

Exercices Série 1

1. Atome de Bohr : Considérer l'atome d'hydrogène constitué d'un noyau γ infiniment lourd et d'un électron de masse m et charge $-e$. Appliquer la règle de quantification de Bohr aux orbites circulaires et en déduire les valeurs des niveaux d'énergie.

2. Particule libre sur un cercle : Considérer une particule libre sur un cercle de circonférence L . Appliquer la règle de quantification de Bohr et en déduire les valeurs des niveaux d'énergie.

3. Oscillateur Harmonique : Considérer un oscillateur harmonique à une dimension, de masse m et fréquence ω . Appliquer la règle de quantification de Bohr et en déduire les valeurs des niveaux d'énergie. Trouve-t-on le bon résultat ? (la réponse est NON) Quel est le bon résultat ? Énoncer une modification de la règle de Bohr, pour obtenir le bon résultat.

4. Principe de Maupertuis : L'action réduite de

$$\text{Maupertuis est } S_0 = \int_{q'}^{q''} \sum p_i dq_i$$

temps d'arrivée non fixé

Calculer la première variation de l'Action réduite pour des trajectoires d'énergie E fixée :

$$\left(\sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m} \right) + V(q_1, \dots, q_n) = E$$

En déduire que si $\delta S_0 = 0$ alors on obtient l'équation de Newton.

(Faire d'abord le cas d'un degré de liberté ~~$n=1$~~)

5. Lien entre Action Réduite et Action de Hamilton

Considérer un système conservatif, c'est à dire que l'hamiltonien est indépendant du temps. Soit

$$S = \int_{t'}^{t''} dt \mathcal{L}(q, \dot{q}) \quad (\text{action de Hamilton})$$

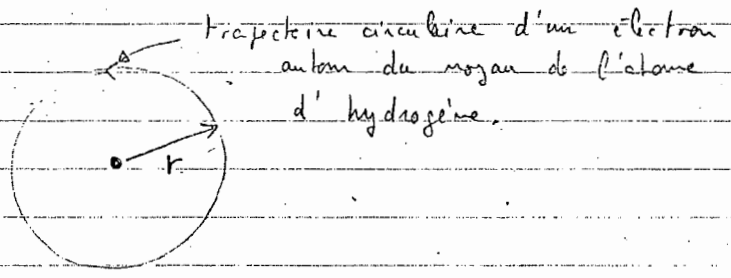
$$S_0 = \int_{q'}^{q''} p dq \quad (\text{action réduite})$$

Montrer que pour des trajectoires d'énergie E :

$$S = S_0 - E(t'' - t')$$

Corrigé de la série 1

exercice 1.



position $q = r\vartheta$ (degré de liberté = ϑ)

vitesse $\dot{q} = r\dot{\vartheta}$

équ. du mouvement $m r \dot{\vartheta}^2 = + \frac{e^2}{r^2}$

$\Rightarrow \dot{\vartheta} = \frac{e}{m^{1/2} r^{3/2}}$

régle de quantification de Bohr :

$\oint p dq = m h$

Appliquons cette régle :

$\oint_0^{2\pi} p dq = \int_0^{2\pi} (m r \dot{\vartheta})(r d\vartheta) = m h$

$\Rightarrow \frac{m r^2 e}{m^{1/2} r^{3/2}} \int_0^{2\pi} d\vartheta = m h$

$\Rightarrow \frac{e m^{1/2} r^{1/2} 2\pi}{e^2 m 4\pi^2} = m h \Rightarrow r = \frac{h^2}{e^2 m 4\pi^2} \cdot m^2$

Pour trouver les niveaux d'énergie on exprime le rayon de l'orbite en fonction de l'énergie :

$\frac{1}{2} m (r\dot{\vartheta})^2 - \frac{e^2}{r} = E$

$\Rightarrow \frac{1}{2} m r^2 \frac{e^2}{m r^3} - \frac{e^2}{r} = E$

$\Rightarrow - \frac{1}{2} m \frac{e^2}{r} = E$

En remplaçant par l'expression du rayon :

$E = - \frac{m e^2}{2} \cdot \frac{e^2 m 4\pi^2}{h^2} \frac{1}{m^2}$

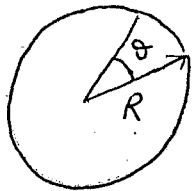
On trouve bien le spectre de l'atome d'hydrogène :

$E_n = - \frac{R}{n^2}$

avec la valeur de la constante de Rydberg $R = \frac{2\pi^2 m^2 e^4}{h^2}$

exercice 2.

La particule est sur un cercle de rayon $R = \frac{L}{2\pi}$.



$$\begin{aligned} \text{vitess} &= R \dot{\theta} \\ &= \text{constante.} \end{aligned}$$

Pour une particule libre :

$$E = \frac{1}{2} m R^2 \dot{\theta}^2$$

D'après la règle de quantification de Bohr :

$$m h = \oint p dq = \int_0^{2\pi} m R \dot{\theta} R d\theta = m R \dot{\theta} \cdot 2\pi R$$

$$\Rightarrow R \dot{\theta} = m \frac{h}{2\pi m R}$$

$$\Rightarrow E = \frac{1}{2} m m^2 \frac{h^2}{4\pi^2 m^2 R^2} = m^2 \frac{h^2}{8\pi^2 m L^2}$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{h^2 m^2}{2m L^2}$$

la "méthode moderne" consiste à résoudre

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x)$$

avec les conditions aux bords

$$\psi(0) = \psi(L)$$

en posant $\psi(x) = e^{ikx}$ on trouve

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

$$\text{et } 1 = e^{iKL} \Rightarrow K = \frac{2\pi n}{L}$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi^2 m^2}{L^2}$$

mais $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, donc

$$E_n = \frac{h^2 m^2}{2m L^2}$$

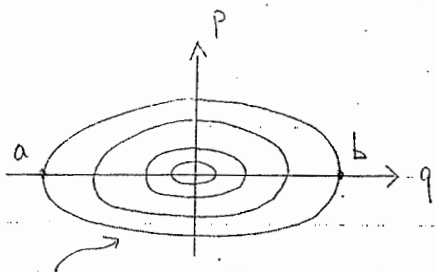
qui est le même résultat !

exercice 3.

L'hamiltonien de l'osc harmonique de masse m et fréquence ω est

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2$$

Donc les orbites dans l'espace de phase sont données par



des ellipses d'équation

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

où E est l'énergie. (Demi-axe $schp = \sqrt{2mE}$, Demi-axe $schq = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$.)

Dans la règle de quantification de Bohr l'intégrale

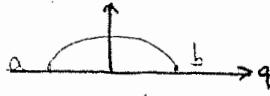
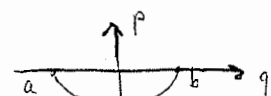
$$\oint p dq$$

est prise le long de l'ellipse associée à une énergie E .

Remarque: $\oint p dq = \int dp dq \equiv$ Aire à l'intérieur de l'ellipse.
 $\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2 \leq E$

Calcul:

$$\oint p dq = \int_a^b \sqrt{2m(E - \frac{m\omega^2}{2} q^2)}^{1/2} dq + \int_b^a -\sqrt{2m(E - \frac{m\omega^2}{2} q^2)} dq$$

\uparrow contribution de 
 \uparrow contribution de 

Donc

$$\oint p dq = 2 \sqrt{2m} \int_a^b dq (E - \frac{m\omega^2}{2} q^2)^{1/2}$$

Les niveaux d'énergie sont déterminés par

$$2\sqrt{2m} \int_a^b dq (E - \frac{m\omega^2}{2} q^2)^{1/2} = m h$$

Les points a et b se déterminent en posant $p=0$:

$$\frac{1}{2} m \omega^2 q^2 = E$$

$$\Rightarrow a = -\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}, \quad b = +\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

$$\Rightarrow \int_a^b dq \left(E - \frac{m\omega^2}{2} q^2 \right)^{1/2} = E^{1/2} \int_{-\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}}^{+\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}} \left(1 - \frac{m\omega^2}{2E} q^2 \right)^{1/2} dq$$

$$\text{en posant } \sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}} q = u : \quad = \sqrt{\frac{2}{m\omega^2}} \cdot E \cdot \int_{-1}^{+1} dx (1-u^2)^{1/2}$$

$$\text{en posant } u = \cos \theta : \quad = \sqrt{\frac{2}{m\omega^2}} \cdot E \cdot \int_0^\pi d\theta (\sin \theta)^2$$

$$= \frac{\pi E}{\omega \sqrt{2m}}$$

$$\text{Ainsi } 2\sqrt{2m} \cdot \frac{\pi E}{\sqrt{2m} \omega} = mh$$

$$\Rightarrow E_m = m \frac{h}{2\pi} \omega = m \hbar \omega$$

En fait si l'on procède par l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

on trouve les valeurs propres

$$E_m = \left(m + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

qui sont correctes.

Ainsi le résultat de la règle de Bohr-Sommerfeld manque le terme $\frac{1}{2} \hbar \omega$ qui provient de fluctuations quantiques de l'état fondamental. Cette règle de Bohr-Sommerfeld donne le bon résultat pour l'atome d'hydrogène, la particule libre, mais pas pour l'osc harmonique !

En fait Einstein-Brillouin-Keller ont corrigé la règle de Bohr-Sommerfeld plus tard. La règle EBK prend la forme

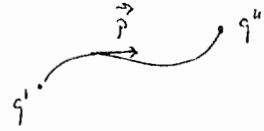
$$\oint \sum_{i=1}^m p_i dq_i = h \left(m + \frac{\gamma}{4} \right)$$

où m est entier et γ peut prendre les valeurs 0, 1, 2, 3 selon les systèmes. On verra cela plus tard dans le cours. Pour l'osc harmonique il faut en fait prendre $\gamma = 2$!

Exercice 4

Preuve du Principe de Maupertuis.

$$S_0 = \int_{q'}^{q''} \sum_{i=1}^n p_i dq_i$$



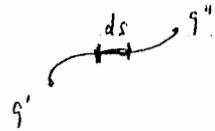
on des chemins d'énergie fixée :

$$\sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m} + V(q_1, \dots, q_n) = E$$

on

$$S_0 = \sqrt{2m} \int_{q'}^{q''} ds \sqrt{E - V(q)}$$

où $ds =$ élément de longueur de l'arc



la première variation est donnée par :

$$\delta S_0 = \sqrt{2m} \int_{q'}^{q''} \delta(ds) \sqrt{E - V(q)} \rightarrow \sqrt{2m} \int_{q'}^{q''} ds \frac{\nabla V(q) \cdot \delta q}{2\sqrt{E - V(q)}}$$

on calcule la variation de la longueur d'arc on utilise :

$$ds^2 = dq^2 \Rightarrow 2 ds \delta(ds) = 2 dq \delta(dq)$$

$$\Rightarrow \delta(ds) = \frac{dq}{ds} d(\delta q)$$

$$\Rightarrow \delta(ds) = \frac{dq}{ds} \frac{d(\delta q)}{ds} ds$$

$$\Rightarrow \delta S_0 = \sqrt{2m} \int_{q'}^{q''} ds \frac{d(\delta q)}{ds} \frac{dq}{ds} \sqrt{E - V(q)} - \sqrt{2m} \int_{q'}^{q''} ds \frac{\nabla V(q) \cdot \delta q}{2\sqrt{E - V(q)}}$$

en intégrant par partie la première intégrale :

$$\delta S_0 = -\sqrt{2m} \int_{q'}^{q''} ds \delta q \cdot \left\{ \frac{d}{ds} \left(\sqrt{E - V(q)} \frac{dq}{ds} \right) + \frac{\nabla V}{2\sqrt{E - V(q)}} \right\}$$

Ainsi si $\delta S_0 = 0$ pour tout δq on obtient l'équation de la trajectoire réelle :

$$\underline{\underline{2\sqrt{E - V(q)} \frac{d}{ds} \left(\sqrt{E - V(q)} \frac{dq}{ds} \right) = -\nabla V}}$$

Remarque 1. Cette équation est l'équation pour la trajectoire. Ce n'est pas la loi de l'évolution temporelle de Newton. Mais on peut vérifier que la loi de Newton donne la même équation pour la trajectoire quand elle est paramétrisée par l'élément de longueur.

En effet :

$$m \frac{d^2 q}{dt^2} = -\nabla V$$

$$m \frac{d}{dt} \frac{dq}{dt} = -\nabla V$$

$$\Rightarrow m \left(\frac{ds}{dt} \right) \cdot \frac{d}{ds} \left(\frac{dq}{dt} \right) = - \nabla V$$

$$m \left(\frac{ds}{dt} \right) \frac{d}{ds} \left(\left(\frac{ds}{dt} \right) \frac{dq}{ds} \right) = - \nabla V$$

mais $\frac{ds}{dt} = \frac{|P|}{m} = (\text{module de la vitesse})$

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

on obtient $2 \sqrt{E-V} \frac{d}{ds} \left(\sqrt{E-V} \frac{dq}{ds} \right) = - \nabla V$.

remarque 2: Quand on démontre le principe de Fermat, il faut éviter de paramétriser la trajectoire par le temps car comme on fixe l'énergie le temps d'arrivée en q'' n'est plus fixe. Donc quand on fait la variation il faudrait aussi varier sur ce temps d'arrivée.

Exercice 5

L'action de Hamilton est

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

On a : $\mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t)) = p(t) \dot{q}(t) - H(q(t), p(t))$

Si le système est conservatif, l'hamiltonien est indépendant du temps et donc l'énergie est conservée : $H(q(t), p(t)) = E$

$$\Rightarrow S = \int_{t'}^{t''} dt p(t) \dot{q}(t) - E(t'' - t')$$

$$\underline{S = S_0 - E(t'' - t')}.$$

Série 2

6. Equation de l'Optique Géométrique.

Remplacer l'ansatz $\psi = A(x, y, z) \cdot e^{i\pi\{ \omega t - \varphi_0(x, y, z) \}}$

dans l'équation d'Onde, Discuter les approximations faites pour obtenir l'équation de l'optique géométrique :

$$\frac{m^2 v^2}{c^2} = \left(\frac{\partial \varphi_0}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi_0}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi_0}{\partial z} \right)^2 \\ = (\nabla \varphi_0)^2$$

où $m = m(x, y, z)$ est l'indice de réfraction du milieu.

7. Limite Classique de l'Equation de Schrödinger.

Considérons l'Equation de Schrödinger dépendante du temps. Poser

$$\psi = A e^{\frac{i}{\hbar} S} \quad \text{où } A \text{ et } S \text{ sont des fonctions réelles de } (\underline{x}, t) \\ \text{et } A > 0.$$

En dérivant les équations ; $\nabla \cdot \left(A \frac{1}{m} \nabla S \right) = \frac{1}{m} \nabla \cdot (A \nabla S)$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial A^2}{\partial t} + \nabla \cdot (A^2 \underline{v}) = 0 \quad \text{où } \underline{v} = \frac{1}{m} \nabla S \\ \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A} = - \frac{\partial S}{\partial t} \end{array} \right.$$

- Quelle est la signification physique de la première équation ?

- Discuter l'approximation qu'il faut faire dans la deuxième équation pour obtenir l'équation d'Hamilton-Jacobi.

- Dans le cas où V est indépendant du temps poser

$$S' = -Et + S_0(x, y, z)$$

et écrire l'équation pour S_0 . Discuter l'approximation effectuée pour obtenir l'équation d'Hamilton-Jacobi raccourcie. Discuter la limite de validité de cette approximation en terme de la longueur d'onde de De-Broglie de la particule.

Exercice 6,

$$\left(\frac{m}{c}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = \Delta \psi, \quad \psi = A e^{2\pi i (\nu t - \varphi_0(z))}, \quad A > 0$$

$$\Rightarrow \nabla \psi = \frac{\nabla A}{A} \psi - 2\pi i \nabla \varphi_0 \psi$$

$$\Delta \psi = \nabla \left(\frac{\nabla A}{A} \right) \psi + \frac{\nabla A}{A} \cdot \nabla \psi - 2\pi i \nabla^2 \varphi_0 \psi - 2\pi i \nabla \varphi_0 \cdot \nabla \psi$$

$$\Delta \psi = \frac{\nabla A}{A} \left(\frac{\nabla A}{A} - 2\pi i \nabla \varphi_0 \right) \psi + \nabla \left(\frac{\nabla A}{A} \right) \psi$$

$$- 2\pi i \nabla^2 \varphi_0 \psi - 2\pi i \nabla \varphi_0 \left(\frac{\nabla A}{A} - 2\pi i \nabla \varphi_0 \right) \psi$$

$$\Delta \psi = -4\pi^2 (\nabla \varphi_0)^2 \psi + \frac{\nabla^2 A}{A} \psi - 2\pi i \left(\nabla^2 \varphi_0 - 2 \frac{\nabla \varphi_0 \cdot \nabla A}{A} \right) \psi$$

\Rightarrow L'équation d'onde devient:

$$-4\pi^2 \frac{m^2}{c^2} \nu^2 \psi = -4\pi^2 (\nabla \varphi_0)^2 \psi + \frac{\nabla^2 A}{A} \psi - 2\pi i \left(\nabla^2 \varphi_0 - 2 \frac{\nabla \varphi_0 \cdot \nabla A}{A} \right) \psi$$

en simplifiant par ψ et en isolant partie réelle et imaginaire:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{m^2}{c^2} \nu^2 = (\nabla \varphi_0)^2 - \frac{1}{4\pi^2} \frac{\nabla^2 A}{A} \\ \nabla^2 \varphi_0 - 2 \frac{\nabla \varphi_0 \cdot \nabla A}{A} = 0 \end{array} \right.$$

Ces équations sont exactes (pas d'approximations).

Approximation de l'Optique géométrique:

Si $n(x, y, z)$ varie lentement p. rapport à la longueur d'onde λ on peut supposer que ψ est approximativement une onde plane (localement dans l'espace). Ainsi:

$$\psi \approx \left(1 + a(x)\right) e^{2\pi i \left(\nu t - \frac{1}{\lambda} \hat{k} \cdot \hat{x} - \varphi_1(x)\right)}$$

où $a(x)$ et $\varphi_1(x)$ sont petits et leurs dérivées sont petites.

$$\Rightarrow \frac{\nabla^2 A}{A} \approx \nabla^2 a(x) \quad \text{et} \quad (\nabla \varphi_0)^2 \approx \frac{1}{\lambda^2}$$

Négliger $\frac{\nabla^2 A}{A}$ signifie $\nabla^2 a(x) \ll \frac{4\pi^2}{\lambda^2}$

Donc dans la limite des courtes longueurs d'onde p. rapport aux variations de l'amplitude de l'onde on obtient l'équation de l'optique géométrique

$$\frac{m^2}{c^2} \nu^2 = (\nabla \varphi_0)^2$$

(On peut vérifier que dans la seconde équation, le membre de gauche est petit)

Remarque

On peut aussi poser

$$\psi = A(r) e^{i(\omega t + k_0 S(r))} \quad (*)$$

où $k_0 = \frac{k}{m}$ est le vect. d'onde dans le vide.

