iqr'} - e^{-iqr'}}{-iqr'} V(\mathbf{r}') r'^2 dr' = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty \sin qr' V(\mathbf{r}') r' dr' \end{aligned}$$

(θ' et φ' n'ont rien à voir ici avec les angles de la direction de diffusion !...)

soit :

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)^{\text{BI}} = \frac{4\mu^2}{q^2 \hbar^4} \left| \int_0^\infty \sin qr V(\mathbf{r}) r dr \right|^2 = \frac{\mu^2}{4\pi^2 \hbar^4} |F(\mathbf{q})|^2$$

Si on note
$$F(\mathbf{q}) = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty \sin qr V(\mathbf{r}) r dr = \int d^3 r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r})$$

la section efficace totale est donnée par :

$$\sigma_{\text{tot}}^{\text{BI}} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ n'étant fonction que de q , ou de θ par l'intermédiaire de q , on peut remplacer l'intégrale sur θ par une intégrale sur q :

$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2} \quad \Rightarrow \quad dq = k \cos \frac{\theta}{2} d\theta \quad \Rightarrow \quad qdq = 2k^2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta = k^2 \sin \theta d\theta$$

$$0 \leq \theta \leq \pi \quad \Rightarrow \quad 0 \leq q \leq 2k$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\sigma_{\text{tot}}^{\text{BI}} = \frac{\mu^2}{2\pi\hbar^4 k^2} \int_0^{2k} |F(q)|^2 q dq} \quad = \quad \frac{1}{2\pi\hbar^2 v^2} \int_0^{2k} |F(q)|^2 q dq$$

($p = mv = \hbar k$).

Autre convention : si $F'(q) = \int_0^\infty \sin qr V(r) r dr = \frac{q}{4\pi} F(q)$

alors
$$\sigma_{\text{tot}}^{\text{BI}} = \frac{8\pi\mu^2}{k^2\hbar^4} \int_0^{2k} |F'(q)|^2 \frac{dq}{q}$$

Remarque :

On remarquera que l'approximation au 1^{er} ordre fait intervenir une intégration sur $V(r)$. L'approximation du 2^{ème} ordre consiste à écrire :

$$\Psi_i^+(\vec{r}) \approx \Psi_1^+(\vec{r}) = \varphi_i(\vec{r}) + \int d^3r G_0^+(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \varphi_i(\vec{r}')$$

qui fera intervenir $V(r)$ une fois de plus. On peut ainsi poursuivre le développement à des ordres de plus en plus élevés. La convergence éventuelle de cette série vers la solution exacte est un problème délicat que nous n'aborderons pas ici.