

Théorie de Collision

27 mars 2021

Table des matières

1	Processus de collision en mécanique quantique	1
1.1	Introduction	1
1.2	Description classique d'une collision	1
1.2.1	Grandeurs conservées	2
1.2.2	Collision élastique	3
1.2.3	Collision inélastique	4
1.2.4	Référentiel de centre de masse	5
1.2.5	Hamiltonien classique	6
1.2.6	Section efficace	7
1.3	Description quantique d'une collision	8
1.3.1	Équation d'onde stationnaire	9
1.3.2	Référentiel de centre de masse	10
1.3.3	Onde stationnaire de diffusion	11
2	Diffusion par un potentiel central	13
2.1	Introduction	13
2.2	Résolution de l'équation de SCHRÖDINGER en coordonnées sphériques	14
2.3	Décomposition en onde partielles	15
2.3.1	Solution de l'équation de SCHRÖDINGER asymptotique	17
2.4	Calcul de l'amplitude de diffusion	19
2.4.1	Calcul de la section efficace	21
2.5	Le sens physique du déphasage	21

3	Fonction de GREEN - Approximation de BORN	24
3.1	Équation intégrale de diffusion	24
3.2	Fonction de GREEN	27
3.2.1	Calcul de $G_0(\vec{r}, \vec{r}'; E_0)$	27
3.3	Amplitude de diffusion - Section efficace	30
3.4	Approximation de BORN	32
3.5	Diffusion par un potentiel central	34
3.6	Équation de LIPPMANN-SCHWINGER	36
3.6.1	Opérateur ou matrice de transition	37
3.6.2	Développement de BORN	38
3.6.3	L'amplitude de diffusion en fonction de \hat{T}	38

Chapitre 1

Processus de collision en mécanique quantique

1.1 Introduction

La plupart des découvertes en physique sont le résultat d'expériences de collision.

Exemples.

- Découvertes du noyau atomique par RUTHERFORD.
- Spectroscopie nucléaire et atomique.
- Fission nucléaire.
- Découverte des particules élémentaires et leurs propriétés.

Ce chapitre sera consacré aux notions élémentaires concernant les problèmes de collision. Les résultats des expériences dans ce domaine s'expriment au moyen de quantités appelées **sections efficaces**. Ces dernières sont directement liées au comportement asymptotique des solutions stationnaires de l'équation de SCHRÖDINGER.

1.2 Description classique d'une collision

On dit qu'il y a collision entre deux ou plusieurs particules quand elles subissent une interaction mutuelle de courte durée et de courte portée. Cette collision est localisée dans le temps et dans l'espace.

CHAPITRE 1. PROCESSUS DE COLLISION EN MÉCANIQUE QUANTIQUE2

En règle générale, les forces d'interaction sont négligeables quand les particules sont suffisamment éloignées. On peut donc distinguer un **avant** et un **après** la collision.

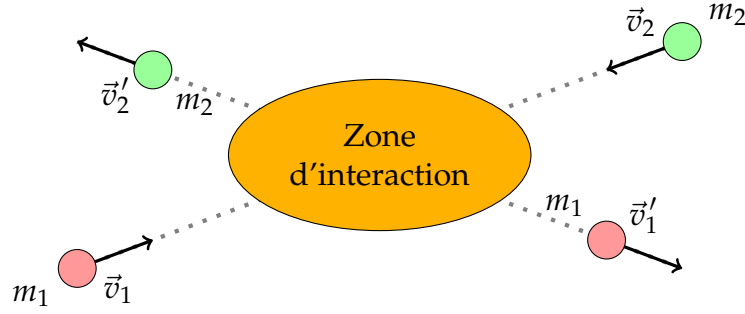


FIGURE 1.1 – Collision élastique de 2 particules

Connaissant les vitesses \vec{v}_i , on peut déduire des informations sur les vitesses \vec{v}'_i et vice versa.

1.2.1 Grandeurs conservées

Malgré notre connaissance partielle du problème, on peut obtenir certaines informations grâce aux lois de conservation.

On considère que le système \mathcal{S} de deux particules est isolé de l'extérieur.

— Conservation de la quantité de mouvement totale :

$$\frac{d\vec{P}_{\mathcal{S}}}{dt} = \vec{F}^{ext} = 0, \quad \vec{P}_{\mathcal{S}} = \sum_i^N \vec{p}_i = \sum_i^{N'} \vec{p}'_i = \vec{P}'_{\mathcal{S}}$$

— Conservation de l'énergie totale :

Si les forces d'interaction entre les particules dérivent d'une énergie potentielle (forces conservatives), alors l'énergie totale du système s'écrit :

$$E_T^{\mathcal{S}} = E_c^{\mathcal{S}} + E_p^{\mathcal{S}} + \sum_i^N U_i = E_c'^{\mathcal{S}} + E_p'^{\mathcal{S}} + \sum_i^{N'} U'_i = E_T'^{\mathcal{S}}$$

CHAPITRE 1. PROCESSUS DE COLLISION EN MÉCANIQUE QUANTIQUE3

E_c^S , E_p^S et U_i sont les énergies cinétique, potentielle (l'interaction entre les particules) et interne, respectivement.

Si on néglige les interactions entre particules, on obtient :

$$E_c^S + \sum_i^N U_i = E_c'^S + \sum_i^{N'} U_i'$$

N et N' est le nombre de particules avant et après la collision.

1.2.2 Collision élastique

On dit qu'il y a collision élastique lorsque avant et après la collision on a :

- Le nombre de particules reste constant.
- L'énergie interne de chaque particule reste inchangée.

En d'autre terme, les particules ne se déforment pas et ne changent pas de nature.

Les lois de conservation sont donc :

$$m_i^S = m_i'^S, \quad \vec{P}_S = \vec{P}'_S, \quad E_T^S = E_T'^S$$

Exemples.

- Collision entre les balles de billard.
- Diffusion de RUTHERFORD (diffusion d'un noyau ${}^4_2\text{He}^{++}$ par un noyau positif).

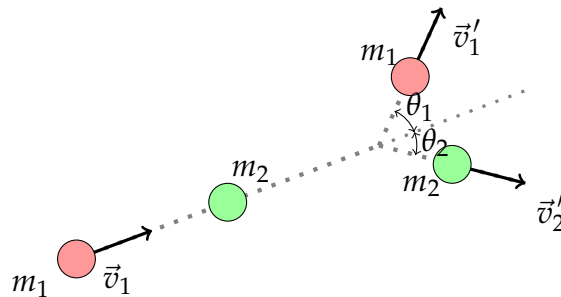


FIGURE 1.2 – Collision de 2 particules, m_2 est au repos

Les lois de conservation donnent :

$$\begin{cases} m_1 \vec{v}_1 = m_1 \vec{v}_1' + m_2 \vec{v}_2' \\ \frac{1}{2} m_1 v_1^2 = \frac{1}{2} m_1 v_1'^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2'^2 \end{cases}$$

1.2.3 Collision inélastique

On dit qu'une collision est inélastique lorsqu'une partie de l'énergie cinétique initiale du système s'est transformée en d'autres formes d'énergie.