En substituant (*) dans l'éqn. d'onde et séparant la partie réelle et imaginaire, on obtient :

$$\begin{cases} -k_0^2 \left[(\nabla S)^2 - \left(\frac{k}{k_0}\right)^2 \right] + \frac{\nabla^2 A}{A} = 0 \\ k_0 \left[\frac{1}{2} \nabla^2 S + \frac{\nabla A \cdot \nabla S}{A} \right] = 0 \end{cases}$$

Donc, dans la limite de très courte longueur d'onde : $k_0 \rightarrow \infty$
 $\lambda_0 = \frac{2\pi}{k_0} \rightarrow 0$

ou a

$$\boxed{(\nabla S)^2 - n^2(r) = 0}$$

Considérons les surfaces de S constant : $S(r) = b$.
Le gradient ∇S , perp. au front d'onde $S=b$,
représente la direction du rayon lumineux. Donc,
dans la limite de courte longueur d'onde les ondes
 $\phi(r) = A(r) e^{i k_0 S(r)}$ sont décrites comme les rayons
 $\nabla S = n(r)$.

* $S(r)$ est appelé aussi EIKONALE.

exercice 7.

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

$$\psi = A(x, t) e^{\frac{i}{\hbar} S(x, t)} \quad \text{implique après calculs ; en}$$

égalant les parties réelles et imaginaires :

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial A^2}{\partial t} + \nabla \cdot \left(A^2 \frac{\hbar}{m} \nabla S \right) &= 0 && \text{(partie imaginaire)} \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\partial S}{\partial t} &= \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A} && \text{(partie réelle)} \end{aligned} \right\}$$

- la première équation est en fait l'équation de continuité si on interprète A^2 comme la densité du "fluide" et $\frac{\hbar}{m} \nabla S$ sa vitesse.

- Pour obtenir l'équation d'Hamilton-Jacobi il faut supposer que $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A}$ est négligeable dans la deuxième équation.

- Quand V est indépendant temps en posant $S = Et - S_0(x)$ on obtient

$$0 = \frac{1}{2m} (\nabla S_0)^2 + (E - V(x)) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A}$$

On obtient l'équation d'Hamilton - Jacobi raccourcie en supposant que $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A}$ est négligeable.

Une condition de validité est

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A} \ll E - V(x) \quad \text{et} \quad E > V(x).$$

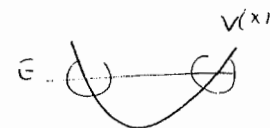
La longueur d'onde de De Broglie est localement

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V(x))}} \Rightarrow E - V(x) = \frac{h^2}{\lambda^2} \frac{1}{2m}$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A} \ll \frac{h^2}{\lambda^2} \frac{1}{2m}$$

$$\Rightarrow \frac{\nabla^2 A}{A} \ll \frac{4\pi}{\lambda(x)^2} \Rightarrow \underline{\underline{\lambda(x)^2 \ll 4\pi \frac{A}{\nabla^2 A}}}$$

Ainsi la longueur d'onde doit être petite p. rapport aux variations de l'amplitude de l'onde. C'est la même condition que l'on trouve pour l'optique géométrique.

Remarque : si $E \approx V(x)$  $\lambda \rightarrow \infty$ donc cette approximation n'est plus valable.

SERIE 3.

- Examiner la condition de validité de la méthode WKB pour le cas d'une particule dans une boîte de largeur $2L$:
 $V(x) = 0$, $|x| \leq L$ et $V(x) = +\infty$, $|x| > L$.
Vérifier que les formules WKB pour les fonctions d'onde sont exactes dans tout l'intervalle $-L \leq x \leq L$. Donner la règle de Bohr-Sommerfeld dans ce cas et retrouver les niveaux d'énergie.

- Equation d'Airy. Considérer l'équation différentielle du deuxième ordre
 $-W''(y) + yW(y) = 0$. On veut calculer le comportement asymptotique de la solution satisfaisant à $W(y) \rightarrow 0$ pour $y \rightarrow +\infty$. Pour cela on effectue une transformée de Fourier

$$\hat{W}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{iky} W(y)$$

a) écrire l'équation différentielle satisfaite par la transformée de Fourier.

b) montrer que $\hat{W}(k) = C \cdot \exp\left(-\frac{i}{3} k^3\right)$

- ⊗ c) calculer le comportement de $W(y)$ pour $y \rightarrow -\infty$ et $y \rightarrow +\infty$ par la méthode de la phase stationnaire, avec méthode de la phase stationnaire

$$\begin{aligned} a \in \mathbb{R}_+ : \int_0^{\infty} dx e^{iax^2} &= I(a) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \cdot e^{i\pi/4} \\ a \in \mathbb{R}_- : \int_0^{\infty} dx e^{iax^2} &= I(a) = \sqrt{\frac{\pi}{|a|}} \cdot e^{-i\pi/4} \end{aligned}$$

Equation d'Airy. Courbe de série 3

Soit $-w''(y) + y w(y) = 0$. Ceci implique

$$-\int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{iky} w''(y) + \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{iky} y w(y) = 0$$

$$\Rightarrow k^2 \hat{w}(k) + i \hat{w}'(k) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\hat{w}'}{\hat{w}} = -ik^2 \Rightarrow \hat{w}(k) = C \cdot e^{-\frac{i}{3}k^3}$$

On retrouve $w(y)$ en calculant la transformée de Fourier inverse. A une constante multiplicative près,

$$w(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-iky} e^{-\frac{i}{3}k^3} = \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-i(ky + \frac{k^3}{3})}$$

Pour $y \rightarrow \pm\infty$ la phase oscille rapidement, donc les contributions dominantes à l'ordre principal proviennent des voisinages des points où elle est stationnaire. Ci-dessous nous précisons le calcul pour $y \rightarrow -\infty$ puis pour $y \rightarrow +\infty$.

$y \rightarrow -\infty$ la phase $F(k) = ky + \frac{k^3}{3}$ est

stationnaire pour $F'(k) = 0$, c.à.d.

$$y + k^2 = 0 \Rightarrow k = \pm \sqrt{|y|} \quad (y < 0)$$

Au voisinage de $+\sqrt{|y|}$:

$$\begin{aligned} F(k) &\approx F(\sqrt{|y|}) + \frac{1}{2} F''(\sqrt{|y|}) (k - \sqrt{|y|})^2 \\ &= -\frac{2}{3}|y|^{3/2} + |y|^{1/2} (k - \sqrt{|y|})^2 \end{aligned}$$

Au voisinage de $-\sqrt{|y|}$:

$$\begin{aligned} F(k) &\approx F(-\sqrt{|y|}) + \frac{1}{2} F''(-\sqrt{|y|}) (k + \sqrt{|y|})^2 \\ &= +\frac{2}{3}|y|^{3/2} - |y|^{1/2} (k + \sqrt{|y|})^2 \end{aligned}$$

Donc en retenant la contribution au voisinage des deux points stationnaires:

$$\begin{aligned} w(y) &\approx e^{+\frac{i}{3}|y|^{3/2}} \int dk e^{-i|y|^{1/2}(k-\sqrt{|y|})^2} + e^{-\frac{i}{3}|y|^{3/2}} \int dk e^{-i|y|^{1/2}(k+\sqrt{|y|})^2} \\ &\approx e^{+\frac{i}{3}|y|^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-i|y|^{1/2}k^2} + e^{-\frac{i}{3}|y|^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-i|y|^{1/2}k^2} \end{aligned}$$

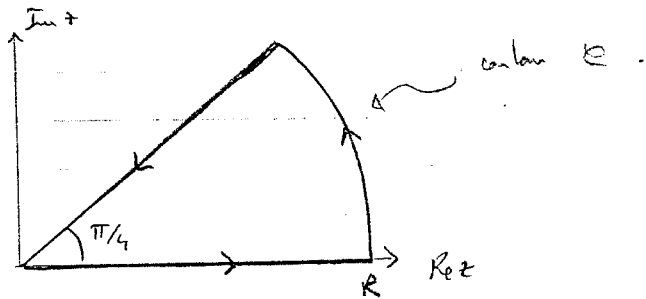
Il nous faut maintenant calculer les intégrales de Fresnel

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-i|y|^{1/2} k^2} \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{i|y|^{1/2} k^2}$$

Preons la deuxième :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{i|y|^{1/2} k^2} = 2 \int_0^{+\infty} dk e^{i|y|^{1/2} k^2} = 2 \lim_{R \rightarrow +\infty} \int_0^R dk e^{i|y|^{1/2} k^2}$$

Soit $z \in \mathbb{C}$ dans le plan complexe



$$0 = \int_C dz e^{i|y|^{1/2} z^2} = \int_0^R dk e^{i|y|^{1/2} k^2} + \int_0^{\pi/4} R d\theta e^{i|y|^{1/2} R^2 e^{i2\theta}} - e^{i\frac{\pi}{4}} \int_0^R ds e^{i|y|^{1/2} s^2} e^{i\pi/2}$$

c.e.d

$$\int_0^R dk e^{i|y|^{1/2} k^2} = - \int_0^{\pi/4} R d\theta e^{i|y|^{1/2} R^2 e^{i2\theta}} - |y|^{1/2} R^2 \sin 2\theta + e^{i\frac{\pi}{4}} \int_0^R ds e^{-|y|^{1/2} s^2}$$

si $R \rightarrow +\infty$, la première intégrale a droit tend vers zéro car $\sin 2\theta > 0$ pour $0 < \theta < \frac{\pi}{4}$. Donc

$$\int_0^{+\infty} dk e^{i|y|^{1/2} k^2} = e^{i\frac{\pi}{4}} \int_0^{+\infty} ds e^{-|y|^{1/2} s^2}$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{i|y|^{1/2} k^2} = e^{i\frac{\pi}{4}} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{-|y|^{1/2} s^2}}_{\sqrt{\frac{\pi}{|y|^{1/2}}}}$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{i|y|^{1/2} k^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{|y|^{1/4}} e^{i\frac{\pi}{4}}$$

5.

Il s'en suit que

$$w(y) \approx \sqrt{\pi} \frac{e^{i\left(\frac{2}{3}|y|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)}}{|y|^{1/4}} + \sqrt{\pi} \frac{e^{-i\left(\frac{2}{3}|y|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)}}{|y|^{1/4}}$$

$$w(y) \approx \frac{2\sqrt{\pi}}{|y|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}|y|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad \text{pour } y \rightarrow -\infty.$$

okz que ceci est aussi égal à

$$w(y) \approx \frac{2\sqrt{\pi}}{|y|^{1/4}} \sin\left(-\frac{2}{3}|y|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)$$

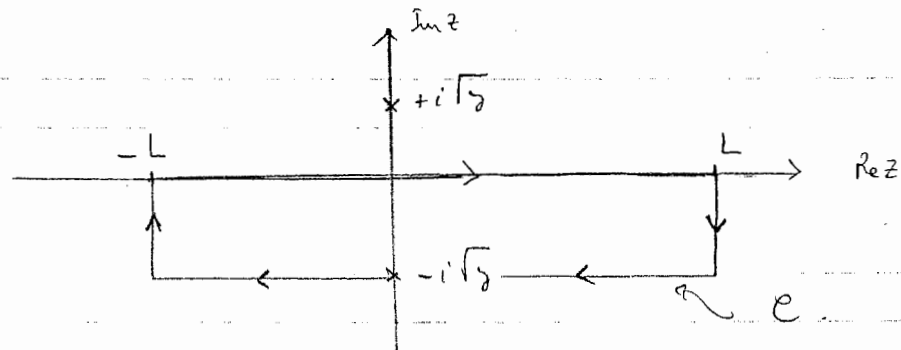
6.

$y \rightarrow +\infty$.

Malheureusement les points stationnaires sont sur l'axe imaginaire :

$$y + k^2 = 0 \Rightarrow k = \pm i\sqrt{y} \quad (y > 0).$$

Etant donné que l'intégrale est prise sur l'axe réel, il faut d'abord décider comment déformer le contour.



$$\text{On a que } \int_C dz e^{-i\left(zy + \frac{z^3}{3}\right)} = 0, \text{ donc}$$

Sur la partie verticale de droite on a $z = L + i\sqrt{y}$, donc

$$\begin{aligned} zy + \frac{z^3}{3} &= Ly + i\sqrt{y}y + \frac{1}{3}(L^3 + 3L^2i\sqrt{y} - iL\sqrt{y}^2 - i\sqrt{y}^3) \\ -i\left(zy + \frac{z^3}{3}\right) &= -iLy + \sqrt{y}y - \frac{i}{3}L^3 + L^2\sqrt{y} + \frac{i}{3}L\sqrt{y}^2 - \frac{\sqrt{y}^3}{3} \\ &= (L^2\sqrt{y} + \sqrt{y}y - \frac{\sqrt{y}^3}{3}) + i\left(\frac{1}{3}L\sqrt{y}^2 - \frac{1}{3}L^3 - Ly\right). \end{aligned}$$

Donc sur la partie verticale de droite on peut majorer la contribution à l'intégrale par

$$\int_0^{\sqrt{y}} d\tau e^{-L^2 \tau + \nu y - \frac{\tau^3}{3}} = \int_0^{\sqrt{y}} d\tau e^{-L^2 \tau - \nu y + \frac{\tau^3}{3}}$$

Par le théorème de la convergence dominée ceci tend vers zéro par $L \rightarrow +\infty$ à cause du terme $\exp(-L^2 \tau)$

Par la partie verticale à gauche on peut faire le même argument,

Ainsi on trouve

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-i(z y + \frac{z^3}{3})} = \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{-i((u - i\sqrt{y})y + \frac{(u - i\sqrt{y})^3}{3})}$$

Maintenant le point stationnaire est en $u=0$ et en passant

$$F(u) = (u - i\sqrt{y})y + \frac{1}{3}(u - i\sqrt{y})^3$$

près de $u=0$ on a :

$$F(u) \approx F(0) + \frac{1}{2} F''(0) u^2 = -\frac{2i}{3} y^{3/2} - i y^{1/2} u^2$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-i(z y + \frac{z^3}{3})} \approx e^{-\frac{2}{3} y^{3/2}} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} du e^{-y^{1/2} u^2}}_{\frac{\sqrt{\pi}}{y^{1/4}}}; y \rightarrow +\infty$$

Ainsi pour $y \rightarrow +\infty$

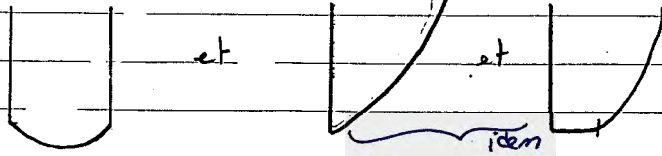
$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-i(z y + \frac{z^3}{3})} \approx \frac{\sqrt{\pi}}{y^{1/4}} e^{-\frac{2}{3} y^{3/2}}$$

Remarque : On peut se demander pourquoi on ne choisit pas l'autre pt stationnaire en $+i\sqrt{y}$ et un contour fermé qui passe par ce point dans le demi-plan complexe supérieur, la raison est que les intégrales sur les parties verticales ne tendent pas vers 0 quand $L \rightarrow +\infty$ si bien que un tel contour n'est pas utile.

SERIE 4.

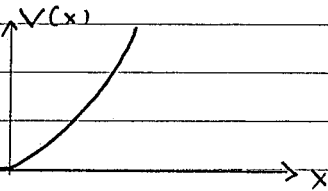
1. Examinez la condition de validité de la méthode WKB pour les cas

$V(x) =$



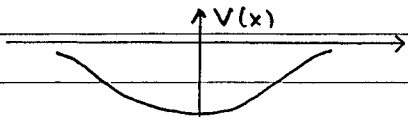
Appliquez la règle de connexion et donnez la règle de Bohr-Sommerfeld dans ces cas.

2. Appliquez la formule de connexion à la situation suivante :



Interprétez, en terme d'ondes incidentes et réfléchies, la fonction d'onde WKB.

3. Utilisez la règle de Bohr-Sommerfeld pour estimer le nombre d'états liés dans un puits de potentiel $V(x) < 0$, à 1 dimension



Discutez le résultat pour $V(x) \sim -\frac{1}{|x|^5}$, $|x| \rightarrow +\infty$.

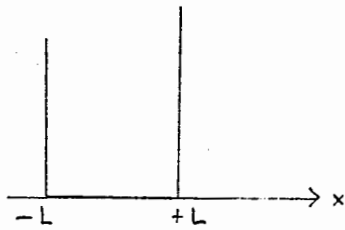
Corrige des series 3 et 4.

1.

2.

exercice 1

(i) particule dans une boîte :



• pour $x > L$ et $x < -L$ on a évidemment $\psi(x) = 0$.

• pour $-L < x < L$ la longueur d'onde de De Broglie est $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$

$$\Rightarrow \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| = 0 \ll 1$$

→ la condition de validite pour WKB est verifiee dans tout l'intervalle

• La formule WKB est ici pour $-L < x < L$:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{A}{(2m(E-V))^{1/4}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int_{-L}^x \sqrt{2m(E-V)}} + \frac{B}{(2m(E-V))^{1/4}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-L}^x \sqrt{2m(E-V)}} \\ &= \frac{A}{(2mE)^{1/4}} e^{+\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE}(x+L)} + \frac{B}{(2mE)^{1/4}} e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE}(x+L)} \end{aligned}$$

Cette formule est exacte dans ce cas puisqu'il s'agit de la combinaison des deux ondes planes

$$\bar{A} e^{iKx} + \bar{B} e^{-iKx} \quad \text{avec} \quad K = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

solu generale de $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) = E \psi(x)$.

• Dans le cas present on impose les conditions aux limites

$$\psi(-L) = 0 \quad \text{et} \quad \psi(L) = 0$$

qui permettent de trouver le spectre d'energie

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m\pi}{2L} \right)^2, \quad m \gg 1 \quad (*)$$

• Nous indiquons ici une autre maniere de proceder qui est dans l'esprit de WKB. Une autre expression pour la fonction d'onde est

$$\psi(x) = \frac{A'}{(2mE)^{1/4}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int_{-L}^x \sqrt{2mE}} + \frac{B'}{(2mE)^{1/4}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-L}^x \sqrt{2mE}}$$

La condition $\psi(-L) = 0 \Rightarrow A = -B$
 $\psi(L) = 0 \Rightarrow A' = -B'$

Donc $\psi(x) = \frac{A' 2i}{(2mE)^{1/4}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-L}^x \sqrt{2mE}\right)$

mais aussi $\psi(x) = \frac{A' 2i}{(2mE)^{1/4}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-L}^x \sqrt{2mE}\right)$

On doit avoir $A \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-L}^x \sqrt{2mE}\right) = A' \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-L}^x \sqrt{2mE}\right), \quad \forall x$

$\Rightarrow |A| = |A'|$ et $\frac{1}{\hbar} \int_{-L}^x \sqrt{2mE} - \frac{1}{\hbar} \int_{-L}^x \sqrt{2mE} = m\pi$

$$\Rightarrow 2 \int_{-L}^L dx \sqrt{2mE} = h m$$

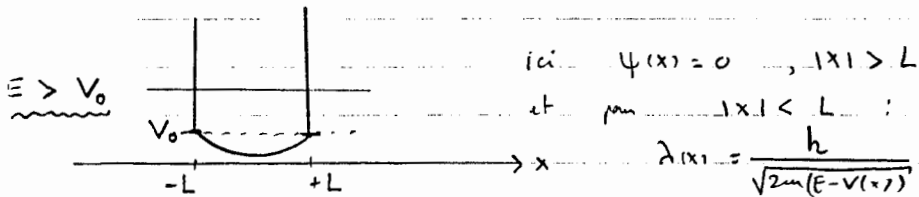
ici $m \geq 1$ car $m=0$ donnerai une fonction d'onde nulle ce qui n'a pas de sens.

Ainsi la condition de Bohr-Sommerfeld s'écrit ici :

$$2 \int_{-L}^L dx \sqrt{2mE} = h(m+1), \quad m \geq 0.$$

ou $m = \#$ de nœuds à l'intérieur de $-L < x < L$. On peut vérifier que le spectre est bien (*)

i) Cas où $V(x)$ est non trivial dans $-L < x < L$.



$$\frac{d\lambda}{dx} = h \frac{V'(x) 2m}{(2m(E-V(x)))^{3/2}} \quad \text{et on remarque que } V'(x) \text{ est borné et } E - V(x) \text{ ne s'annule pas pour } -L < x < L.$$

pour $\frac{h}{\sqrt{2m}}$ petit $\frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda}{dx} \ll 1 \rightarrow$ WKB valable dans tout l'intervalle si $E > V_0$.

La fct d'onde ψ s'écrit sous la forme $-L < x < L$:

$$\psi(x) = \frac{A}{(2m(E-V))^{1/4}} e^{i \frac{1}{\hbar} \int_{-L}^x \sqrt{2m(E-V)} dx} + \frac{B}{(2m(E-V))^{1/4}} e^{-i \frac{1}{\hbar} \int_{-L}^x \sqrt{2m(E-V)} dx}$$

ou bien

$$\psi(x) = \frac{A'}{(2m(E-V))^{1/4}} e^{i \frac{1}{\hbar} \int_L^x \sqrt{2m(E-V)} dx} + \frac{B'}{(2m(E-V))^{1/4}} e^{-i \frac{1}{\hbar} \int_L^x \sqrt{2m(E-V)} dx}$$

Les conditions aux limites donnent $A = -B$ et $A' = -B'$, d'où on déduit

$$A \sin \frac{1}{\hbar} \int_{-L}^x \sqrt{2m(E-V)} dx = A' \sin \frac{1}{\hbar} \int_L^x \sqrt{2m(E-V)} dx$$

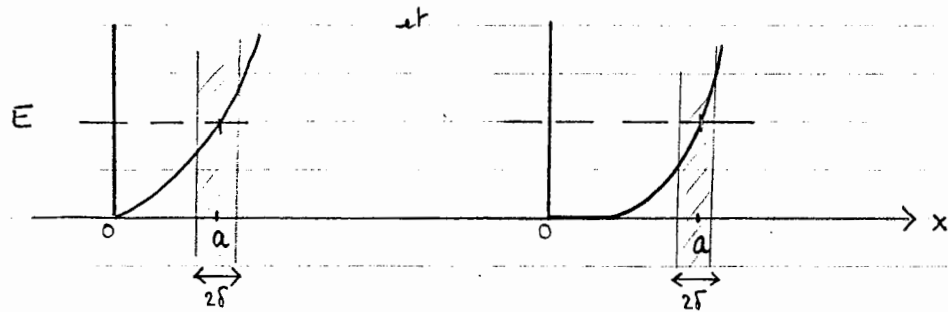
$\rightarrow |A| = |A'|$ et encore

$$2 \int_{-L}^L dx \sqrt{2m(E-V(x))} = h(m+1), \quad m \geq 0.$$

Ce résultat est valable pour $E > V_0$.

- (Pour $E < V_0$ le problème est plus compliqué.)

iii') Deux derniers cas :



Toujours en examinant $\frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda}{dx} \ll 1$ on a $\lambda(x) = \frac{h}{\sqrt{2m(E-V(x))}}$

on s'aperçoit que la région de validité est

$$\underline{0 < x < a - \delta \quad \text{et} \quad a + \delta < x < +\infty}$$

Évaluation de δ : $\frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda}{dx} = \frac{h}{\sqrt{2m}} \frac{V'(x)}{(E-V(x))^{3/2}}$ et pour

x proche de a : $\frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda}{dx} \approx \frac{h}{\sqrt{2m}} \frac{V'(a)}{|V'(a)|^{3/2} |x-a|^{3/2}}$

Donc si $\frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda}{dx} \ll 1$ alors $\frac{h}{\sqrt{2m}} \frac{1}{|V'(a)|^{1/2}} \ll |x-a|^{3/2}$

$$\Rightarrow |x-a| \gg \left(\frac{h^2}{2m} \frac{1}{|V'(a)|} \right)^{1/3}$$

$$\Rightarrow \delta \approx \left(\frac{h^2}{2m} \frac{1}{|V'(a)|} \right)^{1/3} \sim h^{2/3}$$

Fonctions d'ondes WKB :

$$x \gg a : \psi(x) = \frac{A/2}{\{2m(V-E)\}^{1/4}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x \sqrt{2m(V-E)} dx}$$

qui tend vers zéro si $x \rightarrow +\infty$

Par la formule de connexion pour

$$x \ll a : \psi(x) = \frac{A}{\{2m(E-V)\}^{1/4}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^x \sqrt{2m(E-V)} dx - \frac{\pi}{4} \right\}$$

Les niveaux d'énergies sont déterminés par la condition aux limites :

$$\psi(0) = 0$$

$$\Rightarrow \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m(E-V(y))} dy - \frac{\pi}{4} \right\} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m(E-V)} dy - \frac{\pi}{4} = m\pi + \frac{\pi}{4}$$

$$\Rightarrow 2 \int_0^a \sqrt{2m(E-V)} dy = 2 \frac{h}{2\pi} \left(m\pi + \frac{3\pi}{4} \right) = h \left(m + \frac{3}{4} \right)$$

Règle de Bohr-Sommerfeld corrigée ici est

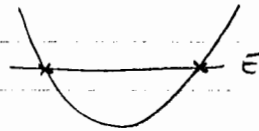
$$2 \int_0^a dy \sqrt{2m(E-V(y))} dy = h \left(m + \frac{3}{4} \right), m \geq 0.$$

Remarque :

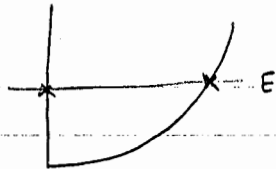
Nous avons donc identifié plusieurs formes de la règle de Bohr-Sommerfeld :

$$\oint p dq = h \left(m + \frac{\gamma}{4} \right), \quad m \gg 0$$

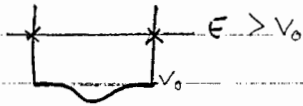
où $\gamma = 2$ pour



$\gamma = 3$ pour



$\gamma = 4$ pour



$\gamma = 0$ si $p = p_\theta$ et $q = R\theta$, θ une variable angulaire.

En fait la forme générale de la règle pour des systèmes à plusieurs degrés de liberté séparables, c.e.d.

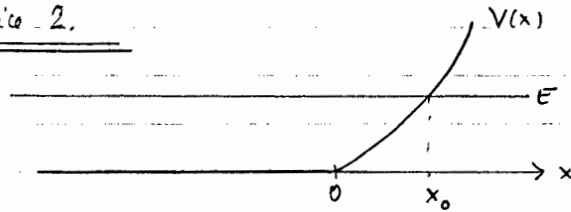
$$H = \sum_{i=1}^m \mathcal{H}(p_i, q_i)$$

et

$$\oint p_i dq_i = h \left(m_i + \frac{\gamma_i}{4} \right), \quad m_i \gg 0.$$

où $\gamma_i = 0, 1, 2, 3, 4$ est un nombre qui dépend de la situation considérée: présence de caustiques sur la trajectoire classique ou points tournants.

exercice 2.



$$x \gg x_0: \quad \psi(x) = \frac{A/2}{(2m(V-E))^{1/4}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m(V-E)} dx}$$

$$x \ll x_0: \quad \psi(x) = \frac{A}{(2m(E-V))^{1/4}} \cos \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m(E-V)} dx - \frac{\pi}{4} \right\}$$

par $x \rightarrow -\infty$ on a: $V(x) = 0$ donc

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{A}{(2mE)^{1/4}} \cos \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^0 \sqrt{2mE} dx + \frac{i}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m(E-V)} dx - \frac{\pi}{4} \right\} \\ &= \frac{A/2}{(2mE)^{1/4}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m(E-V)} dx} e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} x} e^{-i\frac{\pi}{4}} \\ &\quad + \frac{A/2}{(2mE)^{1/4}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m(E-V)} dx} e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} x} e^{i\frac{\pi}{4}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{A/2}{(2mE)^{1/4}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m(E-V)} dx - i\frac{\pi}{4}} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} x} \right. \\ &\quad \left. + e^{-\frac{2i}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m(E-V)} dx + i\frac{\pi}{2}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} x} \right\} \end{aligned}$$

On peut choisir la constante A de manière à ce que l'onde incidente qui vient de gauche soit

$$e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} x}$$

Alors

$$\psi(x) = \psi_{\text{inc}}(x) + \psi_{\text{refl}}(x)$$

$$\text{à} \quad \psi_{\text{inc}}(x) = e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} x}$$

$$\psi_{\text{refl}}(x) = e^{-\frac{2i}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m(E-V)} dx + i\frac{\pi}{2}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} x}$$

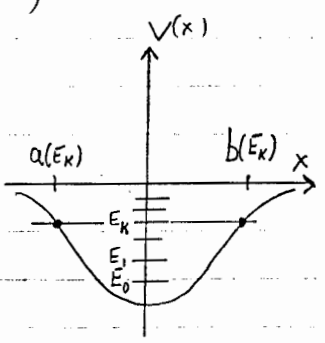
• Le $i\frac{\pi}{2}$ est le déphasage produit par la réflexion sur la barrière.

• Le coefficient de réflexion est le module du préfacteur dans l'onde réfléchie $\Rightarrow R = 1$

\Rightarrow Le coefficient de transmission $T = 0$.

exercice 3

Les états liés sont d'énergies négatives $E_k < 0$ et sont donnés par la règle de Bohr-Sommerfeld :



$$2 \int_{a(E_K)}^{b(E_K)} dx \sqrt{2m(E_K - V(x))} = h \left(K + \frac{1}{2} \right); \quad K \geq 0$$

où $K = \#$ (de noeuds) de la fonction d'onde. Comme l'état fondamental correspond à $K=0$ on a :

$\#$ (d'états d'énergie $\leq E$) = $N(E)$ où

$$h \left(N(E) + \frac{1}{2} \right) = 2 \int_{a(E)}^{b(E)} dx \sqrt{2m(E - V)}$$

$$\Rightarrow N(E=0) = \frac{2}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dx (2m)^{1/2} |V(x)|^{1/2} - \frac{1}{2}$$

Si h est petit N est grand et donc on peut négliger le $1/2$

$$\# \text{ (états liés) } \approx \frac{4\pi}{h} \sqrt{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |V(x)|^{1/2}$$

Soit $V(x) \sim -\frac{1}{|x|^S}$, $x \rightarrow \pm \infty$. Alors :

$|V(x)|^{1/2} \sim \frac{1}{|x|^{S/2}}$ est intégrable à l'infini si $\frac{S}{2} > 1$,

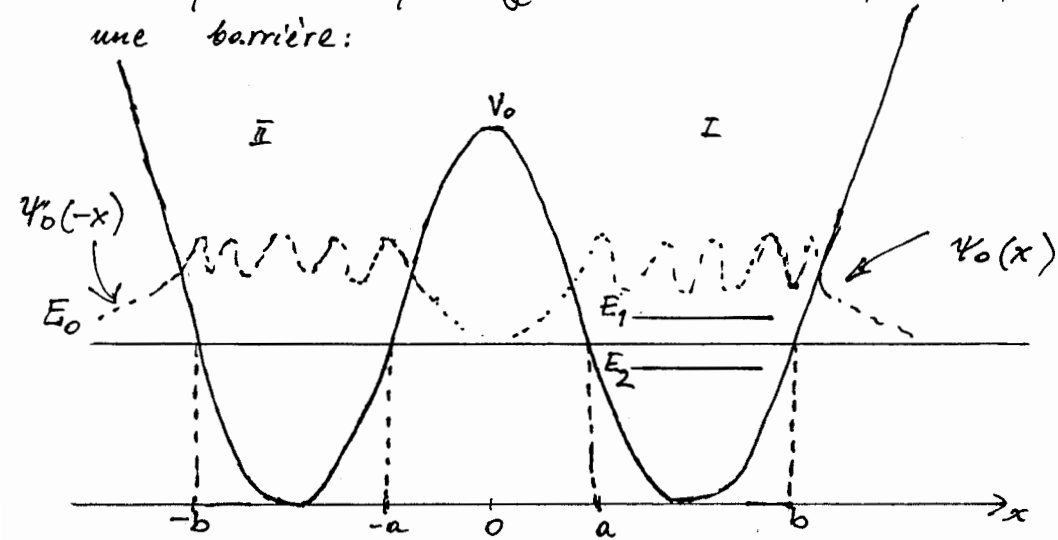
et l'intégrale diverge si $\frac{S}{2} \leq 1$.

Résultat : $\#$ (états liés) est fini si $S > 2$.

$\#$ (états liés) est infini si $S \leq 2$.

Cela explique pourquoi le potentiel de Coulomb (atome d'hydrogène) produit un nombre infini d'états liés. En effet l'équation radiale est unidimensionnelle et le potentiel décroît comme $\frac{1}{r}$, $r \rightarrow +\infty$.

①. Un champ $V(x)$ est constitué de deux puits de potentiel symétriques (I et II) séparés par une barrière:



Si la barrière était infranchissable pour la particule, il existerait des niveaux d'énergie correspondant au mouvement de la particule dans l'un ou l'autre puits séparément, identiques pour les deux puits. La possibilité de franchissement de la barrière aboutit au doublement de chacun de ces niveaux en deux niveaux voisins correspondant à des états tels que la particule se meut simultanément dans les deux puits. En particulier, soit E_0 un certain niveau pour le mouvement de la particule dans un des puits (disons I) et $\psi_0(x)$ la fonction

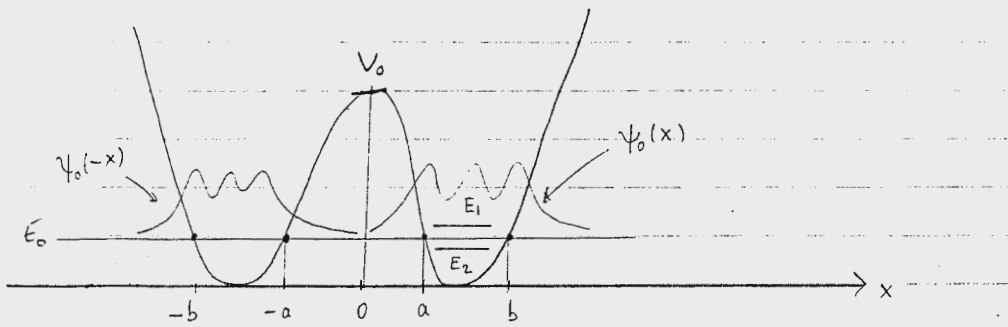
d'onde correspondante (normalisée de telle sorte que l'intégrale $\int \psi_0^2$ dans la région du puits I est égale à l'unité); tenant compte de la faible probabilité de franchissement de la barrière, le niveau se dédouble en niveaux E_1 et E_2 de fonctions d'onde combinaisons linéaires symétrique et antisymétrique de $\psi_0(x)$ et $\psi_0(-x)$

$$\begin{cases} \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x) - \psi_0(-x)] \\ \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x) + \psi_0(-x)] \end{cases}$$

Déterminer la grandeur du dédoublement énergétique.

Corrige de la série 5.

Double puit symétrique.



Pour $\psi_0(x)$ on prend la soln approximative obtenue en négligeant l'effet tunnel entre le puit de droite et celui de gauche :

$$0 < x \ll a : \psi_0(x) = \frac{D}{(2m(V-E_0))^{1/4}} e^{-\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x \sqrt{2m(V-E_0)} \right|}$$

règle de correction

$$a \ll x \ll b : \psi_0(x) = \frac{2D}{(2m(E_0-V))^{1/4}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x \sqrt{2m(E_0-V)} \right| - \frac{\pi}{4} \right\}$$

$$b \ll x : \psi_0(x) = \frac{D'}{(2m(V-E_0))^{1/4}} e^{-\frac{1}{\hbar} \left| \int_b^x \sqrt{2m(E_0-V)} \right|}$$

De manière analogue on a $\psi_0(-x)$ dans le puit de gauche.

La constante de Normalisation peut se calculer approximativement de la manière suivante : (voir aussi le cours)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_0(x)|^2 &\approx \int_a^b dx |\psi_0(x)|^2 \\ &= 4D^2 \int_a^b dx \frac{1}{(2m(E_0-V))^{1/2}} \cos^2 \left\{ \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x \sqrt{2m(E_0-V)} \right| - \frac{\pi}{4} \right\} \\ &\approx 2D^2 \int_a^b \frac{dx}{(2m(E_0-V))^{1/2}} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow D = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\int_a^b \frac{dx}{(2m(E_0-V))^{1/2}} \right)^{-1/2}$$

Si l'on tient compte de l'effet tunnel entre les deux puits on obtient un dédoublement du niveau E_0 en E_1 et E_2 qui correspondent approximativement aux états :

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_0(x) - \psi_0(-x)) \quad \text{état antisymétrique}$$

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_0(x) + \psi_0(-x)) \quad \text{état symétrique}$$

Remarque : l'état antisym a une énergie plus grande que l'état sym, puisqu'il y a un nœud de plus dans l'état antisym.