La collision s'accompagne alors d'une variation d'énergie interne et/ou d'une modification du nombre de particules. Certaines peuvent être créées par fragmentation ou par équivalence masse-énergie.

Exemple. Réaction chimique.

Lorsqu'on laisse tomber une pâte à modeler, celle-ci ne rebondit pas, toute l'énergie cinétique acquise par la boule avant l'impact est convertie en énergie interne d'où une déformation et un échauffement du projectile.

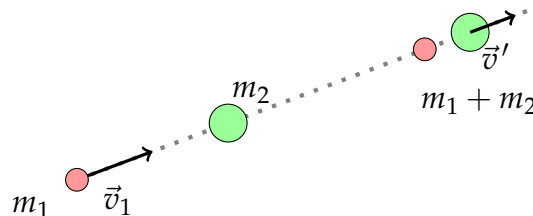


FIGURE 1.3 – Collision de 2 particules, m_2 est au repos

Ici, la particule m_1 heurte une cible immobile m_2 , puis elle se lie à elle. En effet, après la collision, l'ensemble se déplace à la vitesse \vec{v}' .

Les lois de conservation s'écrivent :

$$\begin{cases} m_1 \vec{v}_1 = (m_1 + m_2) \vec{v}' \\ \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + Q = \frac{1}{2} (m_1 + m_2) v'^2 \end{cases}$$

Q représente l'énergie perdue.

CHAPITRE 1. PROCESSUS DE COLLISION EN MÉCANIQUE QUANTIQUE 5

Soit A_ZX un noyau au repos de masse M qui se désintègre en deux noyaux ${}^{A_1}_{Z_1}X_1$ et ${}^{A_2}_{Z_2}X_2$ de masses m_1 et m_2 . Q est l'énergie libérée par la réaction nucléaire. Dans ce cas :

$$M \neq m_1 + m_2$$

$\Delta m = M - (m_1 + m_2)$ est responsable, par équivalence énergie masse, de l'énergie libérée :

$$Q = \Delta mc^2$$

Les lois de conservation s'écrivent :

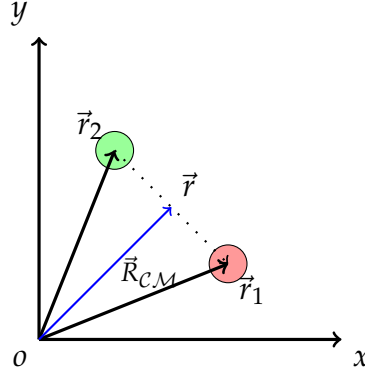
$$\begin{cases} m_1 \vec{v}'_1 + m_2 \vec{v}'_2 = 0 \\ Q = \frac{1}{2}m_1 v'^2_1 + \frac{1}{2}m_2 v'^2_2 \end{cases}$$

Remarque. Dans la littérature, on trouve parfois trois types de collisions :

- Collision élastique : mêmes particules avant et après la collision.
- Collision inélastique : seule l'énergie interne des particules qui change.
- Collision parfaitement inélastique : dans ce cas, en plus du changement de l'énergie interne des particules, leur nombre ou nature deviennent différents après la collision.

1.2.4 Référentiel de centre de masse

Les mouvements des particules sont corrélés car elles interagissent à travers le potentiel $V = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ dans le cas de deux particules. On ne peut donc pas effectuer une séparation de variables entre \vec{r}_1 et \vec{r}_2 . Par contre, une séparation de variables est possible entre la coordonnée de centre de masse \mathcal{CM} .



$$\vec{R}_{CM} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{M}, \quad M = m_1 + m_2$$

et la coordonnée relative entre les deux particules 1 et 2 :

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

μ est la masse réduite du système.

Par conséquent, on obtient :

$$\begin{aligned} \vec{V}_{CM} &= \frac{m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2}{M} \iff \vec{P}_{CM} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \\ \vec{v} &= \vec{v}_1 - \vec{v}_2 \iff \vec{p} = \frac{m_1 \vec{p}_1 - m_2 \vec{p}_2}{M} \end{aligned}$$

1.2.5 Hamiltonien classique

Dans un référentiel d'inertie, l'énergie mécanique du système de deux particules est :

$$H_S = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

En se basant sur les relations donnant les positions \vec{R}_{CM} et \vec{r} , on obtient :

$$\begin{cases} \vec{r}_1 = \vec{R}_{CM} + \frac{m_2}{M} \vec{r} \\ \vec{r}_2 = \vec{R}_{CM} - \frac{m_1}{M} \vec{r} \end{cases}$$

En rereportant les expressions de \vec{r}_1 et \vec{r}_2 dans celle de H_S et en tenant compte de l'expression de \vec{R}_{CM} , on obtient :

$$\begin{aligned} H_S &= \frac{1}{2} M \vec{V}_{CM}^2 + \frac{1}{2} \mu \vec{v}^2 + V(\vec{r}) \\ &= \frac{\vec{P}_{CM}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \end{aligned}$$

- Le premier terme représente l'énergie cinétique du centre de masse CM dans le référentiel d'inertie. Ce terme est nul dans le référentiel de centre de masse.
- Le deuxième terme représente l'énergie du système de deux particules dans le référentiel de centre de masse.
- L'étude du mouvement relatif des deux particules dans le référentiel de CM se mène donc à celle du mouvement de la particule relative de mass μ , de position \vec{r} et d'impulsion \vec{p} plongé dans le potentiel $V(\vec{r})$.

1.2.6 Section efficace

La modélisation de la collision fait intervenir la notion de **sections efficace**. Celle-ci est intimement liée à la notion de **probabilité de diffusion**.

Le but de cette modélisation est de pouvoir calculer **le nombre de collisions qui vont se produire**.

Le faisceau incident est caractérisé par sa section transversale de surface S . S est la surface de recouvrement (tube de collision) du faisceau sur la cible. Elle est perpendiculaire au faisceau incident.

Le module de son courant \vec{j} est donné par $j = Dv$, où v est la vitesse moyenne des particules incidentes (projectiles) et D la densité des particules incidentes n par unité de volume τ .

CHAPITRE 1. PROCESSUS DE COLLISION EN MÉCANIQUE QUANTIQUE 8

Donc :

$$j = \frac{n}{\tau} v = \frac{n}{S \Delta l} \frac{\Delta l}{\Delta t} = \frac{n}{S \Delta t}$$

Ceci permet d'écrire par définition le nombre n de particules traversant la surface S normale au faisceau incident pendant l'intervalle de temps dt :

$$dn = \vec{j} \cdot \vec{dS} dt$$

Définition. j définit le nombre de particules traversant l'unité de surface par unité de temps.