Le facteur $\frac{1}{\sqrt{2}}$ arrive par ψ_1 et ψ_2 sont normalisés. En effet:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_1(x)|^2 dx = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} (|\psi_0(x)|^2 + |\psi_0(-x)|^2 - 2\psi_0(x)\psi_0(-x)) dx$$

$$\approx \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 dx + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(-x)|^2 dx$$

presque toujours nul
car le recouvrement est faible

$$= 1$$

Dérivation de $E_2 - E_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_0(0) \psi_0'(0)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_2''(x) + V(x) \psi_2(x) = E_2 \psi_2(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_0''(x) + V(x) \psi_0(x) = E_0 \psi_0(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi_0(x) \psi_2''(x) - \psi_2(x) \psi_0''(x)) = (E_2 - E_0) \psi_2(x) \psi_0(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} (\psi_0(x) \psi_2'(x) - \psi_2(x) \psi_0'(x)) = (E_2 - E_0) \underbrace{\psi_2(x) \psi_0(x)}_{\approx \frac{1}{2} |\psi_0(x)|^2}$$

en intégrant de 0 à +∞ : (et $\int_0^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 dx \approx \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = 1$)

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\psi_0(0) \psi_2'(0) - \psi_2(0) \psi_0'(0)) \approx (E_2 - E_0) \frac{1}{2}$$

mais $\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_0(x) + \psi_0(-x))$

$$\Rightarrow \psi_2(0) = \frac{2}{\sqrt{2}} \psi_0(0)$$

et $\psi_2'(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_0'(x) - \psi_0'(-x))$

$$\Rightarrow \psi_2'(0) = 0$$

donc : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{\sqrt{2}} \psi_0(0) \psi_0'(0) \approx (E_2 - E_0) \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$\Rightarrow \boxed{E_2 - E_0 = -\frac{\hbar^2}{m} \psi_0(0) \psi_0'(0)}$$

De manière analogue:

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\psi_0(0) \psi_1'(0) - \psi_1(0) \psi_0'(0)) \approx (E_1 - E_0) \frac{1}{\sqrt{2}}$$

mais $\psi_1(0) = 0$ et $\psi_1'(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_0'(x) + \psi_0'(-x)) \Rightarrow \psi_1'(0) = \frac{2}{\sqrt{2}} \psi_0'(0)$

donc $\frac{\hbar^2}{2m} \psi_0(0) \frac{2}{\sqrt{2}} \psi_0'(0) = (E_1 - E_0) \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$\Rightarrow \boxed{E_1 - E_0 = \frac{\hbar^2}{m} \psi_0(0) \psi_0'(0)}$$

Splittings : $E_1 - E_2 = (E_1 - E_0) - (E_2 - E_0)$

$$E_1 - E_2 = \frac{2\hbar^2}{m} \psi_0(0) \psi_0'(0)$$

Pour calculer $\psi_0(0) \psi_0'(0)$ on utilise la formule d'airie WKB avec la bonne normalisation; pour x près de l'origine :

$$\psi_0(x) = \frac{D}{(2m(V(x) - E_0))^{1/4}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x (2m(V(x) - E_0))^{1/2} dx}$$

$$\psi_0'(x) = -\frac{D}{\hbar} \frac{2mV'(x)}{(2m(V(x) - E_0))^{5/4}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x (2m(V(x) - E_0))^{1/2} dx}$$

$$+ \frac{D}{(2m(V(x) - E_0))^{1/4}} \frac{1}{\hbar} (2m(V(x) - E_0))^{1/2} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x (2m(V(x) - E_0))^{1/2} dx}$$

Donc pour $x=0$:

$$\psi_0(0) = \frac{D}{(2m(V_0 - E_0))^{1/4}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m(V(x) - E_0)} dx}$$

$$\psi_0'(0) = \frac{D}{\hbar} (2m(V_0 - E_0))^{1/4} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m(V(x) - E_0)} dx}$$

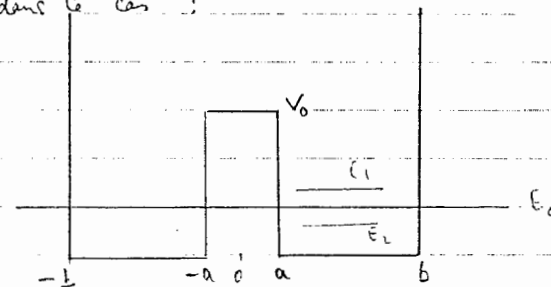
$$\psi_0(0) \psi_0'(0) = \frac{D^2}{\hbar} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m(V(x) - E_0)} dx}$$

$$\Rightarrow \psi_0(0) \psi_0'(0) = \frac{1}{2\hbar} \left(\int_a^b \frac{dx}{\sqrt{2m(E_0 - V(x))}} \right)^{-1} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m(V(x) - E_0)} dx}$$

$$E_1 - E_2 = \frac{\hbar}{m} \frac{\exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m(V(x) - E_0)} dx\right]}{\int_a^b \frac{dx}{\sqrt{2m(E_0 - V(x))}}}$$

On voit que l'on a une singularité essentielle de type $e^{-\frac{1}{\hbar}}$.
Le résultat est non-perturbatif.

Pour se convaincre qu'il est raisonnable on peut faire le calcul exact dans ce cas :



et voir que la formule ci-dessus s'applique pour $\hbar \rightarrow 0$.

$$E_1 - E_2 \approx \frac{\hbar}{m} \frac{\sqrt{2mE_2}}{b-a} e^{-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E_0)}}$$

Série 6

exercice 1. Formule de Trotter

utilises la propriété $\lim_{N \rightarrow +\infty} \left(1 + \frac{M}{N}\right)^N = e^M$, où

M est une matrice hermitienne, pour dériver la formule de Lie-Trotter :

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \left(e^{\frac{A}{N}} e^{\frac{B}{N}} \right)^N = e^{A+B}$$

où A et B sont deux matrices hermitiennes.

exercice 2. Propagateur de la particule libre

Le propagateur de la particule libre satisfait à l'équation différentielle de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle q | U_t | q' \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_q \langle q | U_t | q' \rangle, \quad t > 0$$

avec la condition initiale $\langle q | U_{t=0} | q' \rangle = \delta(q - q')$.

Montre que

$$\langle q | U_t | q' \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{d/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(q - q')^2}{t} \right)$$

exercice 3 Etablis, à partir de l'exponen

$$\langle q' | U_t | q \rangle = \int_{q(0)=q}^{q(t)=q'} \mathcal{D}q \, e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\frac{m}{2} \dot{q}(s)^2 - V(q(s)) \right) ds}$$

le calcul de perturbations usuel de la mécanique quantique :

$$U_t = U_t^0 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t ds_1 (U_{t-s_1}^0 V U_{s_1}^0) + \dots - \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_0^t ds_n \int_0^{s_n} ds_{n-1} \dots \int_0^{s_2} ds_1 \dots \left(U_{t-s_n}^0 V U_{s_n-s_{n-1}}^0 V \dots V U_{s_1}^0 \right) + \dots$$

où $U_t^0 = \text{op d'évolution libre de } H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$.

Corrigé de la Série 6

exercice 1 :

$$e^{\frac{A}{N}} e^{\frac{B}{N}} = \left(1 + \frac{A}{N} + \frac{1}{2!} \frac{A^2}{N^2} + \dots \right) \left(1 + \frac{B}{N} + \frac{1}{2!} \frac{B^2}{N^2} + \dots \right)$$

$$= \left(1 + \frac{A+B}{N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right)$$

$$\left(e^{\frac{A}{N}} e^{\frac{B}{N}} \right)^N = \left(1 + \frac{1}{N} (A+B + O\left(\frac{1}{N}\right)) \right)^N$$

$$\approx \exp(A+B + O\left(\frac{1}{N}\right))$$

$$\xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \exp(A+B)$$

Ici on a utilisé que $M = A+B + O\left(\frac{1}{N}\right)$.

exercice 2 : *longue*

1^{ère} méthode : On remplace l'expression dans l'éq. différentielle et on vérifie :

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle q | U_t | q' \rangle = - \left(\frac{m}{2m\hbar t} \right)^{d/2} \left(-\frac{d}{2} \right) \frac{1}{t^{d/2+1}} \exp \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(q-q')^2}{t}$$

$$+ \left(\frac{m}{2m\hbar t} \right)^{d/2} \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} (q-q')^2 \left(-\frac{1}{t^2} \right) \exp \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(q-q')^2}{t}$$

$$\Rightarrow \frac{i\hbar}{\partial t} \langle q | U_t | q' \rangle = -i\hbar \left(\frac{m}{2m\hbar t} \right)^{d/2} \exp \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(q-q')^2}{t} \left\{ \frac{im}{2t} \frac{(q-q')^2}{t^2} + \frac{d}{2t} \right\}$$

$$\Delta_q \langle q | U_t | q' \rangle = \left(\frac{m}{2m\hbar t} \right)^{d/2} \frac{\nabla^2}{q} \cdot \left\{ \frac{im}{2\hbar t} 2(q-q') \exp \left(\frac{im}{2\hbar t} \frac{(q-q')^2}{t} \right) \right\}$$

$$= \left(\frac{m}{2m\hbar t} \right)^{d/2} \left\{ \frac{im}{\hbar t} d + \frac{im}{2\hbar t} 2(q-q') \cdot \frac{im}{2\hbar t} 2(q-q') \right\}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_q \langle q | U_t | q' \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m}{2m\hbar t} \right)^{d/2} \left\{ -\frac{m^2}{\hbar^2 t^2} (q-q')^2 + \frac{im}{\hbar t} d \right\}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m}{2m\hbar t} \right)^{d/2} \left\{ -\frac{m}{2\hbar} \frac{(q-q')^2}{t^2} + \frac{id}{2t} \right\}$$

$$\frac{\hbar^2}{m} \Delta \varphi \langle \varphi | U_t | \varphi \rangle = -i\hbar \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{d/2} \left\{ \frac{i m (q-q')^2}{2\hbar t^2} + \frac{d}{2t} \right\}$$

on la condition initiale et fait vérifier que

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{d/2} \exp\left(\frac{i m (q-q')^2}{2\hbar t} \right) = \delta(q-q')$$

puisque par ex si $d=3$ $q = (x, y, z)$

$$\delta(q-q') = \delta(x-x') \delta(y-y') \delta(z-z') \quad \text{et}$$

$$|q-q'|^2 = |x-x'|^2 + |y-y'|^2 + |z-z'|^2$$

il suffit de vérifier pour une dimension que

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{i m (x-x')^2}{2\hbar t} \right) = \delta(x-x')$$

cette formule signifie en fait : ($\varphi(x) = \text{fct test}$),

$$\lim_{t \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \varphi(x') \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{i m (x-x')^2}{2\hbar t} \right) = \varphi(x).$$

Now vérifions maintenant cette dernière égalité :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx' \varphi(x') \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{i m (x-x')^2}{2\hbar t} \right)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \varphi(\sqrt{t}x' + x) \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{i m x'^2}{2\hbar} \right)$$

$$\rightarrow \lim_{t \rightarrow 0} \varphi(x) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx' \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{i m x'^2}{2\hbar} \right)}_1 \quad \text{c.q.f.d.}$$

la dernière intégrale vaut 1 car en effet c'est l'intégrale de Fresnel :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{i \lambda y^2} = \left(\frac{2\pi}{|\lambda|} \right)^{1/2} e^{i \frac{\pi}{4} \text{sgn } \lambda}$$

(Note : la convention est que $i^{1/2} = e^{i\pi/4}$).

compte

2^{ème} méthode:

On prend la transformée de Fourier de l'équation de Schrödinger:

$$G_t(k) = \int d(q-s') e^{i k(q-s')} \langle q | U_t | q' \rangle$$

$$\rightarrow \begin{cases} i \hbar \frac{\partial}{\partial t} G_t(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} G_t(k) & \text{et} \\ G_{t=0}(k) = 1 \end{cases}$$

donc $G_t(k) = e^{-\frac{i \hbar k^2 t}{2m}}$

la transformée de Fourier inverse est

$$\begin{aligned} \langle q | U_t | q' \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int dk e^{-i k(q-s')} G_t(k) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int dk e^{-\frac{i \hbar t}{2m} \left(k + \frac{m}{\hbar t} (q-s')\right)^2} e^{\frac{i \hbar t}{2m} \frac{m^2}{\hbar^2 t^2} (q-s')^2} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} e^{\frac{i m (q-s')^2}{\hbar t}} \int dk e^{-\frac{i \hbar t}{2m} k^2} \\ &= \left(\frac{2\pi m}{i \hbar t}\right)^{d/2} e^{-i \frac{\pi}{4} d/2} \quad (\text{Fresnel}) \end{aligned}$$

exercice 3

On va établir le calcul de perturbation par l'opérateur d'évolution, (série de Dyson) en prenant comme point de départ l'intégrale de Feynman. Cette méthode est le germe du calcul de perturbation en th des champs, matrice condensée (at m th des cordes).

Tout simplement on développe l'exponentielle du potentiel:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t V(q(s)) ds} = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t ds V(q(s_1)) + \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \left(\int_0^t V(q(s_2)) ds\right)^2 + \dots$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t ds V(q(s_1)) + \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t ds_2 \int_0^{s_2} ds_1 V(q(s_2)) V(q(s_1)) + \dots$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t ds V(q(s_1)) + \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 2! \int_0^t ds_2 \int_0^{s_2} ds_1 V(q(s_2)) V(q(s_1)) + \dots$$

le terme général de la série peut s'écrire:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{m!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^m \int_0^t ds_m \dots \int_0^{s_1} ds_1 V(q(s_m)) \dots V(q(s_1)) \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^m \int_0^t ds_m \int_0^{s_m} ds_{m-1} \dots \int_0^{s_2} ds_1 V(q(s_m)) \dots V(q(s_1)) \end{aligned}$$

donc le dernier intégrale on a ordonné le temps pour avoir

$$0 \leq s_1 \leq s_2 \leq \dots \leq s_{m-1} \leq s_m \leq t.$$

En remplaçant dans l'intégrale de Feynman on trouve le développement du propagateur :

$$\langle q' | U_t | q \rangle = \sum_{m=0}^{+\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^m \int_0^t ds_m \int_0^{s_m} ds_{m-1} \dots \int_0^{s_2} ds_1 \int_{q(0)=q}^{q(t)=q'} \mathcal{D}q e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \frac{m}{2} \dot{q}(s)^2} V(q(s_m)) \dots V(q(s_1))$$

$$\text{Mais } \int_0^t \frac{m}{2} \dot{q}(s)^2 = \int_0^{s_1} \frac{m}{2} \dot{q}(s)^2 + \int_{s_1}^{s_2} \frac{m}{2} \dot{q}(s)^2 + \dots + \int_{s_{m-1}}^{s_m} \frac{m}{2} \dot{q}(s)^2 + \int_{s_m}^t \frac{m}{2} \dot{q}(s)^2$$

de plus on peut décomposer la somme sur les chemins

$$\int_{q(0)=q}^{q(t)=q'}$$

de la manière suivante :

$$\int_{q(0)=q}^{q(t)=q'} \int_{q(s_m)=q_m}^{q(s_m)=q_m} \dots \int_{q(s_2)=q_2}^{q(s_2)=q_2} \int_{q(s_1)=q_1}^{q(s_1)=q_1} \int_{q(0)=q}^{q(0)=q} \mathcal{D}q \dots \mathcal{D}q \mathcal{D}q \mathcal{D}q$$

Alors on voit que :

$$\int_{q(0)=q}^{q(t)=q'} \mathcal{D}q e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \frac{m}{2} \dot{q}(s)^2} V(q(s_m)) \dots V(q(s_1))$$

$$= \int_{q(s_m)=q_m}^{q(s_m)=q_m} ds_m \int_{q(s_{m-1})=q_{m-1}}^{q(s_{m-1})=q_{m-1}} ds_{m-1} \dots \int_{q(s_1)=q_1}^{q(s_1)=q_1} ds_1 \int_{q(0)=q}^{q(0)=q} \mathcal{D}q e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{s_m}^t \dot{q}^2} V(q(s_m)) \dots V(q(s_1)) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{s_{m-1}}^{s_m} \dot{q}^2} \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^{s_1} \dot{q}^2}$$

$$= \int_{q_m} dq_m \int_{q_{m-1}} dq_{m-1} \dots \int_{q_1} dq_1 V(q_m) \dots V(q_1) \langle q' | U(t, s_m) | q_m \rangle \langle q_m | U(s_m, s_{m-1}) | q_{m-1} \rangle \dots \langle q_1 | U(s_1, 0) | q \rangle$$

où U_t^0 est l'op d'évolution associé à $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$

$$\text{c.a.d. } U_t^0 = \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} H_0\right) = U^0(t, 0).$$

Ainsi

$$\int_{q'}^q \mathcal{D}q \ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \frac{m}{2} \dot{q}(s)^2} V(q(s_1)) \dots V(q(s_1))$$

$$= \langle q' | U^\circ(t, s_1) V U^\circ(s_1, s_{n-1}) V \dots V U^\circ(s_1, 0) | q \rangle$$

En remplaçant dans la somme $\sum_{m=0}^{+\infty}$ page 9 on obtient :

$$U_t = \sum_{m=0}^{+\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^m \int_0^t ds_m \int_0^{s_m} ds_{m-1} \dots \int_0^{s_2} ds_1 (U^\circ(t, s_m) V U^\circ(s_m, s_{m-1}) V \dots V U^\circ(s_1, 0))$$

puisque les termes sont :

$$U(t, 0) = U^\circ(t, 0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t ds_1 U^\circ(t, s_1) V U^\circ(s_1, 0)$$

$$+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t ds_2 \int_0^{s_2} ds_1 U^\circ(t, s_2) V U^\circ(s_2, s_1) V U^\circ(s_1, 0) + \dots$$

Remarque :

La formule canonique pour cet exercice est celle qui est encadrée sur la page 11. On l'a obtenue en partant du membre de gauche (int. fonctionnelle) pour arriver au membre de droite (forme opératorielle).

Ici on montre comment l'obtenir en partant du membre de droite (c'est peut être plus clair).

En introduisant N relations de fermeture :

$$\langle q' | U^\circ(t, s_n) V U^\circ(s_n, s_{n-1}) \dots V U^\circ(s_2, s_1) V U^\circ(s_1, 0) | q \rangle$$

$$= \int dq_n \dots dq_1 \langle q' | U^\circ(t, s_n) | q_n \rangle V(q_n) \langle q_n | U^\circ(s_n, s_{n-1}) | q_{n-1} \rangle$$

$$\dots V(q_2) \langle q_2 | U^\circ(s_2, s_1) | q_1 \rangle V(q_1) \langle q_1 | U^\circ(s_1, 0) | q \rangle$$

(on a utilisé le fait que $\langle V | q \rangle = \langle q | q \rangle$)

mais pour l'évolution libre on a :

$$\langle q_j | U^\circ(s_j, s_{j-1}) | q_{j-1} \rangle = \int_{q(s_{j-1})=q_{j-1}}^{q(s_j)=q_j} \mathcal{D}q \ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{s_{j-1}}^{s_j} ds \frac{m}{2} \dot{q}(s)^2}$$

$$\langle q' | U^\circ(t, s_n) V U^\circ(s_n, s_{n-1}) \dots V U^\circ(s_2, s_1) V U^\circ(s_1, 0) | q \rangle$$

$$\int_{q(s_n)=q'} \int_{q(s_{n-1})=q_n} \int_{q(s_{n-2})=q_{n-1}} \int_{q(s_{n-3})=q_{n-2}} \dots \int_{q(s_1)=q} V(q_n) \dots V(q_1)$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_j \int_{s_{j-1}}^{s_j} du \frac{1}{2} m \dot{q}(u)^2}$$

$$\int_{q(s_1)=q} \int_{q(s_2)} \dots \int_{q(s_n)} V(q(s_n)) V(q(s_{n-1})) \dots V(q(s_1)) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t du \frac{1}{2} m \dot{q}(u)^2}$$

$$q(0)=q$$

Série 7

exercice n° 1

- 1) Considérez une particule soumise à un champ électrique constant E , à 1 dimension. Calculez les éléments de matrices du propagateur $\langle q | U_t | q' \rangle$.

Soit $\psi_0(q) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} e^{-\frac{q^2}{4}}$ l'état initial

de la particule (à $t=0$). Remarquez que $\int |\psi_0|^2 = 1$

Calculez son état à l'instant t grâce à :

$$\psi_t(q) = \int dq' \langle q | U_t | q' \rangle \psi_0(q')$$

- 2) Calculez le propagateur si le champ électrique dépend du temps $E(t)$. Notez que $U_t \neq \exp\left(\frac{i}{\hbar} H(t)\right)$. Néanmoins la formule de Feynman s'applique :

$$\langle q | U_t | q' \rangle = \int_{q'}^q \mathcal{D}q \ e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t ds \left(\frac{1}{2} m \dot{q}(s)^2 + e E(s) q(s) \right)}$$

Faire le calcul explicite pour $E(t) = E_0 \sin \omega t$. Calculez l'évolution de $\psi_0(q)$ dans ce cas.

Exercice n° 2 : Oscillateur Harmonique Forcé.

On considère un oscillateur forcé par une force extérieure $F(t)$. L'équation du mouvement classique est

$$m \ddot{q}(s) = -m\omega^2 q(s) + F(s)$$

Ecrivez le Lagrangien. Calculez le noyau de l'opérateur d'évolution par l'intégrale de Feynman

$$\langle q' | U_t | q \rangle = \int_0^t$$

(Note : $U(t,0) \neq \exp\left(\frac{i}{\hbar} H\right)$ car H dépend du temps.)

Application aux états cohérents : Nous rappelons qu'un état cohérent centré en (p_0, q_0) possède une fonction d'onde

$$\langle q | p_0, q_0 \rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} p_0 q - \frac{m\omega}{2\hbar} (q - q_0)^2 \right\}$$

$$= \int dq' \langle q | U_t | q' \rangle \langle q' | p_0, q_0 \rangle$$

- (i) Montrez que si $F=0$: $\langle q | U_t | p_0, q_0 \rangle = \langle q | p_t, q_t \rangle$ où $(p_t, q_t) = \text{traj. classique avec cond. initiales } (p_0, q_0)$.

- (ii) Montrez pour $F \neq 0$: $\langle q | U_t | 0, 0 \rangle = \langle q | p_t, q_t \rangle$ où $(p_t, q_t) = \text{traj. classique avec cond. initiales } (0, 0)$. Notez que $|0, 0\rangle$ est l'état fondamental de l'osc. harmonique.

Exercice n° 3 :

Calculer la fonction de partition de l'oscillateur harmonique en utilisant la formule de Feynman-Kac.

(La formule de Feynman-Kac est l'intégrale de Feynman en temps imaginaire $t = -i\beta\hbar$.)

Il faut évaluer

$$Tr e^{-\beta H} = \int dx \int \mathcal{D}x e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} ds \left(\frac{1}{2} m \dot{x}(s)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x(s)^2 \right)}$$

$x(0) = x(\beta\hbar) = x$

Calculer aussi $\langle q' | \exp -\beta H | q \rangle$ et vérifier que l'on trouve

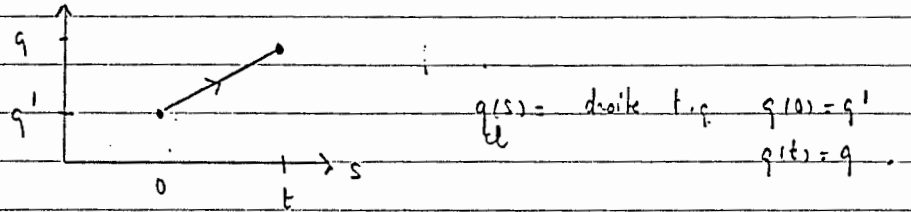
$$\langle q' | \exp -\beta H | q \rangle = \left(\frac{m}{2\pi\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{\omega}{\sinh \omega\beta\hbar} \right)^{1/2} \cdot \exp -\frac{m\omega}{2 \sinh \omega\beta\hbar} \left\{ (q^2 + q'^2) \cosh(\omega\beta\hbar) - 2qq' \right\}$$

(suivre la méthode du cours)

exercice 4

Dans cet exercice on veut discuter certains aspects de la dérivation de l'intégrale de Feynman. Nous faisons ici une dérivation légèrement différente que dans le cours.

(i) Soit une particule classique libre allant de q' en $t=0$ à q en t . Calculer l'action de la trajectoire classique



(ii) Soit t_j et t_{j+1} deux instants successifs t.q. $(t_{j+1} - t_j) = \varepsilon$, infinitésimal. Montrer que en première approximation

$$\langle q_{j+1} | U_\varepsilon | q_j \rangle \approx \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{d/2} \exp \frac{i}{\hbar} \int \frac{m}{2} \frac{(q_{j+1} - q_j)^2}{\varepsilon} - \varepsilon V(q_j)$$

(iii) Utiliser le fait que $(U_\varepsilon)^N \doteq U_t$ pour $\varepsilon = \frac{t}{N}$, pour

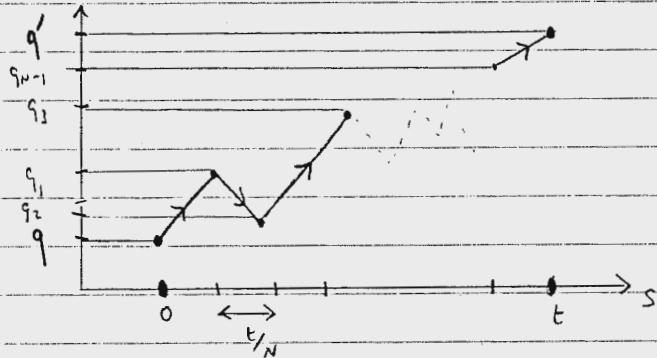
retrouver la formule intermédiaire du cours :

$$\langle q | U_t | q' \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{mN}{2\pi i \hbar t} \right)^{Nd/2} \int dq_{N-1} \dots dq_1 \exp \frac{i}{\hbar} t \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} \frac{m}{2} \frac{(q_{j+1} - q_j)^2}{(t/N)^2} - \sum_{j=0}^N V(q_j) \right\}$$

Utiliser i) par voie que on peut écrire

$$\langle q | U_t | q' \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{mN}{2\pi i \hbar t} \right)^{Nd/2} \int dq_{N-1} \dots dq_1 \exp \frac{i}{\hbar} S(q_1, \dots, q_{N-1})$$

où $S(q_1, \dots, q_{N-1})$ dénote l'Action de Hamilton du chemin :



Conclure avec la formule de Feynman pour $N \rightarrow \infty$.

déjà fait.)

~~exercice 5~~

Etablis, à partir de l'expression

$$\langle q' | U_t | q \rangle = \int_{q(0)=q}^{q(t)=q'} \mathcal{D}q \ e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\frac{m}{2} \dot{q}(s)^2 - V(q(s)) \right) ds}$$

le calcul de perturbations usuel de la mécanique quantique :

$$U_t = U_t^0 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t ds_1 (U_{t-s_1}^0 V U_{s_1}^0) + \dots + (-\frac{i}{\hbar})^m \int_0^t ds_m \int_0^{s_m} ds_{m-1} \dots \int_0^{s_2} ds_1 \dots (U_{t-s_m}^0 V U_{s_m-s_{m-1}}^0 \dots V U_{s_1}^0) + \dots$$

où U_t^0 = op d'évolution libre de $t_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$.

~~exercice 6~~

Limite classique de la fonction de partition quantique.

Posez $t = -i\beta\hbar$ pour montrer que

$$\langle q | e^{-\beta H} | q \rangle = \langle q | U_{t=-i\beta\hbar} | q \rangle = \int_{x(0)=q}^{x(\beta\hbar)=q} \mathcal{D}x \ e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} ds \left(\frac{m}{2} \dot{x}(s)^2 + V(x(s)) \right)}$$

Utiliser ce résultat pour montrer que :

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{h} \text{Tr} e^{-\beta H} = \int dp dq \ e^{-\beta \left(\frac{p^2}{2m} + V(q) \right)}$$

↑ fonction de partition quantique.
 ↑ fonction de partition classique.

Corrigé : Série 7

Exercice 1.

1) Le Lagrangien est $\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 + eEq$

(ici $V(q) = -eEq \Rightarrow$ Force $= -V'(q) = eE$.)

On a :

$$\langle q' | U_t | q \rangle = \int_{q(0)=q}^{q(t)=q'} \mathcal{D}q(s) e^{\frac{i}{\hbar} S(q(s))}$$

posons $q(s) = q_{cl}(s) + \gamma(s)$ et q_{cl} satisfait

l'équation du mouvement classique avec conditions aux limites :

$$m \ddot{q}_{cl} = eE, \quad q(0) = q, \quad q(t) = q'$$

$$\Rightarrow q_{cl}(s) = \frac{eE}{2m} s^2 + As + B$$

$$\Rightarrow B = q \quad \text{et} \quad \frac{eE}{2m} t^2 + At + q = q'$$

$$\Rightarrow A = \frac{1}{t} \left(q' - q - \frac{eE}{2m} t^2 \right)$$

$$q_{cl}(s) = \frac{eE}{2m} s^2 + \frac{s}{t} \left(q' - q - \frac{eE}{2m} t^2 \right) + q$$

L'action du chemin classique est

$$S(q_{cl}) = \int_0^t ds \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{eE}{m} s + \frac{1}{t} (q' - q - \frac{eE}{2m} t^2) \right)^2 + eE \left(\int_0^t ds \left(\frac{eE}{2m} s^2 + \frac{s}{t} (q' - q - \frac{eE}{2m} t^2) + q \right) \right) \right]$$

$$\begin{aligned} &= \int_0^t ds \left\{ \frac{1}{2} \frac{(eE)^2}{m} s^2 + \frac{s}{t} eE \left(q' - q - \frac{eE}{2m} t^2 \right) + \frac{1}{2} m \frac{1}{t^2} \left(q' - q - \frac{eE}{2m} t^2 \right)^2 \right\} \\ &+ \int_0^t ds \left\{ \frac{(eE)^2}{2m} s^2 + \frac{s}{t} eE \left(q' - q - \frac{eE}{2m} t^2 \right) + q eE \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow S(q_{cl}) &= \frac{(eE)^2}{m} \frac{t^3}{3} + eE \left(q' - q - \frac{eE}{2m} t^2 \right) t \\ &+ \frac{m}{2t} \left(q' - q - \frac{eE}{2m} t^2 \right)^2 + q t eE \end{aligned}$$

$$S(q_{cl}) = -\frac{(eE)^2}{24m} t^3 + \frac{m}{2t} (q - q')^2 + (q + q') \frac{eEt}{2}$$

Pour $q(s) = q_{cl} + \eta$ avec $\eta(0) = \eta(t) = 0$ on a :

$$\begin{aligned} S[q] &= S[q_{cl}] + \int_0^t ds \left(\frac{1}{2} m \dot{z} \dot{q}_{cl} \dot{\eta} + \frac{1}{2} m \dot{\eta}^2 \right) + eE \int_0^t \eta \\ &= S[q_{cl}] + \underbrace{\int_0^t ds (m \dot{q}_{cl} \dot{\eta} + eE \eta)}_{\int_0^t ds (-m \ddot{q}_{cl} + eE) \eta(s)} + \int_0^t \frac{1}{2} m \dot{\eta}^2 \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow S[q] = S[q_{cl}] + \int_0^t ds \frac{1}{2} m \dot{\eta}^2$$

$$\Rightarrow \langle q' | U_t | q \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} S(q_{cl})} \underbrace{\int_{\eta(0)=\eta(t)=0} \mathcal{D}\eta}_{\left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \frac{1}{2} m \dot{\eta}^2}$$

$$\langle q' | U_t | q \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} e^{\frac{i m}{2\hbar E} (q - q')^2} \cdot e^{-\frac{i (eE)^2 t^3}{24 m \hbar} + \frac{i e E t}{2\hbar} (q + q')}$$

2) Pour un champ électrique variable dans le temps on a :

$$\begin{aligned} \langle q' | U_t | q \rangle &= \int_q^{q'} \mathcal{D}q \ e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\frac{1}{2} m \dot{q}^2 + eE(s) q(s) \right) ds} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} S(q_{cl})} \int_{\eta(0)=\eta(t)=0} \mathcal{D}\eta \ e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \frac{1}{2} m \dot{\eta}^2} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} \exp \frac{i}{\hbar} (S(q_{cl})) \end{aligned}$$

Il faut donc calculer $S(q_{cl})$:

$$m \ddot{q}_{cl} = eE(t) \Rightarrow \dot{q}_{cl}(s) = \frac{e}{m} \int_0^s E(u) du + A$$

$$q_{cl}(s) = \frac{e}{m} \int_0^s du \int_0^u E(u) du + As + B$$

$$q_{cl}(0) = q \quad \text{et} \quad q_{cl}(t) = q'$$

$$\Rightarrow B = q \quad \text{et} \quad q' = \frac{e}{m} \left(du \int_0^u E(u) du + At + q \right)$$

$$\Rightarrow A = \frac{1}{t} (q' - q) - \frac{e}{m t} \int_0^t du \int_0^u E(u) du$$

$$q_{cl}(s) = \frac{e}{m} \int_0^s du \left(\int_0^u E(w) dw + \frac{e}{t} (q' - q) \right) - \frac{e s}{m t} \int_0^t du \left(\int_0^u E(w) dw + q \right)$$

à partir de là il suffit de remplacer dans $S'(q_{cl})$ par obtenir le propagateur par la formule

$$\langle q' | U_t | q \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S'(q_{cl})}$$

Exercice 2

Oscillateur forcé à 1 dimension.

$$\langle q' | U_t | q \rangle = \int_{q'}^q \mathcal{D}q \ e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t ds \left(\frac{1}{2} m \dot{q}(s)^2 - \frac{m\omega^2}{2} q(s)^2 + F(s) q(s) \right)}$$

posons $q = q_{cl} + \gamma$ où $q_{cl}(0) = q$ et $q_{cl}(t) = q'$

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) = \frac{1}{2} m (\dot{q}_d + \dot{\gamma})^2 - \frac{m\omega^2}{2} (q_d + \gamma)^2 + F(s) (q_d + \gamma)$$

$$= \left(\frac{1}{2} m \dot{q}_d^2 - \frac{m\omega^2}{2} q_d^2 + F q \right) + \left(\frac{1}{2} m \dot{\gamma}^2 - \frac{m\omega^2}{2} \gamma^2 \right)$$

$$+ m \dot{q}_d \dot{\gamma} - m\omega^2 q_d \gamma + F \gamma$$

$$\Rightarrow S(q) = S(q_{cl}) + \int_0^t ds \left(\frac{1}{2} m \dot{\gamma}^2 - \frac{1}{2} m\omega^2 \gamma^2 \right) + \int_0^t ds \left(m \dot{q}_d \dot{\gamma} - m\omega^2 q_d \gamma + F \gamma \right)$$

En intégrant par partie le dernier terme on trouve :

$$\int_0^t (m \dot{q}_d \dot{\gamma} - m\omega^2 q_d \gamma + F \gamma)$$

$$= \int_0^t (-m \ddot{q}_d \gamma - m\omega^2 q_d \gamma + F \gamma)$$

$$= 0$$

↑ à cause de l'équation du mouvement :

$$m \ddot{q}_{cl} = -m\omega^2 q_{cl} + F$$

Ainsi :

$$\langle q' | U_t | q \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} S(q_{cl})} \int_{q'}^q \mathcal{D}\gamma \ e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t ds \left(\frac{1}{2} m \dot{\gamma}^2 - \frac{m\omega^2}{2} \gamma^2 \right)}$$

Non voyons approximer l'intégrale sur les fluctuations qui est la même que celle de l'osc harmonique pur. Non l'avons calculée au cours :

$$\int_{q'}^q \mathcal{D}\gamma \ e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t ds \left(\frac{1}{2} m \dot{\gamma}^2 - \frac{m\omega^2}{2} \gamma^2 \right)} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{\omega}{\sin \omega t} \right)^{1/2}$$

$$\langle q' | U_t | q \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{\omega}{\sin \omega t} \right)^{1/2} e^{i \frac{\pi}{\hbar} S'(q_{cl})}$$

Remarque: la règle pour $\left(\frac{\omega}{\sin \omega t} \right)^{1/2}$ est :

$$\left(\frac{\omega}{\sin \omega t} \right)^{1/2} = \left| \frac{\omega}{\sin \omega t} \right|^{1/2} e^{-i \frac{\pi}{2} \nu}$$

où $\nu = \#$ (de zéros de $\sin \omega t$ dans l'intervalle $]0, t[$).

(voir le cours).

Il reste maintenant à calculer $S'(q_{cl})$:

pour cela il faut résoudre

$$m \ddot{q}_{cl} = -m\omega^2 q_{cl} + F(s) \quad ; \quad q_{cl}(0) = q \text{ et } q_{cl}(t) = q'$$

l'équation du mouvement de l'oscillateur forcé par une force $F(s)$.

solution de l'équation homogène :

$$q_{cl}(s) = A \sin \omega s + B \cos \omega s$$

solution particulière :

$$q_{cl}(s) = \frac{1}{m\omega} \int_0^s du F(u) \sin \omega(s-u)$$

vérification :

$$\dot{q}_{cl}(s) = \frac{\omega}{m\omega} \int_0^s du F(u) \cos \omega(s-u)$$

$$\ddot{q}_{cl}(s) = \frac{1}{m} F(s) - \frac{\omega^2}{m\omega} \int_0^s du F(u) \sin \omega(u-s)$$

$$\ddot{q}_{cl}(s) = \frac{1}{m} F(s) - \omega^2 q_{cl}(s)$$

$$\Rightarrow m \ddot{q}_{cl}(s) = -m\omega^2 q_{cl}(s) + F(s)$$

sol générale :

$$q_{cl}(s) = A \sin \omega s + B \cos \omega s + \frac{1}{m\omega} \int_0^s du F(u) \sin \omega(s-u)$$

on veut satisfaire les conditions aux limites :

$$q = B$$

\Rightarrow

$$B = q$$

$$q' = A \sin \omega t + q \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} \int_0^t du F(u) \sin \omega(t-u)$$

\Rightarrow

$$A = \frac{1}{\sin \omega t} (q' - q \cos \omega t - \frac{1}{m\omega} \int_0^t du F(u) \sin \omega(t-u))$$

On peut maintenant calculer $S(q, q')$. Le calcul donne

$$S(q, q') = \frac{m\omega}{2 \sin \omega t} \left\{ (q^2 + q'^2) \cos \omega t - 2qq' + \frac{2q'}{m\omega} \int_0^t F(s) \sin \omega s ds + \frac{2q}{m\omega} \int_0^t F(s) \sin \omega(t-s) ds - \frac{2}{m^2 \omega^2} \int_0^t ds \int_0^s du F(u) F(s) \sin \omega(t-s) \sin \omega u \right\}$$

Application des formules obtenues aux propriétés des états cohérents.

Les états cohérents de l'oscillation harmonique sont définis par

$$\langle q | p_0, q_0 \rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p_0 q - \frac{m\omega}{2\hbar} (q - q_0)^2 \right\}$$

où (p_0, q_0) sont des nombres réels fixés et q est la variable de la fonction d'onde. Ces états ont la propriété :

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

$$\text{où } \Delta p = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2, \quad \Delta q = \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2$$

Ce sont les états les plus classiques possibles car ils satisfont l'inégalité de Heisenberg $\Delta p \Delta q \geq \frac{\hbar}{2}$.

Le calcul donne en fait

$$\langle p \rangle = p_0, \quad \langle q \rangle = q_0$$

$$\Delta p = \left(\frac{\hbar m \omega}{2} \right)^{1/2}, \quad \Delta q = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2}$$

Evolution des états cohérents pour l'osc harmonique usuel ($F(s)=0$).

L'op. d'évolution est

$$\langle q' | U(t,0) | q \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{\omega}{\sin \omega t} \right)^{1/2} \cdot \exp \frac{i m \omega}{\hbar 2 \sin \omega t} \left\{ (q^2 + q'^2) \cos \omega t - 2 q q' \right\}$$

on peut vérifier que :

$$\langle q | U_t | p_0 q_0 \rangle = \langle q | P_t q_t \rangle \quad \text{où}$$

(P_t, q_t) est la trajectoire classique de l'osc avec conditions initiales (p_0, q_0)

$$\begin{cases} q_t = \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t + q_0 \cos \omega t \\ p_t = p_0 \cos \omega t - m\omega q_0 \sin \omega t \end{cases}$$

Ainsi un état cohérent reste cohérent au cours du temps et est centré sur la trajectoire classique.