Introduisons maintenant le nombre de collisions $N_{collision}$ (projectiles-cible) par unité de temps. Ce nombre est proportionnel au courant j .

$$N_{collision} = \sigma j$$

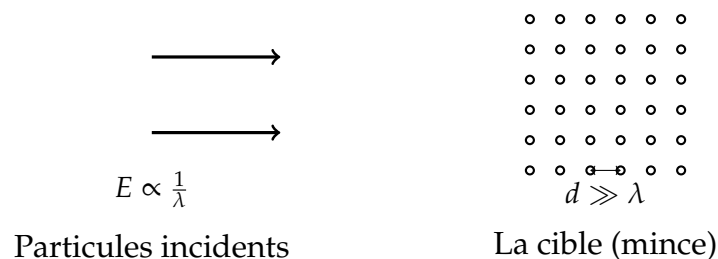
σ est une section efficace.

Définition. La section efficace est une grandeur centrale caractérisant la collision entre particules. Physiquement, elle représente le taux ou la probabilité d'une diffusion malgré qu'elle possède les dimensions d'une surface. Elle dépend du potentiel d'interaction entre les deux particules.

1.3 Description quantique d'une collision

Les particules incidentes et la cible ont une structure interne :

- Particule élémentaire (électron, proton, neutron) : spin
- Particule complexe ou composée (atome, molécule, ion) : nombre quantique (n, l, m, s)



Propriétés du faisceau incident :

CHAPITRE 1. PROCESSUS DE COLLISION EN MÉCANIQUE QUANTIQUE 9

- Monoénergétique.
- Contient du faible nombre de particules (pour ne pas avoir beaucoup d'interaction entre elles).

Propriétés de la cible :

- Un grand nombre de particules (pour assurer une collision).
- La distance interne entre les particules de la cible est supérieure à la longueur d'onde du faisceau incident.
- La cible est suffisamment mince pour éviter les diffusions multiples.

Types de collisions :

- Élastique : $A + B \longrightarrow A + B$, rien n'a changé dans la structure quantique interne des particules (à part leur trajectoire).
- Inélastique : $A + B \longrightarrow A' + B'$, il y a un changement dans les trajectoires des particules et dans la structure interne (**e.g.** $s = \frac{1}{2}$ devient $s = -\frac{1}{2}$).
- Parfaitement inélastique : $A + B \longrightarrow C + D$, il y a un changement dans les particules élémentaires : A et B changeront en C et D.

Exemples.

- $e^+ + H \longrightarrow e^+ + H$ (diffusion élastique).
- $e^+ + H \longrightarrow e^+ + H^*$ (diffusion inélastique).
- $e^+ + H \longrightarrow e^+ + p + e^-$ (réaction d'ionisation).
- $e^+ + H \longrightarrow p + 2\gamma$ (réaction d'annihilation).
- $e^+ + H \longrightarrow p + (e^+ + e^-)$ (réarrangement).

Dans tous les cas, l'énergie de la particule incidente est différente.

1.3.1 Équation d'onde stationnaire

On a un système de deux particules $(m_1, \vec{r}_1, \vec{p}_1)$ et $(m_2, \vec{r}_2, \vec{p}_2)$, elles interagissent par un potentiel $V(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$.

L'Hamiltonien du système est donné par :

$$\hat{H}_S = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$$

Donc, on a l'équation de SCHRÖDINGER suivante :

$$\hat{H}_S \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)}{\partial t}$$

Nous avons donc une équation à 7 variables. Le cas au l'Hamiltonien ne dépend pas du temps, on peut faire une séparation de variables.

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) f(t)$$

La condition de normalization $\int |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 d^3r_1 d^3r_2 dt = 1$ implique :

$$\begin{aligned} \int |\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 d^3r_1 d^3r_2 &= 1 \\ \int |f(t)|^2 dt &= 1 \end{aligned}$$

Donc $f(t) = e^{\pm i\omega t}$, avec $\omega = \frac{E_S}{\hbar}$.

Notre potentiel ne dépend que de $\vec{r}_2 - \vec{r}_1$, alors \hat{H}_S est indépendant du temps, on a donc :

$$\hat{H}_S \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_S \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

1.3.2 Référentiel de centre de masse

L'Hamiltonien du système s'écrit :

$$\hat{H}_S = \hat{H}_{CM} + \hat{H}$$

avec :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{CM} &= \frac{\hat{p}_{CM}^2}{2M}, & M &= m_1 + m_2 \\ \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\vec{r}), & \mu &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \end{aligned}$$

L'ensemble $\{\hat{H}_S, \hat{H}_{CM}, \hat{H}\}$ forme un **ECOC** (ensemble complet d'observables qui commutent). donc il ont un système de vecteurs propres communes. $\{|\chi\rangle\}$:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{CM}|\chi\rangle &= E_{CM}|\chi\rangle \\ \hat{H}|\chi\rangle &= E|\chi\rangle \\ \hat{H}_S|\chi\rangle &= (E_{CM} + E)|\chi\rangle\end{aligned}$$

L'espace d'HILBERT des états est $\mathcal{H}_S = \mathcal{H}_{CM} \otimes \mathcal{H}$, et on a comme vecteur $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}_S$:

$$|\Phi\rangle = |\xi\rangle \otimes |\eta\rangle$$

avec $|\xi\rangle \in \mathcal{H}_{CM}$ et $|\eta\rangle \in \mathcal{H}$.

Si $V(\vec{r})$ dépend de $r = \|\vec{r}_2 - \vec{r}_1\|$ (et non pas de $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$), le potentiel est dit potentiel central.

Donc on a transformé notre problème à un problème de diffusion d'une particule (μ, \vec{r}, \vec{p}) par un potentiel central $V(r)$.

1.3.3 Onde stationnaire de diffusion

Soit E l'énergie de la particule relative (μ, \vec{r}, \vec{p}) , $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Quand $V(r) = 0$:

$$E = \frac{p^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

Le faisceau est large, donc le nombre de particules non-diffusées est très grand par rapport au nombre de particules diffusées. Ces particules transmises ne seront pas diffusées par $V(r)$.

L'équation de SCHRÖDINGER s'écrit sous la forme :

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

CHAPITRE 1. PROCESSUS DE COLLISION EN MÉCANIQUE QUANTIQUE 12

Cette équation admet une infinité de solutions (une pour chaque valeur de k). Mais, il faut choisir pour celle-ci, celle qui correspond au problème étudié.

Avant d'entrer (selon la direction oz) dans la zone d'action de $V(r)$, la particule est considérée comme une onde plane :

$$\Psi_{inc}(\vec{r}) = e^{ikz}$$

Après la diffusion, le paquet d'onde est égale à une partie d'onde transmise, plus une partie d'onde diffusé. On a par définition le comportement asymptotique suivant (pour $r \rightarrow \infty$) :

$$\Psi_{dif}(\vec{r}) = \underbrace{e^{ikz}}_{\text{onde transmise}} + \underbrace{f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}}_{\text{onde diffusée}}$$

Donc, l'onde diffusée dépend de \vec{r} et l'angle solid $\Omega = (\theta, \phi)$. $f(\theta, \phi)$ est appelée **amplitude de diffusion**.