Pour prouver cette propriété il suffit de calculer les intégrales gaussiennes. En effet

$$\langle q | U_t | p_0 q_0 \rangle = \int dq' \underbrace{\langle q | U_t | q' \rangle}_{\text{gaussienne}} \underbrace{\langle q' | P_0 q_0 \rangle}_{\text{gaussienne}}$$

Evolution du Fondamental de l'osc harmonique Forcé :

Considérons un oscillateur forcé par $F(s)$ et regardons l'évolution de son état fondamental. (Ainsi on force un oscillateur qui est initialement au repos)

état fond : $\phi_0(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \exp - \left(\frac{m\omega}{2\hbar} q^2 \right)$

remarquons que c'est un état cohérent particulier :

$$\phi_0(q) = \langle q | 00 \rangle \quad (p_0 = q_0 = 0)$$

On peut montrer la propriété fondamentale suivante :

$$\langle q | U_t | \phi_0 \rangle = \langle q | P_t q_t \rangle$$

où (p_t, q_t) est la trajectoire classique de l'oscillateur
forcé :

Cette trajectoire est donnée par

$$q(s) = A \sin \omega s + B \cos \omega s + \frac{1}{m\omega} \int_0^s du F(u) \sin \omega(s-u)$$

avec $q(0) = 0$ et $\dot{q}(0) = 0$.

$$\Rightarrow B = 0 \quad \text{et} \quad \dot{q}(s) = A\omega \cos \omega s - B\omega \sin \omega s + \frac{\omega}{m\omega} \int_0^s du F(u) \cos \omega(s-u)$$

$$0 = A\omega \Rightarrow A = 0$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} q_t = \frac{1}{m\omega} \int_0^t du F(u) \sin \omega(t-u) \\ p_t = \int_0^t du F(u) \cos \omega(t-u) \end{array} \right.$$

Ainsi si l'on force un oscillateur initialement au repos on génère un état cohérent centré sur la trajectoire classique ci-dessus.

Note: le rayonnement émis par une antenne classique, forcée par un courant classique, peut être décrit comme l'état cohérent ci-dessus si $F(s)$ est relié au courant classique $j(t)$ qui passe à travers l'antenne.

exercice 4.

(i) Si on paramétrise la trajectoire de la particule par le temps $0 \leq s \leq t$ on a :

$$q(s) = \left(1 - \frac{s}{t}\right) q' + \frac{s}{t} q \quad ; \quad q(0) = q' \\ q(t) = q$$

L'action est donc :

$$S[q] = \int_0^t ds \frac{m}{2} \dot{q}(s)^2 = \int_0^t ds \frac{m}{2} \left(\frac{q - q'}{t}\right)^2 = \frac{m}{2} \frac{(q - q')^2}{t}$$

(ii) Posons $H_0 = \frac{\hbar^2 \Delta}{2m}$, $V = V(q)$.

On a que le commutateur

$$[\mathcal{E} H_0, \mathcal{E} V] = \mathcal{E}^2 [H_0, V] = \mathcal{O}(\mathcal{E}^2)$$

est négligeable p. rapport à $H_0 + V$. Ainsi :

$$U_{\mathcal{E}} = \exp\left(-\frac{i\mathcal{E}}{\hbar} (H_0 + V)\right) \approx \exp\left(\frac{i\mathcal{E}}{\hbar} H_0\right) \exp\left(-\frac{i\mathcal{E}}{\hbar} V\right)$$

Remarque: cette formule est valable pour $\mathcal{E} \rightarrow 0$.

Ainsi

$$\begin{aligned} \langle q | U_\varepsilon | q' \rangle &\approx \langle q | e^{-\frac{i\varepsilon H_0}{\hbar}} e^{-\frac{i\varepsilon V}{\hbar}} | q' \rangle \\ &= \langle q | e^{-\frac{i\varepsilon H_0}{\hbar}} | q' \rangle e^{-\frac{i\varepsilon V(q')}{\hbar}} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{d/2} \exp \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(q-q')^2}{\varepsilon} \exp -\frac{i\varepsilon V(q')}{\hbar} \end{aligned}$$

i) On remarque que $U_t = \left(\exp -\frac{i\varepsilon H}{\hbar} \right)^N = (U_\varepsilon)^N$, donc en utilisant $(N-1)$ relations de fermeture :

$$\begin{aligned} \langle q | U_t | q' \rangle &= \langle q | (U_\varepsilon)^N | q' \rangle = \langle q | U_\varepsilon \cdot U_\varepsilon \cdots U_\varepsilon | q' \rangle \\ &= \int dq_{N-1} \cdots dq_1 \langle q | U_\varepsilon | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | U_\varepsilon | q_{N-2} \rangle \cdots \\ &\quad \cdots \langle q_2 | U_\varepsilon | q_1 \rangle \langle q_1 | U_\varepsilon | q' \rangle \end{aligned}$$

et on obtient le résultat en remplaçant par la formule (i).

ii), v) se convaincre.

exercice 6.

$$\langle q | U_{t=-i\beta\hbar} | q \rangle = \int_{q(0)=q}^{q(-i\beta\hbar)=q} \mathcal{D}q \ e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^{-i\beta\hbar} ds \left(\frac{m}{2} \dot{q}(s)^2 - V(q(s)) \right)}$$

on pose dans l'Action $s = -iu$ Donc pour

$$\begin{aligned} s = -i\beta\hbar \quad \text{ou} \quad u = \beta\hbar \\ \Rightarrow \int_0^{-i\beta\hbar} ds = \int_0^{\beta\hbar} (-idu) \end{aligned}$$

De plus $\dot{q}(s)^2 = \left(\frac{dq}{ds} \right)^2 = \left(\frac{dq}{-idu} \right)^2 = - \left(\frac{dq}{du} \right)^2$, donc

$$\begin{aligned} \langle q | U_{t=-i\beta\hbar} | q \rangle &= \int_{q(0)=q}^{q(-i\beta\hbar)=q} \mathcal{D}q \ \exp \frac{i}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} (-idu) \left(-\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{du} \right)^2 - V(q(-iu)) \right) \\ &= \int_{q(0)=q}^{q(-i\beta\hbar)=q} \mathcal{D}q \ \exp -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} du \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{du} \right)^2 + V(q(-iu)) \right) \end{aligned}$$

Finalement on pose $q(-iu) = x(u)$ ni bien que :

$$q(0) = x(0) \quad \text{et} \quad q(-i\beta\hbar) = x(\beta\hbar)$$

$$\langle q | U_{t=-i\beta\hbar} | q \rangle = \int_{x(0)=q}^{x(\beta\hbar)=q} \mathcal{D}x \exp - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} du \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{du} \right)^2 + V(x(u)) \right)$$

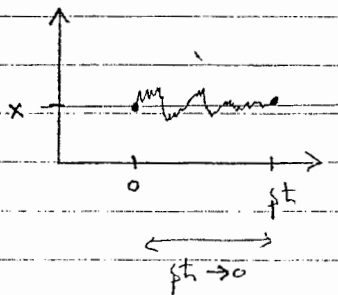
$$= \langle q | e^{-\beta H} | q \rangle$$

ette dernière formule est l'intégrale fonctionnelle utilisée en mécanique statistique quantique. Ici ce n'est plus le laprasien mais l'énergie qui intervient !

Limite Classique : $\hbar \rightarrow 0$.

Pour $\hbar \rightarrow 0$ on intègre sur un très petit intervalle $[0, \beta\hbar]$.
 Donc $x(u)$ reste approximativement toujours égal à q
 $q = x(0) \approx x(\beta\hbar) = q \Rightarrow x(u) \approx q$.

Mais attention $x(u)$ peut prendre toutes sorte de valeurs :



Donc

$$\langle q | e^{-\beta H} | q \rangle \underset{\hbar \rightarrow 0}{\approx} \int_{x(0)=q}^{x(\beta\hbar)=q} \mathcal{D}q \ e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left(\frac{m}{2} \dot{x}(u)^2 + V(q) \right) du}$$

$$= e^{-\beta V(q)} \underbrace{\int_{x(0)=q}^{x(\beta\hbar)=q} \mathcal{D}q \ e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \frac{m}{2} \dot{x}(u)^2 du}}_{\langle q | e^{-\beta \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 \right)} | q \rangle}$$

$$\text{On } \langle q | e^{-\beta \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 \right)} | q' \rangle = \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{d/2} \exp \left(-\frac{m}{2\beta\hbar^2} (q - q')^2 \right)$$

ce qui peut se voir à partir de l'expression en temps réel si on pose $t = i\beta\hbar$ (voir formule dans exercice 13)

$$\text{Donc } \langle q | e^{-\beta H} | q \rangle \underset{\hbar \rightarrow 0}{\approx} \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{d/2} e^{-\beta V(q)}$$

$$\Rightarrow \text{Tr } e^{-\beta H} = \int dq \langle q | e^{-\beta H} | q \rangle \underset{\hbar \rightarrow 0}{\approx} \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{d/2} \int dq e^{-\beta V(q)}$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^d \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{d/2} \int dq e^{-\beta V(q)}$$

Il reste à remarquer que :

$$\int dp e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} = \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{d/2}$$

pour obtenir la limite classique de la fonction de partition :

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^d \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = \int dx dp e^{-\beta \left(\frac{p^2}{2m} + V(q) \right)}$$

Exercice 3.

Suivre la méthode du cours.

Exercice 5.

Oups ! C'est l'exercice 3 de la série 6 ! ☺

Théorie de la diffusion par un potentiel : Série 1.

exercice 1 : Soit $\psi_{\text{inc}}(\underline{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\underline{r}}$, $\mathbf{k} \parallel \hat{z}$ une onde plane incidente. Etablir que le courant associé vaut $\underline{J}_{\text{inc}} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m}$.

Soit $\psi_{\text{scat}}(\underline{r}) = f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$ une onde sphérique sortante (à l'infini). Etablir que les composantes du courant $\underline{J}_{\text{scat}}$ en coordonnées sphériques satisfait $J_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f_k(\theta, \varphi)|^2}{r^2}$, $J_\theta = O(\frac{1}{r^3})$, $J_\varphi = O(\frac{1}{r^3})$.

En déduire $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta, \varphi)|^2$ pour la section efficace différentielle.

exercice 2 : Soit $V(\underline{r}) = V(|\underline{r}|)$ à symétrie sphérique et $\mathbf{k} \parallel \hat{z}$. Etablir l'équation radiale de la diffusion pour l'onde partielle de moment cinétique l : $\frac{d^2 u_l(r)}{dr^2} + [k^2 - V(r)] u_l(r) = 0$.

exercice 3 : La solution de l'équation radiale possède le comportement asymptotique $y_l(r) \sim a_l \sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)$ où

δ_l = déphasage produit par le potentiel. Calculer δ_l pour le cas d'une "sphère dure" : $V(r) = +\infty$, $|r| < a$ et $V(r) = 0$, $|r| \geq a$.

Indication : Si $V(r) = 0$ l'équ. radiale possède les solus fondamentaux $y_l^{(1)} = kr j_l(kr)$, $y_l^{(2)} = kr n_l(kr)$ avec les comportements asymptotiques :

$$y_l^{(1)} \sim \sin\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right), \quad \rho \rightarrow +\infty \quad (\text{jet Bessel sphérique})$$

$$y_l^{(2)} \sim \cos\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right), \quad \rho \rightarrow +\infty \quad (\text{jet Bessel irrégulière au jet de Neumann}).$$

exercice 4 : sphère dure - suite

a) Donner la section efficace différentielle et la section efficace totale.

b) Calculer en particulier $\sigma_{\ell=0}$. ($j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}$ et $n_0(\rho) = \frac{\cos \rho}{\rho}$),

c) Comportement à basse énergie : étudier $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ pour $k \rightarrow 0$ et montrer qu'elle devient isotrope.

Montrer que $\sigma_{\text{tot}} \rightarrow 4\pi a^2$ pour $k \rightarrow 0$.

d) Comportement à haute énergie : étudier σ_{ℓ} pour $k \rightarrow +\infty$.
En déduire que $\sigma_{\text{tot}} \rightarrow 2\pi a^2$ pour $k \rightarrow +\infty$. Commenter.

Comportements asymptotiques des fonctions de Bessel :

pour $\rho \rightarrow +\infty$: $j_{\ell}(\rho) \sim \frac{1}{\rho} \sin(\rho - \frac{\ell\pi}{2})$ et $n_{\ell}(\rho) \sim \frac{1}{\rho} \cos(\rho - \frac{\ell\pi}{2})$

pour $\rho \rightarrow 0$: $j_{\ell}(\rho) \sim \frac{\rho^{\ell}}{(2\ell+1)!!}$; $n_{\ell}(\rho) \sim \frac{(2\ell+1)!!}{(2\ell+1)} \frac{1}{\rho^{\ell+1}}$.

pour le point d) utiliser : $g_{\ell}(\rho) = \frac{j_{\ell}(\rho)^2}{j_{\ell}(\rho)^2 + n_{\ell}(\rho)^2}$;

$\rho \rightarrow 0$: $g_{\ell}(\rho) \sim \rho^{4\ell+2} [(2\ell+1)!! (2\ell-1)!!]^{-2}$

$0 < \rho < \ell$: $g_{\ell}(\rho)$ croît régulièrement

$\rho > \ell$: $g_{\ell}(\rho) \sim \sin^2(\rho - \frac{\ell\pi}{2})$

Corrigé de la Série 1 — Diffusion par une sphère ⁽¹⁾
 dure : méthode des déphasages

a) Pour $|r| > a$ la particule est libre et l'équation radiale s'écrit

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{2m}{\hbar^2} E \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} y_l(r) = 0$$

On cherche une solution t.g

$$y_l(a) = 0 \quad \text{et} \quad y_l(r) \underset{r \rightarrow +\infty}{\sim} a_l \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right)$$

Les solutions de l'équation radiale sont des combinaisons linéaires de fonctions de Bessel :

$$y_l(r) = A_l k r j_l(kr) + B_l k r m_l(kr) \quad (\text{soln générale})$$

et puisque

$$k r j_l(kr) \underset{r \rightarrow +\infty}{\sim} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)$$

$$k r m_l(kr) \underset{r \rightarrow +\infty}{\sim} \cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)$$

on trouve que $A_l = a_l \cos \delta_l$ et $B_l = a_l \sin \delta_l$

Mais puisque $y_l(a) = 0$ on a :

$$0 = \cos \delta_l k r j_l(ka) + \sin \delta_l m_l(ka) k r$$

et donc pour $l=0$ déphasage on trouve

$$\tan \delta_0 = - \frac{j_0(ka)}{m_0(ka)}$$

b) Pour calculer la section efficace totale il faut tout d'abord calculer $(\sin \delta_l)^2$.

puisque $\sin^2 \delta_l = \tan^2 \delta_l \cos^2 \delta_l = \tan^2 \delta_l (1 - \sin^2 \delta_l)$

on a $\sin^2 \delta_l = \frac{\tan^2 \delta_l}{1 + \tan^2 \delta_l}$

$$\Rightarrow \sin^2 \delta_l = \frac{j_l(ka)^2}{j_l(ka)^2 + m_l(ka)^2}$$

$$\Rightarrow \sigma_{\text{tot}} = \sum_{l=0}^{+\infty} \sigma_l \quad \text{avec}$$

$$\sigma_l = \frac{4\pi (2l+1)}{k^2} \cdot \frac{j_l(ka)^2}{j_l(ka)^2 + m_l(ka)^2}$$

En particulier pour $l=0$ on trouve

$$\sigma_{l=0} = 4\pi r_0^2 \left(\frac{\sin ka}{ka} \right)^2$$

(pour cela utiliser les expressions des fonctions de Bessel avec $l=0$)

c) Comportement à basse énergie - $k \rightarrow 0$

3

Montrons d'abord que la section efficace différentielle devient isotrope :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sum_{l, l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta).$$

Étudions $\sin \delta_l$ pour $k \rightarrow 0$. En utilisant le comportement asymptotique de $j_l(ka)$ et $n_l(ka)$ pour $k \rightarrow 0$ on trouve :

$$\begin{aligned} \sin^2 \delta_l &\sim \frac{(ka)^{2l} / [(2l+1)!!]^2}{(ka)^{2l} / [(2l+1)!!]^2 + \left[\frac{(2l+1)!!}{2l+1} \right]^2 \frac{1}{(ka)^{2l+2}}} \\ &\sim (ka)^{4l+2} \frac{(2l+1)^2}{[(2l+1)!!]^4} \end{aligned}$$

Note : $(2l+1)!! =$ produit des nombres impairs $\leq 2l+1$
 $= 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7 \dots (2l-3)(2l-1)(2l+1)$.

$$\Rightarrow \boxed{\sin \delta_l \underset{k \rightarrow 0}{\sim} (ka)^{2l+1} \frac{(2l+1)}{(2l+1)!!}}$$

Ceci montre que dans la somme sur l et l' :

$$\frac{1}{k^2} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} \underset{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{k^2} (ka)^{4l+2} \frac{(2l+1)(2l'+1)}{(2l+1)!!(2l'+1)!!}$$

Pour l ou $l' \geq 1$ cette dernière expression tend vers zéro si $k \rightarrow 0$.

Ainsi il subsiste uniquement le terme $l=l'=0$ dans la somme :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \underset{k \rightarrow 0}{\rightarrow} a^2 P_0(\cos \theta)^2 = a^2 \quad (\text{car } P_0(\cos \theta) = 1 \dots)$$

\uparrow
 $l=0$

Cette expression est bien isotrope.

Pour σ_l on trouve évidemment $\sigma_l \rightarrow 0$ $l \geq 1$
 et $\sigma_{l=0} \rightarrow 4\pi a^2$.

Ainsi : $\underline{\underline{\lim_{k \rightarrow 0} \sigma_{\text{tot}} = 4\pi a^2}}$

La section efficace ^{totale} de diffusion par une sphère dure est, dans la limite des basses énergies égale à la surface de la sphère (de rayon a).

d) Compacité à haute énergie - (calcul asymptotique)

$$\sigma_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \cdot \frac{j_l(ka)^2}{j_l(ka)^2 + n_l(ka)^2} = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \cdot g_l(ka).$$

pour $0 < ka < l$ on a :

$$g_l(ka) \sim \frac{(ka)^{4l+2}}{((2l+1)!!(2l-1)!!)^2}$$

et

$$\sum_{l > ka} g_l(ka) \sim \sum_{l > ka} \frac{(ka)^{4l+2}}{((2l+1)!!(2l-1)!!)^2}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{k^2} \sum_{l > ka} g_l(ka) \rightarrow 0 \text{ pour } k \rightarrow +\infty.$$

$$\Rightarrow \sum_{l > ka} \sigma_l \rightarrow 0 \text{ pour } k \rightarrow +\infty.$$

5)

Il reste donc

$$\sum_{0 \leq l \leq ka} \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) g_l(ka).$$

pour $0 \leq l \leq ka$: $g_l(ka) \sim \sin^2(ka - l\frac{\pi}{2})$.

$$\Rightarrow \sum_{0 \leq l \leq ka} \sigma_l \sim \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) \sin^2(ka - l\frac{\pi}{2}).$$

$k \rightarrow +\infty$.

On peut remplacer $\sin^2(ka - l\frac{\pi}{2})$ par sa moyenne qui est $\frac{1}{2}$ si $k \rightarrow +\infty$.

$$\Rightarrow \sum_{0 \leq l \leq ka} \sigma_l \sim \frac{4\pi}{k^2} \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka} (l + \frac{1}{2})$$

$$\sim \frac{4\pi}{k^2} \frac{(ka)^2}{2}$$

$$= 2\pi a^2$$

Ainsi $\lim_{k \rightarrow +\infty} \sigma_{tot} = 2\pi a^2$

Pour un traitement plus détaillé voir Morse et Feshbach, "Méthodes Mathématiques en Physique". Le résultat ci-dessus est exact.

6.

Remarque :

Si la particule incidente était classique la section efficace serait égale à πa^2 qui est la surface de la projection de la sphère de rayon a sur un plan perpendiculaire au faisceau.

$$\text{Quantiquement on trouve } 2\pi a^2 = \pi a^2 + \pi a^2$$

\uparrow
 contribution
 classique

\uparrow
 contribution due aux
 effets de diffraction des
ondes.
 (effet purement quantique).

Série 2 : Th de la Diffusion.

exercice 2 : Application des relations intégrales pour les déphasages.

Supposons que l'on perturbe le potentiel $V(r)$ (central).

$$V(r) \rightarrow \hat{V}(r) = V(r) + u_1(r) \quad \text{si} \quad u_1(r) \ll V(r).$$

Soit δ_φ le déphasage de l'onde partielle associée à $V(r)$ et $\hat{\delta}_\varphi$ celui associée à $\hat{V}(r)$. Montrez que

- si $u_1(r) > 0 \quad \forall r$ alors $\hat{\delta}_\varphi < \delta_\varphi$.
- si $u_1(r) < 0 \quad \forall r$ alors $\hat{\delta}_\varphi > \delta_\varphi$.

exercice 3 : Une identité utile.

Vérifiez l'identité
$$-(\Delta + k^2) \frac{e^{\pm i k \cdot |r-r'|}}{|r-r'|} = 4\pi \delta(r-r').$$

exercice 4 : Fonction de Green de la particule libre comme opérateur

Soit $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$. Son spectre est $[0, +\infty[$.

L'opérateur résolvant est p. défini.

$$G_{E \pm i\epsilon} = (H_0 - (E \pm i\epsilon))^{-1}, \quad \epsilon > 0$$

et est bien défini pour tout E si $\epsilon > 0$. ($\epsilon \neq 0$).

Remarque: • si $E < 0$ $(H_0 - E)^{-1}$ existe car E n'est pas dans le spectre. Donc le résolvant est aussi défini pour $\epsilon \neq 0$.

• si $E > 0$ $H_0 - E$ n'est pas inversible car E est dans le spectre. Par contre $H_0 - (E \pm i\epsilon)$ est inversible.

a) Montrez les identités suivantes :

$$\langle r | G_{E \pm i\epsilon} | r' \rangle = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm i \sqrt{\frac{2m(E \pm i\epsilon)}{\hbar^2}} |r-r'|}}{|r-r'|}$$

pour $E > 0$

et

$$\langle r | G_{E \pm i\epsilon} | r' \rangle = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{-\frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{|E| \pm i\epsilon} |r-r'|}}{|r-r'|}$$

pour $E < 0$.

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle r | G_{E \pm i\epsilon} | r' \rangle = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} |r-r'|}}{|r-r'|}, \quad E > 0$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle r | G_{E \pm i\epsilon} | r' \rangle = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E|} |r-r'|}}{|r-r'|}, \quad E < 0$$

b) Calculer la densité d'état de la particule libre à partir des formules ci-dessus + la définition de la DOS est:

$$\rho(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(-\frac{i}{\pi} \right) \text{Im} \left(\pm i G_{E+i\epsilon} \right)$$

Remarque que la densité d'état est non nulle seulement pour $E > 0$.

Corrigé : Série 2.

exercice 2 :

Dans le chap 3 du cours nous avons prouvé la relation suivante

$$\sin(\delta_\ell - \hat{\delta}_\ell) = \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^{+\infty} dr \hat{y}_\ell(r) (\hat{V}(r) - V(r)) y_\ell(r)$$

où δ_ℓ et $\hat{\delta}_\ell$ sont les déphasages associés aux potentiels centraux $V(r)$ et $\hat{V}(r)$. De plus \hat{y}_ℓ et y_ℓ sont les solutions correspondantes des deux équations radiales.

Si $\hat{V}(r) - V(r) = u_1(r)$ on a :

$$\sin(\delta_\ell - \hat{\delta}_\ell) = \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^{+\infty} dr \hat{y}_\ell(r) y_\ell(r) u_1(r)$$

Si on suppose que $u_1(r)$ est petit ($u_1(r) \ll V(r)$) alors on aura en première approximation :

$$\hat{y}_\ell(r) \approx y_\ell(r)$$

$$\Rightarrow \sin(\delta_\ell - \hat{\delta}_\ell) \approx \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^{+\infty} dr y_\ell(r)^2 u_1(r)$$

Cette approximation est analogue à l'app de Born pour les déphasages.

Puisque u_1 est petit ~~est de~~ p. rapport à $\hat{V}(r)$ on aura aussi que

$$\hat{\delta}_\ell \approx \delta_\ell$$

c.a.d que $\sin(\delta_\ell - \hat{\delta}_\ell) \approx \delta_\ell - \hat{\delta}_\ell$

$$\Rightarrow \hat{\delta}_\ell = \delta_\ell - \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^{+\infty} dr y_\ell(r)^2 u_1(r)}_{\text{si } u_1(r) > 0 \forall r \text{ l'int est positif}}$$

si $u_1(r) > 0 \forall r$ l'int est positif

si $u_1(r) < 0 \forall r$ l'int est négative.

c.a.d :

$$\text{si } u_1(r) > 0 \forall r \text{ alors } \hat{\delta}_\ell < \delta_\ell$$

$$\text{si } u_1(r) < 0 \forall r \text{ alors } \hat{\delta}_\ell > \delta_\ell.$$

exercice 3: simple calcul. basé sur les, identities

$$\Delta(fg) = (\Delta f)g + 2\nabla f \cdot \nabla g + f(\Delta g)$$

$$\Delta\left(\frac{1}{|r|}\right) = -4\pi\delta^3(r)$$

exercice 4:

Puisque $H_0 = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m}$ est diagonal dans l'espace \underline{k} et que le spectre est donné par $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, il est judicieux de se baser sur la relation:

$$\langle \underline{k} | G_{E+i\epsilon} | \underline{k}' \rangle = \frac{\delta_{\underline{k}, \underline{k}'}}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - (E+i\epsilon)}$$

Ainsi

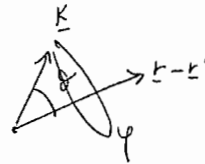
$$\langle r | G_{E+i\epsilon} | r' \rangle = \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} \langle r | \underline{k} \rangle \langle \underline{k} | G_{E+i\epsilon} | \underline{k}' \rangle \langle \underline{k}' | r' \rangle$$

(ici \underline{k} et \underline{k}' sont les modes d'une boîte de taille $L_x \times L_y \times L_z$).

$$\langle r | \underline{k} \rangle = \frac{e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}}{L^{3/2}} \quad ; \quad \langle \underline{k}' | r' \rangle = \frac{e^{-i\underline{k}' \cdot \underline{r}'}}{L^{3/2}}$$

$$\Rightarrow \langle r | G_{E+i\epsilon} | r' \rangle = \frac{1}{L^3} \sum_{\underline{k}} \frac{e^{i\underline{k} \cdot (\underline{r} - \underline{r}')}}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - (E+i\epsilon)}$$

$$\xrightarrow{L \rightarrow +\infty} \int \frac{d^3 \underline{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\underline{k} \cdot (\underline{r} - \underline{r}')}}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - (E+i\epsilon)}$$



$$\int d^3 \underline{k} F(k) = \int_0^{+\infty} dk k^2 \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$\Rightarrow \langle r | G_{E+i\epsilon} | r' \rangle = \frac{2\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{+\infty} dk \frac{k^2}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - (E+i\epsilon)} \underbrace{\int_{-1}^{+1} d\cos\theta e^{i k |\underline{r} - \underline{r}'| \cos\theta}}_{\frac{1}{i k |\underline{r} - \underline{r}'|} \{ \exp(i k |\underline{r} - \underline{r}'|) - \exp(-i k |\underline{r} - \underline{r}'|) \}}$$

en changeant $k \rightarrow -k$ dans l'intégrale avec $\exp(-i k |\underline{r} - \underline{r}'|)$ on a:

$$\langle r | G_{E+i\epsilon} | r' \rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{k}{i |\underline{r} - \underline{r}'|} \frac{e^{i k |\underline{r} - \underline{r}'|}}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - (E+i\epsilon)}$$

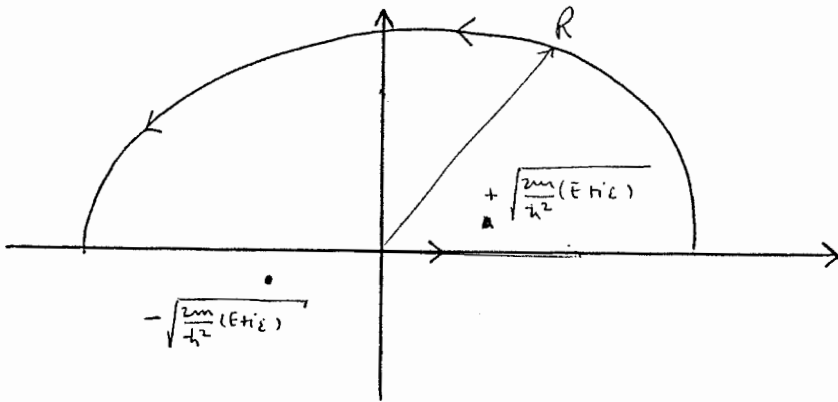
$$\Rightarrow \langle r | G_{E+i\epsilon} | r' \rangle = -\frac{i}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{k}{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (E+i\epsilon)} \frac{e^{i k |\underline{r} - \underline{r}'|}}{|\underline{r} - \underline{r}'|}$$

Il reste à calculer

$$I = \int_{-i\infty}^{+i\infty} dk \frac{k}{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}(E+i\epsilon)} e^{i k |r-r'|}$$

pôles : zéros de $k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}(E+i\epsilon) = \left(k - \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+i\epsilon)}\right) \left(k + \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+i\epsilon)}\right)$

soit $E > 0$: comme ϵ est petit on est ds la situation suivante!



On ferme le contour par en haut car alors on le demi cercle

$$k = R e^{i\vartheta} + i R \sin \vartheta \Rightarrow \text{Im} k = R \sin \vartheta > 0$$

puisque $0 < \vartheta < \pi$

$$\Rightarrow |e^{i k |r-r'|}| = e^{-R \sin \vartheta |r-r'|}$$

$\rightarrow 0$ si $R \rightarrow +\infty$.

Ainsi on pige le pôle $+\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+i\epsilon)}$.

$$\Rightarrow I = 2\pi i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+i\epsilon)} \frac{1}{2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+i\epsilon)}} e^{i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+i\epsilon)}|r-r'|}$$

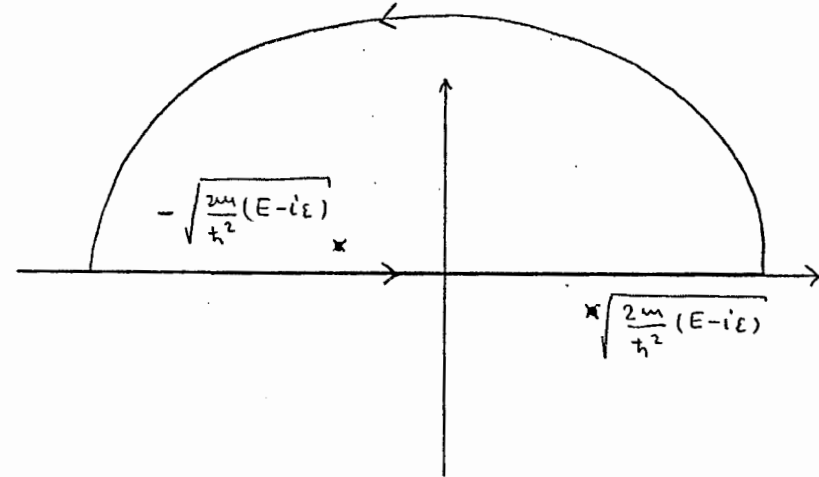
$$\Rightarrow I = \pi i \exp\left\{i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+i\epsilon)}|r-r'|\right\}$$

si bien que

$$\langle r | G_{E+i\epsilon} | r' \rangle = \frac{m}{2\pi \hbar^2} \frac{e^{i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+i\epsilon)}|r-r'|}}{|r-r'|}$$

Pour le noyau de $G_{E-i\epsilon}$ le calcul est identique avec les pôles dans par

$$k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}(E-i\epsilon) = \left(k - \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-i\epsilon)}\right) \left(k + \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-i\epsilon)}\right)$$

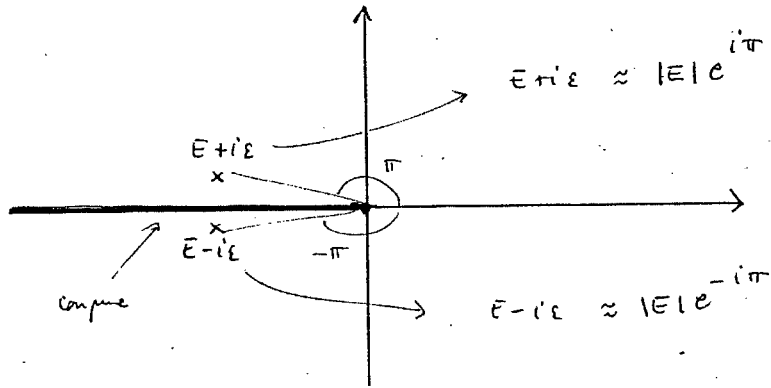


Cette fois c'est l'autre pôle qui contribue ce qui donne :

$$\langle r | G_{E-i\epsilon} | r' \rangle = \frac{m}{2\pi \hbar^2} \frac{e^{-i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-i\epsilon)}|r-r'|}}{|r-r'|}$$

Soit maintenant $E < 0$:

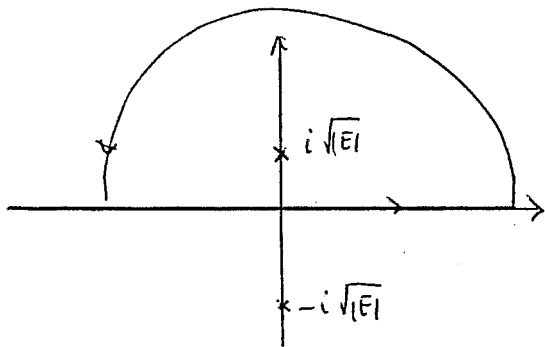
La racine carrée est définie avec une coupure sur l'axe réel négatif :



$$\Rightarrow \sqrt{E+i\epsilon} \underset{\epsilon \rightarrow 0}{\approx} \sqrt{|E|} e^{i\frac{\pi}{2}} = i\sqrt{|E|}$$

$$\sqrt{E-i\epsilon} \underset{\epsilon \rightarrow 0}{\approx} \sqrt{|E|} e^{-i\frac{\pi}{2}} = -i\sqrt{|E|}$$

Ainsi les pôles de $\frac{1}{k^2 - (E+i\epsilon)}$ sont situés en (pour $\epsilon \rightarrow 0$)



En effectuant l'équivalent de Cauchy sur le contour supérieur on trouve alors

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle r | G_{E \pm i\epsilon} | r' \rangle = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{-\frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{|E|} |r-r'|}}{|r-r'|}$$

b) Calcul de la densité d'états.

on remarque que

$$\text{Im} \langle r | G_{E+i\epsilon} | r' \rangle = \frac{1}{2i} (\langle r | G_{E+i\epsilon} | r' \rangle - \langle r | G_{E-i\epsilon} | r' \rangle)$$

$$\text{et donc pour } E < 0 : \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Im} \langle r | G_{E+i\epsilon} | r' \rangle = 0 \quad \forall r, r'$$

$$\Rightarrow \underline{\rho(E) = 0 \text{ pour } E < 0.}$$

Ce résultat est évident (en fait) puisque le spectre de H_0 est positif (l'énergie cinétique non relativiste de la particule libre est positive), et donc il n'y a pas d'états d'énergie négative.

Pour $E > 0$: (Prenez $r \neq r'$ d'abord)

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle r | G_{E+i\epsilon} | r' \rangle &= \frac{m}{4\pi\hbar^2} \frac{1}{i|r-r'|} \left\{ e^{i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+i\epsilon)}|r-r'|} - e^{-i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-i\epsilon)}|r-r'|} \right\} \\ &= \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\sin\left\{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+i\epsilon)}|r-r'|\right\}}{|r-r'|} \end{aligned}$$

pour $r = r'$ on prend la limite $\epsilon \rightarrow r$)

$$\rightarrow \text{Im} \langle r | G_{E+i\epsilon} | r \rangle = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \sqrt{\frac{2m(E+i\epsilon)}{\hbar^2}}$$

$$\rightarrow \rho(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \text{Im} \langle r | G_{E+i\epsilon} | r \rangle = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

$$\underline{\underline{\rho(E) = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \sqrt{E}; \quad E > 0.}}$$

Série 3 Th de la diffusion par un potentiel.

exercice 5: Diffusion d'électrons rapides par un atome.

Les collisions élastiques d'électrons rapides sur un atome peuvent être traitées par l'approximation de Born car celle-ci est bonne à haute énergie. Soit $\rho(r)$ la distribution de charge de l'atome constituée de la charge ponctuelle du noyau $Ze\delta(r)$ et de celle du nuage électronique $n(r)$. C'est à dire $\rho(r) = n(r) + Ze\delta(r)$

a) Calculer la section efficace différentielle dans l'approximation de Born.

b) Montrer qu'aux petits angles $\theta \rightarrow 0$ on a

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \rightarrow \left| \frac{me^2}{3\hbar^2} \int d^3r r^2 n(r) \right|^2$$

c) Diffusion aux "grands angles" ; θ fixe $\neq 0$ et

$$q = 2K \sin \frac{\theta}{2} \rightarrow +\infty,$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \left(\frac{Ze^2}{2m\nu^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} ; \quad \nu = \frac{\hbar K}{m}$$
$$= \left(\frac{Ze^2}{2m} \frac{m^2}{\hbar^2 k^2} \right)^2 = \left(\frac{Ze^2 m}{2\hbar^2 k^2} \right)^2 \dots$$

d) La formule exacte de Rutherford pour la diffusion d'un électron par une charge nue Ze du noyau est exactement

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Ze^2}{2m\nu^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad \text{pour tous les angles } \theta. \text{ Commenter.}$$

Corrigé de la Série 3 :
Th. de la diffusion par un potentiel

(1)

x.5

Diffusion d'électrons rapides par un atome.

Les collisions élastiques d'électrons rapides sur des atomes peuvent être traitées par l'approximation de Born, puisque celle-ci est bonne à haute énergie. Étant donné que la masse de l'atome est très grande p. rapport à celle de l'électron, ce dernier peut être considéré comme étant statique. Nous sommes donc dans la situation de la diffusion par un potentiel.

Quel est le potentiel ressenti par la particule incidente?