Chapitre 2

Diffusion par un potentiel central

2.1 Introduction

L'analyse d'une collision se fait en décrivant le problème en termes des coordonnées relatives et du centre de masse \mathcal{CM} .

La dynamique du centre de masse est triviale, et on se concentre sur le mouvement relatif qui est décrit par l'Hamiltonien d'une particule de la masse réduite en interaction avec un potentiel centré à l'origine.

Nous avons déjà fait ça dans le chapitre précédent. Donc, nous allons nous concentrer sur le problème relatif ainsi formulé.

La mesure qu'on fait dans une expérience de collision, et donc la grandeur qu'on veut calculer est la section efficace différentielle :

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} = \frac{j_{dif}}{j_{inc}} r^2$$

En tenant compte de l'expression de l'onde diffusée que nous avons déjà calculé :

$$\Psi_{dif}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

On a trouvé :

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

Dans ce chapitre on va calculer cette section efficace dans le cas d'une diffusion d'une particule de masse m pour un potentiel central $V(r)$.

2.2 Résolution de l'équation de SCHRÖDINGER en coordonnées sphériques

Pour calculer la section efficace, il faut déterminer la forme asymptotique de l'onde stationnaire $\Psi(\vec{r})$.

L'Hamiltonien du système s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

$V(\vec{r}) = V(r)$ car le problème présente une symétrie sphérique. Nous utilisons donc les coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) où :

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (2.1)$$

Il s'agit de trouver le terme cinétique $\frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ où :

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

En utilisant les transformations (2.1), on trouve :

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2} \frac{\hat{L}^2}{r^2}, \quad \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \\ \hat{L}^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \end{aligned}$$

Donc l'équation de SCHRÖDINGER s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2m} \frac{\hat{L}^2}{r^2} + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \phi) = E \Psi(r, \theta, \phi)$$

Selon les expressions de \hat{L}^2 , \hat{H} et $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$. On déduit qu'ils commutent deux à deux. Donc il admettent au minimum un **ECOC** (ensemble complet d'observables qui commutent). C'est-à-dire, ils partagent un ensemble de fonctions propres communes.

On peut trouver cette ensemble parmi les fonctions propres de \hat{L}^2 et \hat{L}_z que nous connaissons déjà, et qui sont les harmoniques sphériques $Y_l^m(\theta, \phi)$. En effet :

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) &= l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi) \\ \hat{L}_z Y_l^m(\theta, \phi) &= m\hbar Y_l^m(\theta, \phi) \end{aligned} \tag{2.2}$$

Donc, nous pouvons écrire les solutions de l'équation de SCHRÖDINGER sous la forme :

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l,m} R_l(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

2.3 Décomposition en onde partielles

Comme le faisceau incident \vec{k}_0 est selon la direction oz , et le potentiel $V(r)$ est symétrique, donc $\Psi(r, \theta, \phi)$ est indépendant de ϕ , ce qui correspond à $m = 0$:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \sum_l R_l(r) Y_l^0(\theta, \phi)$$

sachant que $Y_l^0(\theta, \phi) \propto P_l(\cos \theta)$, on a :

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \sum_l R_l(r) P_l(\cos \theta)$$

En outre, en tenant compte de (2.2) et en remplaçant dans l'équation de SCHRÖDINGER, on trouve :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E \right] R_l(r) = 0$$

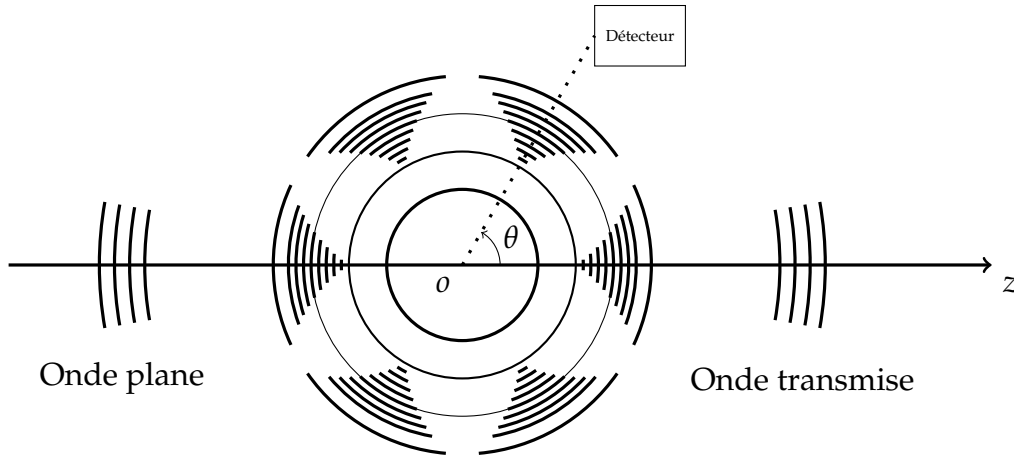
Nous allons étudier les solutions $R_l(r)$ pour une valeur positive de l'énergie $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$. On pose aussi $U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$, On obtient :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right] R_l(r) = 0$$

Le but est de chercher le paquet d'onde de l'onde diffusée $\Psi_{dif}(\vec{r})$.

On sait que loin de $V(r)$, l'onde est stationnaire. Dans la zone d'influence ($V(r) \neq 0$), le paquet d'onde sera perturbé, il prend la forme sphérique.

On constate qu'il y a une onde transmise et une onde qui se diffuse dans toutes les directions.



Pour une onde stationnaire libre ($V(r) = 0$), l'équation de SCHRÖDINGER est sous la forme :

$$\left[\nabla^2 + k^2 \right] \Psi(\vec{r}) = 0$$

et sa solution est donnée par :

$$\Psi_{inc}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikz}$$

L'onde diffusée est $\Psi_{dif}(\vec{r}) = e^{ikz} +$ onde sphérique.

A fin d'éviter les interférences entre les 2 ondes (plane et sphérique), on fait nos mesures à $r \rightarrow \infty$. Donc on cherche le comportement asymptotique de notre fonction d'onde.