Soit $\rho(r)$ la distribution de charge associée à l'atome. Celle-ci produit un potentiel électrostatique donné par l'équation de Poisson

$$\Delta V(r) = -4\pi \rho(r)$$

$$\Rightarrow -q^2 \hat{V}(q) = -4\pi \hat{\rho}(q)$$

$$\hat{V}(q) = \frac{4\pi}{q^2} \hat{\rho}(q)$$

Ainsi, dans l'approximation de Born:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{(4\pi)^2}{q^4} |\hat{\rho}(q)|^2 = \frac{4m^2}{\hbar^4} \frac{1}{q^4} |\hat{\rho}(q)|^2$$

(2)

$$\text{où } q = 2k \sin \frac{\theta}{2} = \frac{2m v}{\hbar} \sin \frac{\theta}{2} \quad (v = \text{vitesse incidente, } m = \text{masse de l'électron})$$

#

Si $n(r)$ est la distribution de charge électronique dans l'état stationnaire de l'atome:

$$\rho(r) = -en(r) + Ze\delta(r)$$

↑
(distribution de charge du noyau.)

(notons que $\int d^3r n(r) = Z$ si l'atome est neutre.)

$$\Rightarrow \hat{\rho}(q) = -e\hat{n}(q) + Ze = e(Z - \hat{n}(q))$$

$\hat{n}(q)$ s'appelle parfois le facteur de forme de l'atome.

$$\Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m^2 e^2}{\hbar^4} \frac{|Z - \hat{n}(q)|^2}{q^4}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m^2 e^2}{\hbar^4} \frac{|Z - \hat{n}(\frac{2m v}{\hbar} \sin \frac{\theta}{2})|^2}{16 \frac{m^4 v^4}{\hbar^4} (\sin \frac{\theta}{2})^4}$$

Discussion de la formule.

(3)

Diffusion aux petits angles. ($qa_0 \ll 1$; $a_0 \approx$ taille de l'atome).

$$\begin{aligned} q \rightarrow 0 : \quad \hat{m}(q) &= \int d\mathbf{r} m(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \\ &= \int d\mathbf{r} m(\mathbf{r}) + i\mathbf{q} \int d\mathbf{r} \mathbf{r} m(\mathbf{r}) \\ &\rightarrow \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} (q \cdot \mathbf{r})^2 m(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Dans un état stationnaire on peut montrer que l'atome n'a pas de moment dipolaire (voir Landau et Lifshitz §75).

$$\Rightarrow \int d\mathbf{r} \mathbf{r} m(\mathbf{r}) = 0.$$

De plus par la neutralité $\int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) = Z$.

Supposons $n(\mathbf{r}) = n(r)$.

$$\begin{aligned} Z - \hat{m}(q) &\underset{q \rightarrow 0}{\sim} + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} (q \cdot \mathbf{r})^2 n(r) \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} (q_x^2 x^2 + q_y^2 y^2 + q_z^2 z^2) n(r) \\ &= \frac{1}{6} q^2 \int dr r^2 n(r) \end{aligned}$$

$$|Z - \hat{m}(q)|^2 = \frac{1}{36} q^4 \left(\int dr r^2 n(r) \right)^2.$$

$$\Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \frac{m e^2}{3\hbar^2} \int dr r^2 n(r) \right|^2 \quad \text{qui ne diverge pas en } \mathcal{D} = 0.$$

Diffusion aux ind angles; q grand ($qa_0 \gg 1$; $a_0 \approx$ taille de l'atome)

dans ce cas $\int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} n(\mathbf{r})$ peut être négligé p. rapport à Z car $e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$ oscille rapidement dans l'intégrale. Alors :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z e^2}{2m v^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}},$$

ce qui est exactement la formule de Rutherford de la diffusion par le noyau de l'atome.

Série 4.

exercice 7 : Diffusion d'un électron rapide par un atome d'hydrogène.

Considérez un électron rapide de vitesse v entrant en collision avec un atome d'hydrogène supposé au repos. On suppose que le recul de l'atome est négligeable pendant la collision et que l'atome reste dans son état fondamental au cours de la collision : $\psi_0(r) = \frac{e^{-r}}{\sqrt{\pi}}$

- Calculez, grâce à l'approximation de Born, la section efficace différentielle. la réponse est :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4(8+q^2)^2}{(4+q^2)^4} \quad \text{ou} \quad q = 2v \sin \frac{\theta}{2}.$$

- Montrez que $\sigma_{\text{tot}} \approx \frac{7\pi}{3v^2}$ si v est grand.

- Analysez la formule de la section efficace différentielle aux petits et grands angles de diffusion.

exercice 8 : Formule de Mott pour la diffusion de deux électrons

- 1) Dérivez la section efficace différentielle pour la diffusion de deux électrons, (formule de Mott) dans le référentiel du centre de masse.
- 2) Supposons que nous sommes dans le référentiel du laboratoire et que initialement un des électrons est au repos.
Ecrivez la section efficace différentielle dans le référentiel du laboratoire.

CORRIGÉ DE LA SÉRIE 4

EXERCICE 1

• la densité de charges :

$$\rho(r) = -en(r) + e\delta(r)$$

$$n(r) = |\psi_0(r)|^2 = \frac{1}{4}e^{-2r}$$

→ le potentiel

$$\Delta V(r) = -4\pi\rho(r)$$

$$\hat{V}(q) = \frac{4\pi}{q^2} \hat{\rho}(q)$$

$$\hat{\rho}(q) = e - e \int dr |\psi_0(r)|^2 e^{iq \cdot r} =$$

$$= e - 2e \int_0^\infty dr r^2 e^{-2r} \int_{-1}^1 d(\cos\theta) e^{iqr \cos\theta}$$

$$= e - \frac{2e}{q} \int_0^\infty dr r e^{-2r} 2 \sin qr \quad \leftarrow \text{par parties}$$

$$= e - \frac{2e}{q} \cdot \frac{8q}{(4+q^2)^2} = e \frac{q^2(8+q^2)}{(4+q^2)^2}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2 k^2} |\hat{V}(q)|^2 = \frac{4m^2}{\hbar^4} \frac{1}{q^4} e^2 \left[\frac{q^2(8+q^2)}{(4+q^2)^2} \right]^2$$

ψ_0 - en unités atomiques

$$\Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{me^2} = 1 \quad (\text{dans la suite on pose } e=me=\hbar=1)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4(8+q^2)^2}{(4+q^2)^4}$$

• θ petit $\rightarrow q$ petit

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim 1 \quad \text{isotrope}$$

• θ grand $\rightarrow q$ grand

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \frac{1}{q^4} \sim \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

CALCUL DE LA SECTION EFFICACE TOTALE

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi = \frac{1}{v^2} q dq d\varphi$$

$$q = 2v \sin \frac{\theta}{2} \rightarrow q_{\max} = 2v$$

$$\sigma_{\text{TOT}} = \int_0^{q_{\max}} d\sigma = \frac{1}{4\pi^2 v^2} \int_0^{q_{\max}} dq \int_0^{2\pi} d\varphi q |\hat{V}(q)|^2 =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{v^2} \int_0^{2v} dq q |\hat{V}(q)|^2$$

$$= \frac{2\pi}{v^2} \int_0^{2v} dq q \frac{4(8+q^2)^2}{(4+q^2)^4}$$

• v est supposé grand et l'intégrale converge \Rightarrow la borne supérieure peut être remplacée par l'infini

$$\sigma_{\text{TOT}} = \frac{2\pi}{v^2} \int_0^\infty dq q \frac{4(8+q^2)^2}{(4+q^2)^4} \stackrel{x=q^2}{=} \frac{4\pi}{v^2} \int_0^\infty dx \frac{(8+x)^2}{(4+x)^4} =$$

$$= \frac{4\pi}{v^2} \int dx \left[\frac{1}{(4+x)^2} + \frac{8}{(4+x)^3} + \frac{16}{(4+x)^4} \right]$$

$$= \frac{4\pi}{v^2} \left[\frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{12} \right] = \frac{7\pi}{3v^2}$$

• alternativement

$$\sigma_{\text{TOT}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{4(8+4v^2 \sin^2 \frac{\theta}{2})^2}{(4+4v^2 \sin^2 \frac{\theta}{2})^4}$$

$$= 2\pi \frac{4 \cdot 16}{16 \cdot 16} \int_0^\pi d\theta \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \frac{(2+v^2 \sin^2 \frac{\theta}{2})^2}{(1+v^2 \sin^2 \frac{\theta}{2})^4}$$

$$x = v^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

$$dx = v^2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta \quad ; \quad x: 0 \rightarrow v^2$$

$$= \frac{\pi}{v^2} \int_0^{v^2} dx \frac{(2+x)^2}{(1+x)^4} \approx \frac{7\pi}{3} v^2$$

\uparrow
 $v \gg 1$

Série 4. Exercice 2.

Diffusion de particules identiques: exemple de deux électrons
non relativistes.

Dans la collision de deux électrons le calcul de la section efficace requiert la prise en compte des effets de la statistique de Fermi, ou l'indiscernabilité des deux particules.

Supposons d'abord que la fonction d'onde du système des deux particules est de la forme: (c'est à dire que le spin total est dans un état donné).

$$|\uparrow\uparrow\rangle \otimes \psi(r_1, r_2)$$

$$|\downarrow\downarrow\rangle \otimes \psi(r_1, r_2)$$

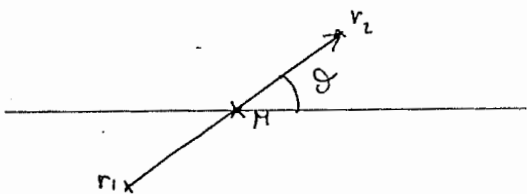
$$\{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\} \otimes \psi(r_1, r_2)$$

$$\{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\} \otimes \psi(r_1, r_2)$$

état triplet
partie orbitale $\psi(r_1, r_2)$ doit
être antisymétrique

état singulet, la partie orbitale doit
être symétrique.

Dans le référentiel du centre de masse l'échange de r_1 et r_2 revient à changer le signe de $\underline{r} = r_1 - r_2$:



si bien que le comportement asymptotique de $\psi(\underline{r})$ doit être de la forme:

$$\psi(\underline{r}) \sim e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} + e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}} + \frac{1}{r} e^{ikr} [f_k(\theta) + f_k(\pi-\theta)]$$

pour l'état singulet

et

$$\psi(\underline{r}) \sim e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} - e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}} + \frac{1}{r} e^{ikr} [f_k(\theta) - f_k(\pi-\theta)]$$

pour l'état triplet.

Dans chaque cas la section efficace différentielle sera:

$$\frac{d\sigma_{\text{sing}}}{d\Omega} = |f_k(\theta) + f_k(\pi-\theta)|^2$$

$$\frac{d\sigma_{\text{trip}}}{d\Omega} = |f_k(\theta) - f_k(\pi-\theta)|^2$$

Si les particules ne sont pas préparées dans un état de spin total bien défini, la section efficace est donnée par la moyenne des deux sections efficaces ci-dessus:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{3}{4} |f_k(\theta) + f_k(\pi-\theta)|^2 + \frac{1}{4} |f_k(\theta) - f_k(\pi-\theta)|^2 \\ &= |f_k(\theta)|^2 + |f_k(\pi-\theta)|^2 + \frac{3}{4} \overline{f_k(\theta) f_k(\pi-\theta)} + \frac{1}{4} \overline{f_k(\theta) f_k(\pi-\theta)} \end{aligned}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta)|^2 + |f_k(\pi-\theta)|^2 - \frac{1}{2} (f_k(\theta) \overline{f_k(\pi-\theta)} + \overline{f_k(\theta)} f_k(\pi-\theta))$$

dans cette expression on peut utiliser la formule de Rutherford pour

$f_k(\theta)$ avec $m = \frac{m_e^2}{2m_e} = \frac{m_e}{2}$ et $K = \frac{m v^2}{\hbar} = \frac{m_e v^2}{2\hbar}$

$m_e =$ masse de l'électron).

* On a besoin de la formule pour $f_k(\theta)$ et non pas uniquement celle pour $|f_k(\theta)|^2$

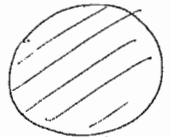
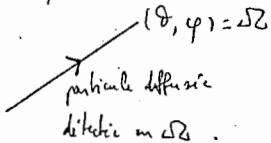
la donne.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{e^2}{m_e v^2}\right)^2 \left\{ \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\theta}{2}} - \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}} \cos\left(\frac{e^2 \hbar k^2 \theta}{2}\right) \right\}$$

Formule de Mott, 1930

Formule de changement de référentiel par les relations efficients différentielles.

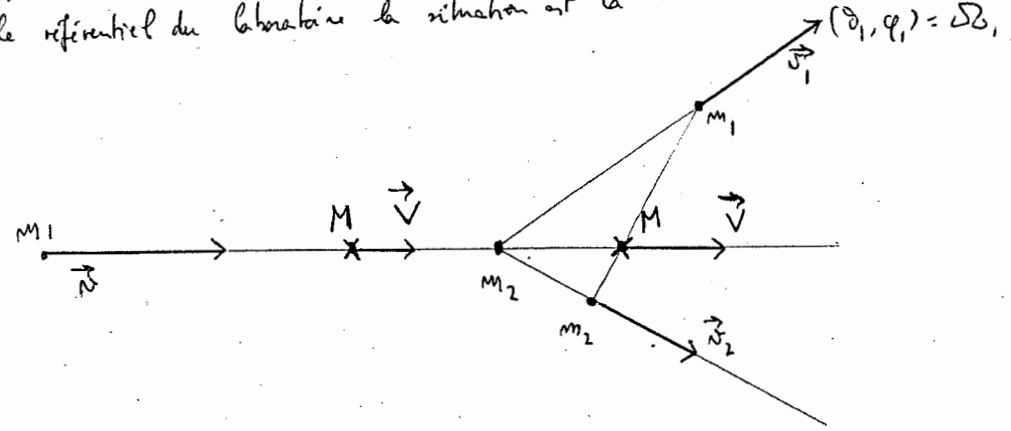
Jusqu'ici nous avons traité la diffusion d'une particule par un potentiel :



région d'interaction avec un potentiel $V(r)$ dans.

Dans la situation ci-dessus on peut penser que $V(r)$ est créé par une particule infiniment lourde qui n'est pas de recul lors de la collision.

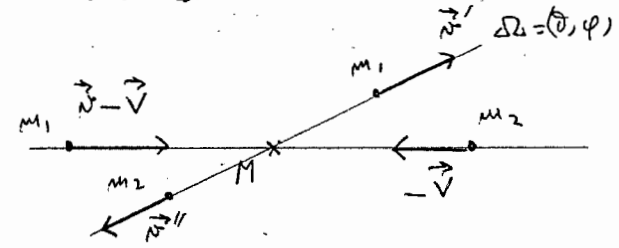
Une situation physiquement importante est celle où la cible est une particule de masse finie m_2 qui subit un recul lors de la collision. Soit m_1 la masse de la particule incidente et \vec{v} sa vitesse. On suppose que initialement m_2 est au repos. Dans le référentiel du laboratoire la situation est la suivante :



$M = m_1 + m_2$

$\vec{V} =$ vitesse du centre de masse $= \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{v}$

Dans le référentiel du centre de masse on a la situation suivante.



L'énergie cinétique du centre de masse est

$$E_{CM} = \frac{1}{2} M \vec{V}^2 = \frac{1}{2} (m_1 + m_2) \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \vec{V}^2$$

$$E_{CM} = \frac{1}{2} \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)} \vec{V}^2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} E$$

L'énergie cinétique relative est

$$E_r = E - E_{CM} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} E = \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \vec{V}^2$$

$$E_r = \frac{1}{2} \mu \vec{V}^2$$

où $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} =$ masse réduite.

L'équation de Schrödinger pour le mouvement des degrés de liberté relatif est donc

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E_r \psi(\vec{r}) = \frac{1}{2} \mu v^2 \psi(\vec{r})$$

où $\vec{r} =$ vecteur relatif. $\frac{1}{2} \mu v^2 = \frac{\hbar^2 K^2}{2\mu} \Rightarrow K = \frac{\mu v}{\hbar}$

Ainsi dans le référentiel du centre de masse on cherche une solution ayant le comportement asymptotique

$$\psi(\vec{r}) \sim e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f_{\vec{k}}(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

si bien que la section efficace différentielle est, dans le référentiel du centre de masse, égale à

$$\frac{d\sigma(\vartheta)}{d\vartheta} = |f_{\vec{k}}(\vartheta)|^2$$

En résumé : dans le référentiel du centre de masse, on peut appliquer la théorie de la diffusion par un potentiel pour calculer $|f_{\vec{k}}(\vartheta)|^2$ avec $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} =$ masse réduite et $K = \frac{\mu v}{\hbar}$.

On veut maintenant pouvoir calculer $\frac{d\sigma(\vartheta_1)}{d\vartheta_1}$, la section efficace différentielle dans le référentiel du laboratoire. Pour cela on note que

$$d\sigma(\vartheta) = \#(\text{de particules détectées dans l'angle solide } d\vartheta, \text{ par unité de temps et par unité de flux incident})$$

$$d\sigma(\vartheta_1) = \#(\text{de particules détectées de l'angle solide } d\vartheta_1, \text{ par unité de temps et par unité de flux incident})$$

Mais on doit avoir $d\sigma(\vartheta) = d\sigma(\vartheta_1)$ puisque le nb de particules détectées doit être indépendant du référentiel.

$$\Rightarrow \frac{d\sigma(\vartheta_1)}{d\vartheta_1} = \frac{d\sigma(\vartheta)}{d\vartheta} \underbrace{\frac{d\vartheta}{d\vartheta_1}}_{\frac{d(\cos\vartheta) d\varphi}{d(\cos\vartheta_1) d\varphi_1}}$$

mais $d\varphi = d\varphi_1$ donc il reste :

$$\underline{\frac{d\sigma(\vartheta_1)}{d\vartheta_1}} = \underline{\frac{d\sigma(\vartheta)}{d\vartheta} \frac{d\cos\vartheta}{d\cos\vartheta_1}} = \underline{|f_k(\vartheta)|^2 \frac{d\cos\vartheta}{d\cos\vartheta_1}}$$

Calculons $\cos\vartheta$ en fonction de $\cos\vartheta_1$:

on a : $\vec{V} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{v}$; $v' = \frac{m_2}{m_1 + m_2} v$; $v'' = \frac{m_1}{m_1 + m_2} v$

de plus : $\vec{v}_1 = \vec{v}' + \vec{V} \Rightarrow \begin{cases} v_1 \sin\vartheta_1 = v' \sin\vartheta \\ v_1 \cos\vartheta_1 = v' \cos\vartheta + V \end{cases}$

$$\Rightarrow \tan\vartheta_1 = \frac{\sin\vartheta}{\cos\vartheta + \frac{V}{v'}} = \frac{\sin\vartheta}{\cos\vartheta + \frac{m_1}{m_2}}$$

$$\Rightarrow \cos\vartheta_1 = \frac{\cos\vartheta + \frac{m_1}{m_2}}{\left(1 + 2\frac{m_1}{m_2}\cos\vartheta + \frac{m_1^2}{m_2^2}\right)^{1/2}}$$

et donc on trouve finalement :

$$\frac{d\sigma(\vartheta_1)}{d\vartheta_1} = |f_k(\vartheta)|^2 \frac{\left(1 + 2\frac{m_1}{m_2}\cos\vartheta + \frac{m_1^2}{m_2^2}\right)^{3/2}}{1 + \frac{m_1}{m_2}\cos\vartheta}$$