Une onde sphérique a pour forme $\frac{e^{ikr}}{r}$, le $\frac{1}{r}$ exprime la dispersion de l'onde (diminution de son intensité) en l'assimulant à la lumière, donc :

$$\Psi_{asy}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

2.3.1 Solution de l'équation de SCHRÖDINGER asymptotique

Lorsque $r \rightarrow \infty$, $U(r) = 0$, on obtient l'équation de SCHRÖDINGER suivante :

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

En effectuant le changement de variable $\rho = kr$, notre équation se ramène à celle de BESSEL :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right] R_l(\rho) = 0$$

Les solutions sont données par les fonctions de BESSEL sphériques $Z_l(\rho)$:

$$Z_l(\rho) = A_l J_l(\rho) + B_l N_l(\rho)$$

Donc $Z_l(\rho)$ est une composition linéaire des fonctions de BESSEL $J_l(\rho)$ et de NEUMANN $N_l(\rho)$, dont les comportements asymptotiques sont :

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} J_l(\rho) \sim \frac{\sin(\rho - l\frac{\pi}{2})}{\rho}$$

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} N_l(\rho) \sim -\frac{\cos(\rho - l\frac{\pi}{2})}{\rho}$$

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} J_l(\rho) \sim \rho^l$$

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} N_l(\rho) \sim \frac{1}{\rho^{l+1}}$$

La solution $N_l(\rho)$ n'est pas régulière, donc nous la rejetterons :

$$R_l(\rho) = A_l J_l(\rho) = A_l \frac{\sin(\rho - l\frac{\pi}{2})}{\rho}$$

$R_l(\rho)$ représente l'onde plane ($V(r) = 0$), ce qui induit :

$$\Psi_{inc}(\vec{r}) = e^{ikz} = \sum_l A_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} P_l(\cos \theta)$$

Les A_l sont des constantes à déterminer.

Par conséquent, quand $U(r) \neq 0$, $R_l(\rho)$ qui représente le paquet d'onde stationnaire diffusé sera influencée par $U(r)$ tel que :

$$R_l^{dif}(r) = C_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)}{kr}$$

δ_l est le déphasage apporté par le potentiel $V(r)$ (ou $U(r)$). Par conséquent, le paquet d'onde totale prend la forme suivante :

$$\Psi_{dif}(r, \theta, \phi) = \sum_l C_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)}{kr} P_l(\cos \theta)$$

2.4 Calcul de l'amplitude de diffusion

Afin de calculer l'amplitude de diffusion $f(\theta, \phi)$, on est amené à comparer entre le paquet d'onde en présence de $V(r)$ à savoir :

$$\Psi_{dif}(r, \theta, \phi) = \sum_l C_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)}{kr} P_l(\cos \theta) \quad (2.3)$$

et la fonction d'onde asymptotique :

$$\Psi_{asy}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.4)$$

Donc, il est nécessaire de développer l'onde plane en polynômes de LEGENDRE.

En effet, selon la solution de l'équation de SCHRÖDINGER quand $V(r) = 0$, on a trouvé :

$$R_l(r) = A_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr}$$

avec¹ $A_l = i^l(2l+1)$.

$$\Psi_{inc}(\vec{r}) = e^{ikz} = \sum_l i^l(2l+1) \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} P_l(\cos \theta)$$

En outre, $f(\theta, \phi)$ est aussi développé en polynômes de LEGENDRE.

$$f(\theta, \phi) = \sum_l f_l P_l(\cos \theta)$$

L'équation (2.4) devient :

$$\Psi_{asy}(r, \theta, \phi) = \sum_l \left[i^l(2l+1) \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} + f_l \frac{e^{ikr}}{r} \right] P_l(\cos \theta) \quad (2.5)$$

1. Voir le livre "Quantum Mechanics" par ALBERT MESSIAH

Développons le sin dans l'équation (2.3) :

$$\Psi_{dif}(r, \theta, \phi) = \sum_l C_l \frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \cos \delta_l + \cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \sin \delta_l}{kr} P_l(\cos \theta)$$

Selon EULER :

$$\begin{aligned} \cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) &= e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})} - i \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \\ &= \left(e^{-i\frac{\pi}{2}}\right)^l e^{ikr} - i \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \\ &= (-i)^l e^{ikr} - i \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \end{aligned}$$

D'où :

$$\begin{aligned} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right) &= \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \cos \delta_l + \cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \sin \delta_l \\ &= \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \cos \delta_l + (-i)^l e^{ikr} \sin \delta_l - i \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \sin \delta_l \\ &= \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) (\cos \delta_l - i \sin \delta_l) + (-i)^l e^{ikr} \sin \delta_l \\ &= \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) e^{-i\delta_l} + (-i)^l e^{ikr} \sin \delta_l \end{aligned}$$

Ce qui donne :

$$\Psi_{dif}(r, \theta, \phi) = \sum_l C_l \left[e^{-i\delta_l} \frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)}{kr} + (-i)^l \frac{\sin \delta_l}{k} \frac{e^{ikr}}{r} \right] P_l(\cos \theta)$$

Sa comparaison avec l'équation (2.5) donne :

$$\begin{aligned} C_l &= i^l (2l + 1) e^{i\delta_l} \\ f_l &= (-i)^l C_l \frac{\sin \delta_l}{k} = (2l + 1) \frac{\sin \delta_l}{k} e^{i\delta_l} \end{aligned}$$

Par conséquent, l'amplitude de diffusion sera donnée par cette expression :

$$f(\theta, \phi) = \frac{1}{k} \sum_l (2l + 1) \sin \delta_l e^{i\delta_l} P_l(\cos \theta) \quad (2.6)$$

2.4.1 Calcul de la section efficace

On a :

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} &= |f(\theta, \phi)|^2 \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{l,m} (2l+1)(2m+1) \sin \delta_l \sin \delta_m e^{i(\delta_l - \delta_m)} P_l(\cos \theta) P_m(\cos \theta)\end{aligned}$$

Et on intégrant sur l'angle solide, on obtient² :

$$\begin{aligned}\sigma(\theta, \phi) &= \iint \frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} \sin \theta \, d\theta \, d\phi \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{l,m} (2l+1)(2m+1) \sin \delta_l \sin \delta_m e^{i(\delta_l - \delta_m)} \int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_m(\cos \theta) \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l,m} (2l+1)(2m+1) \sin \delta_l \sin \delta_m e^{i(\delta_l - \delta_m)} \int_{-1}^1 P_l(\cos \theta) P_m(\cos \theta) \, d\cos \theta \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l\end{aligned}$$

2.5 Le sens physique du déphasage

Quel est le sens physique du déphasage δ_l ? afin de répondre à cette question, on compare entre l'onde libre (plane) et l'onde diffusée :

$$\Psi_{inc}(r, \theta, \phi) = \sum_l R_l^{inc}(r) P_l(\cos \theta)$$

et

$$\Psi_{dif}(r, \theta, \phi) = \sum_l R_l^{dif}(r) P_l(\cos \theta)$$

On a :

2. On a utilisé le fait que :

$$\int_{-1}^1 P_l(\cos \theta) P_m(\cos \theta) \, d\cos \theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,m}$$

$$\begin{aligned}
R_l^{inc}(r) &= A_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} \\
&= \frac{A_l}{2ikr} \left[e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})} - e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2})} \right] \\
&= \frac{i^l(2l+1)}{2ikr} \left[(-i)^l e^{ikr} - i^l e^{-ikr} \right] \\
&= \frac{2l+1}{2ikr} \left[(-1)^{l+1} \underbrace{e^{-ikr}}_{\text{onde entrante}} + \underbrace{e^{ikr}}_{\text{onde sortante}} \right]
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Remarque. Ici, il est important de ne pas interpréter l'onde sortante comme une onde diffusée, car il n'y a pas de diffusion dans $\Psi_{inc}(\vec{r})$.

$$\begin{aligned}
R_l^{dif}(r) &= C_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)}{kr} \\
&= C_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2}) e^{-i\delta_l} + (-i)^l e^{ikr} \sin \delta_l}{kr} \\
&= C_l \frac{\left[e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})} - e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2})} \right] e^{-i\delta_l} + (-i)^l e^{ikr} \left[e^{i\delta_l} - e^{-i\delta_l} \right]}{2ikr} \\
&= \frac{i^l(2l+1)e^{i\delta_l}}{2ikr} \left\{ \left[(-i)^l e^{ikr} - i^l e^{-ikr} \right] e^{-i\delta_l} + (-i)^l e^{ikr} \left[e^{i\delta_l} - e^{-i\delta_l} \right] \right\} \\
&= \frac{(2l+1)}{2ikr} \left[(-1)^{l+1} \underbrace{e^{-ikr}}_{\text{onde entrante}} + e^{2i\delta_l} \underbrace{e^{ikr}}_{\text{onde sortante}} \right]
\end{aligned} \tag{2.8}$$

La comparaison entre (2.7) et (2.8) montre que l'onde entrante reste la même, tandis que l'onde sortante change de comportement.

Donc, le rôle de $V(r)$ est d'introduire un déphasage dans l'onde sortante.

On a alors :

$$\begin{aligned}
\Psi_{dif}(r, \theta, \phi) &= \sum_l \frac{(2l+1)}{2ikr} \left[(-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{2i\delta_l} e^{ikr} \right] P_l(\cos \theta) \\
\Psi_{asy}(r, \theta, \phi) &= \sum_l \frac{(2l+1)}{2ikr} \left[(-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr} \right] P_l(\cos \theta)
\end{aligned}$$

Sous l'effet du potentiel, si on pose ³ $S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}$, on obtient :

$$\Psi_{dif}(r, \theta, \phi) = \sum_l \frac{(2l+1)}{2ikr} \left[(-1)^{l+1} e^{-ikr} + S_l(k) e^{ikr} \right] P_l(\cos \theta)$$

Equivalamment, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \Psi_{dif}(r, \theta, \phi) &= e^{ikz} - e^{ikz} + \sum_l \frac{(2l+1)}{2ikr} \left[(-1)^{l+1} e^{-ikr} + S_l(k) e^{ikr} \right] P_l(\cos \theta) \\ &= e^{ikz} - \Psi_{asy}(r, \theta, \phi) + \sum_l \frac{(2l+1)}{2ikr} \left[(-1)^{l+1} e^{-ikr} + S_l(k) e^{ikr} \right] P_l(\cos \theta) \\ &= e^{ikz} + \sum_l \frac{(2l+1)}{2ik} (S_l(k) - 1) P_l(\cos \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \end{aligned}$$

Ce qui induit :

$$f(\theta, \phi) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) (S_l(k) - 1) P_l(\cos \theta)$$

qui est équivalent à (2.6).

Si $\theta = 0 \implies P_l(\cos \theta) = P_l(1) = 1$, on a :

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

Donc :

$$\sigma(0, \phi) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(0, \phi)$$

Ce résultat est connu par le **théorème optique**.

3. $S_l(k)$ est appelé l'élément de la matrice S.

Chapitre 3

Fonction de GREEN - Approximation de BORN

3.1 Équation intégrale de diffusion

Pour des commodités de calcul, nous allons adopter dans ce qui va suivre, les notations de l'algèbre de DIRAC.

Soit la diffusion élastique d'une particule de masse m par un potentiel $V(\vec{r})$.

Soient \hat{H}_0 l'Hamiltonien de la particule incident et $|\vec{k}_0\rangle$ les kets propres de \hat{H}_0 .

$$\hat{H}_0 |\vec{k}_0\rangle = E_0 |\vec{k}_0\rangle$$

$|\vec{k}_0\rangle$ représente l'onde plane incidente ou les particules transmissent sans diffusion.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \implies \hat{V} = \hat{H} - \hat{H}_0$$

Après diffusion :

$$\hat{H} |\Psi_{\vec{k}_f}\rangle = E |\Psi_{\vec{k}_f}\rangle$$

$|\Psi_{\vec{k}_f}\rangle$ est associé à la fonction d'onde diffusée qui a le comportement asymptotique suivant :

$$|\Psi_{\vec{k}_f}\rangle = |\vec{k}_0\rangle + |\chi\rangle \quad (3.1)$$

où $|\chi\rangle$ représente la partie purement diffusée. On a une diffusion élastique, alors $E = E_0$ et donc $|\vec{k}_f\rangle = |\vec{k}_0\rangle$, $\|\vec{k}_f\| = \|\vec{k}_0\|$.

L'action de \hat{V} $|\Psi_{\vec{k}_f}\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{V} |\Psi_{\vec{k}_f}\rangle &= (\hat{H} - \hat{H}_0) |\Psi_{\vec{k}_f}\rangle \\ &= (E - \hat{H}_0) |\Psi_{\vec{k}_f}\rangle \\ &= (E_0 - \hat{H}_0) (|\vec{k}_0\rangle + |\chi\rangle) \\ &= (E_0 - \hat{H}_0) |\vec{k}_0\rangle + (E - \hat{H}_0) |\chi\rangle \\ &= (E_0 - \hat{H}_0) |\chi\rangle \end{aligned}$$

C'est une équation différentielle du second ordre.

Si l'on suppose que $(E_0 - \hat{H}_0)$ est inversible, on a :

$$|\chi\rangle = \frac{1}{E_0 - \hat{H}_0} \hat{V} |\Psi_{\vec{k}_f}\rangle \quad (3.2)$$

et on appelle opérateur de GREEN le rapport :

$$\hat{G}_0(E_0) = \frac{1}{E_0 - \hat{H}_0}$$

avec $E_0 > 0$: la particule incidente avec une énergie cinétique positive et elle est libre.

Donc l'équation (3.2) s'écrit :

$$|\chi\rangle = \hat{G}_0(E_0) \hat{V} |\Psi_{\vec{k}_f}\rangle$$

et en remplaçant dans l'équation (3.1), on a :

$$|\Psi_{\vec{k}_f}\rangle = |\vec{k}_0\rangle + \hat{G}_0(E_0)\hat{V}|\Psi_{\vec{k}_f}\rangle$$

C'est l'équation intégrale de diffusion en notation de DIRAC.

Multiplions cette expression par le bra $\langle \vec{r} |$ (projection dans l'espace des vecteurs positions).

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \Psi_{\vec{k}_f} \rangle &= \langle \vec{r} | \vec{k}_0 \rangle + \langle \vec{r} | \hat{G}_0(E_0) \hat{V} | \Psi_{\vec{k}_f} \rangle \\ &= \langle \vec{r} | \vec{k}_0 \rangle + \iint \langle \vec{r} | \hat{G}_0(E_0) | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \hat{V} | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \Psi_{\vec{k}_f} \rangle d^3r' d^3r'' \end{aligned}$$

On sait que :

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \Psi_{\vec{k}_f} \rangle &= \Psi_{\vec{k}_f}(\vec{r}) \\ \langle \vec{r} | \vec{k}_0 \rangle &= \frac{e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \end{aligned}$$

On notera :

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \hat{G}_0(E_0) | \vec{r}' \rangle &= G_0(\vec{r}, \vec{r}'; E_0) \\ \langle \vec{r}' | \hat{V} | \vec{r}'' \rangle &= V(\vec{r}', \vec{r}'') \end{aligned}$$

On a alors :

$$\Psi_{\vec{k}_f}(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} + \iint G_0(\vec{r}, \vec{r}'; E_0) V(\vec{r}', \vec{r}'') \Psi_{\vec{k}_f}(\vec{r}'') d^3r' d^3r'' \quad (3.3)$$

- $\hat{V}^\dagger = \hat{V}$ potentiel réel $\implies \langle \vec{r}' | \hat{V} | \vec{r}'' \rangle = \langle \vec{r}'' | \hat{V} | \vec{r}' \rangle$,
 $V(\vec{r}', \vec{r}'') = V(\vec{r}'', \vec{r}')$ potentiel symétrique en \vec{r}' et \vec{r}'' .
- Potentiel séparable : $V(\vec{r}', \vec{r}'') = v(\vec{r}')v(\vec{r}'')$ (la même fonction car V est symétrique).
- Un potentiel local est défini par : $V(\vec{r}', \vec{r}'') = V(\vec{r}')\delta(\vec{r}' - \vec{r}'')$

3.2 Fonction de GREEN

On appelle fonction de GREEN de diffusion $G_0(\vec{r}, \vec{r}'; E_0)$ l'élément de la matrice $\langle \vec{r} | \hat{G}_0(E_0) | \vec{r}' \rangle$ de l'opérateur de GREEN $\hat{G}_0(E_0)$.

3.2.1 Calcul de $G_0(\vec{r}, \vec{r}'; E_0)$

$$\hat{G}_0(E_0) = \frac{1 \times \hat{1}}{E_0 - \hat{H}_0}, \quad \hat{1} = \int |\vec{k}\rangle \langle \vec{k}| d^3k$$

Où $|\vec{k}\rangle$ est un ket propre de \hat{H}_0

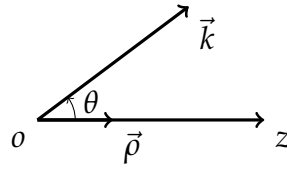
$$\hat{H}_0 |\vec{k}\rangle = E |\vec{k}\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |\vec{k}\rangle$$

$$\hat{G}_0(E_0) = \int \frac{|\vec{k}\rangle \langle \vec{k}|}{E_0 - E_k} d^3k = \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{|\vec{k}\rangle \langle \vec{k}|}{k_0^2 - k^2} d^3k$$

$$\begin{aligned} G_0(\vec{r}, \vec{r}'; E_0) &= \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \vec{r}' \rangle}{k_0^2 - k^2} d^3k \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'}}{k_0^2 - k^2} d^3k \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{k_0^2 - k^2} d^3k \end{aligned}$$

On montre que $G_0(\vec{r}, \vec{r}'; E_0) = G_0(\vec{r} - \vec{r}'; E_0)$ n'est qu'une fonction de $\vec{r} - \vec{r}'$.

On pose $\vec{\rho} = \vec{r} - \vec{r}'$ et choisissons $\vec{\rho}$ le long de l'axe oz et on utilise les coordonnées sphériques :



$$\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') = \vec{k} \cdot \vec{\rho} = k\rho \cos \theta$$

$$d^3k = k^2 \sin \theta \, dk \, d\theta \, d\phi$$

$$G_0(\rho; E_0) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{k^2}{k_0^2 - k^2} \, dk \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi e^{ik\rho \cos \theta} \sin \theta \, d\theta$$

Posons $u = \cos \theta$, $du = -\sin \theta \, d\theta$

$$\begin{aligned} \int_0^\pi e^{ik\rho \cos \theta} \sin \theta \, d\theta &= \int_{-1}^1 e^{ik\rho u} \, du \\ &= \frac{1}{ik\rho} \left[e^{ik\rho u} \right]_{-1}^{+1} \\ &= \frac{1}{ik\rho} \left[e^{ik\rho} - e^{-ik\rho} \right] \\ &= \frac{2}{k\rho} \left[\frac{e^{ik\rho} - e^{-ik\rho}}{2i} \right] \end{aligned}$$

$$\int_0^\pi e^{ik\rho \cos \theta} \sin \theta \, d\theta = 2 \frac{\sin k\rho}{k\rho}$$

On a alors :

$$\begin{aligned}
 G_0(\rho; E_0) &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{\rho} \int_0^{\infty} \underbrace{\frac{k \sin k\rho}{k_0^2 - k^2}}_{\text{pair}} dk \\
 &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{\rho} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k \sin k\rho}{k_0^2 - k^2} dk \\
 &= \frac{m}{2\rho\pi^2\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k \sin k\rho}{k_0^2 - k^2} dk \\
 &= \frac{m}{2\rho\pi^2\hbar^2} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ke^{ik\rho}}{k_0^2 - k^2} dk
 \end{aligned}$$

$$e^{ik\rho} = \cos k\rho + i \sin k\rho, \text{ or } \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ke^{ik\rho}}{k_0^2 - k^2} dk = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k \cos k\rho}{k_0^2 - k^2} dk = 0 \text{ alors :}$$

$$\operatorname{Im} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ke^{ik\rho}}{k_0^2 - k^2} dk = \frac{1}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ke^{ik\rho}}{k_0^2 - k^2} dk$$

$$\frac{k}{k_0^2 - k^2} = -\frac{k}{(k - k_0)(k + k_0)} = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{k - k_0} + \frac{1}{k + k_0} \right)$$

On trouve :

$$G_0(\rho; E_0) = -\frac{m}{4\rho\pi^2\hbar^2 i} \left[\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik\rho}}{k - k_0} dk}_{\mathbf{I}_1} + \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik\rho}}{k + k_0} dk}_{\mathbf{I}_2} \right]$$

Pour calculer les intégrales \mathbf{I}_1 et \mathbf{I}_2 , on utilisons le théorème des résidus¹,

1. Si $f(z) = \frac{P(z)}{Q(z)}$, alors :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(z) e^{iz} dz = 2\pi i \sum_{\alpha} \operatorname{Res}(f, z_{\alpha}) e^{iz_{\alpha}}, \quad z_{\alpha} \text{ sont les racines de } Q(z) \text{ et } \operatorname{Res}(f, z_{\alpha}) = \frac{P(z_{\alpha})}{Q'(z_{\alpha})}$$

on trouve :

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_1 &= 2\pi i e^{ik_0\rho} \\ \mathbf{I}_2 &= 2\pi i e^{-ik_0\rho} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_0(\rho; E_0) &= -\frac{m}{4\rho\pi^2\hbar^2 i} 2\pi i \left(e^{ik_0\rho} + e^{-ik_0\rho} \right) \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{1}{\rho} \left(\underbrace{e^{ik_0\rho}}_{\text{onde sortante}} + \underbrace{e^{-ik_0\rho}}_{\text{onde rentrante}} \right) \end{aligned}$$

D'où on définit :

$$G_0^\pm(\rho; E_0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{1}{\rho} e^{\pm ik_0\rho} \quad (3.4)$$

En remplaçant (3.4) dans (3.3), on obtient :

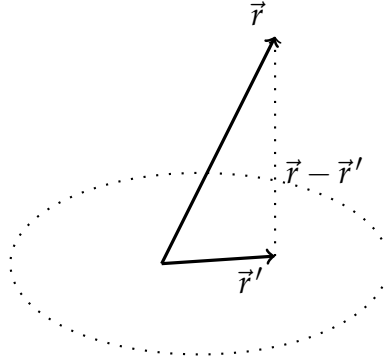
$$\begin{aligned} \Psi_{\vec{k}_f}^\pm(\vec{r}) &= \frac{e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \iint \frac{e^{\pm ik_0\rho}}{\rho} V(\vec{r}', \vec{r}'') \Psi_{\vec{k}_f}^\pm(\vec{r}'') d^3r' d^3r'' \\ \text{— } \rho &= \|\vec{r} - \vec{r}'\| \\ \text{— Si } V \text{ est local : } &V(\vec{r}', \vec{r}'') = V(\vec{r}')\delta(\vec{r}' - \vec{r}'') \end{aligned}$$

Dans ces conditions on a :

$$\Psi_{\vec{k}_f}^\pm(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{\pm ik_0\|\vec{r}-\vec{r}'\|}}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|} V(\vec{r}') \Psi_{\vec{k}_f}^\pm(\vec{r}') d^3r' \quad (3.5)$$

3.3 Amplitude de diffusion - Section efficace

Pour r grand, r' petit (si r' est grand $\implies V(\vec{r}') = 0$).



Zone d'action du potentiel

$$\begin{aligned}
 \|\vec{r} - \vec{r}'\| &= \sqrt{r^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r}' + r'^2} \\
 &= r \sqrt{1 + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 - 2\frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2}} \\
 &\approx r \sqrt{1 - 2\frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2}} \\
 &\approx r \left(1 - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2}\right)
 \end{aligned}$$

- $\frac{\vec{r}}{r} = \vec{u}_r$: vecteur unitaire de la particule diffusée.
- $\|\vec{k}_f\| = \|\vec{k}_0\|$: diffusion élastique.

D'où :

$$k_0 \|\vec{r} - \vec{r}'\| = k_0 r - k_0 \vec{u}_r \cdot \vec{r}' = k_0 r - k_f \vec{u}_r \cdot \vec{r}'$$

En remplaçant ceci dans l'équation (3.5), on obtient :

$$\Psi_{\vec{k}_f}^{\pm}(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm i k_0 r}}{r} \int e^{\mp i k_f \vec{u}_r \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi_{\vec{k}_f}^{\pm}(\vec{r}') d^3 r'$$

Dans ce problème, on ne s'intéresse qu'à l'onde divergente (l'onde sortante $\Psi_{\vec{k}_f}^{+}(\vec{r})$) (Pour qu'il y ait effectivement diffusion).

$$\Psi_{\vec{k}_f}^+(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_0 r}}{r} \int e^{-ik_f \vec{u}_r \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi_{\vec{k}_f}^+(\vec{r}') d^3 r'$$

En comparant cette expression à l'expression asymptotique de $\Psi_{\vec{k}_f}(\vec{r})$:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi_{\vec{k}_f}(\vec{r}) \sim \frac{e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} + \frac{f_{\vec{k}_f}(\theta, \phi)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{e^{ik_f r}}{r}$$

On obtient l'amplitude de diffusion :

$$f_{\vec{k}_f}(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^{\frac{3}{2}} \int e^{-ik_f \vec{u}_r \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi_{\vec{k}_f}^+(\vec{r}') d^3 r'$$

aussi, les solutions $\Psi_{\vec{k}_f}^+(\vec{r})$ de l'équation intégrale de diffusion sont bien des états stationnaires de diffusion.

$f_{\vec{k}_f}(\theta, \phi)$ peut aussi s'écrire en notation de DIRAC :

$$f_{\vec{k}_f}(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \left\langle \vec{k}_f \left| \hat{V} \right| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$$

et on a la section efficace différentielle :

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} = \left| f_{\vec{k}_f}(\theta, \phi) \right|^2$$

3.4 Approximation de BORN

On a déjà vu que :

$$\left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle = \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$$

On réécrit $\left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$ en utilisant sa propre équation :

$$\begin{aligned}
 \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle &= \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \left(\left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle \right) \\
 &= \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle \\
 &= \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \dots
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

La méthode consiste à remplacer dans le second membre l'équation intégrale $\left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$ par son expression initiale, et on répétera cette opération, chaque fois que $\left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$ apparaîtra. On obtient une série infinie (appelée série de BORN).

De même, on aura pour l'amplitude de diffusion :

$$\begin{aligned}
 f_{\vec{k}_f}(\theta, \phi) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \left\langle \vec{k}_f \right| \hat{V} \left(\left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \dots \right) \\
 &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \left(\left\langle \vec{k}_f \right| \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \left\langle \vec{k}_f \right| \hat{V} \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \dots \right)
 \end{aligned}$$

Dans l'approximation de BORN, on remplace $\left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$ par $\left| \vec{k}_0 \right\rangle$:

$$\begin{aligned}
 f_{\vec{k}_f}^B(\theta, \phi) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \left\langle \vec{k}_f \right| \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle \\
 &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \left\langle \vec{k}_f \right| \hat{\mathbf{l}} \times \hat{V} \times \hat{\mathbf{l}} \left| \vec{k}_0 \right\rangle \\
 &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \iint \left\langle \vec{k}_f \right| \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \hat{V} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \vec{k}_0 \rangle d^3r d^3r' \\
 &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \iint \frac{e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}'}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} V(\vec{r}, \vec{r}') d^3r d^3r'
 \end{aligned}$$

Pour V local $V(\vec{r}, \vec{r}') = V(\vec{r})\delta(\vec{r} - \vec{r}')$:

$$f_{\vec{k}_f}^B(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i(\vec{k}_f - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) d^3r$$

On pose $\vec{k}_f - \vec{k}_0 = \vec{q}$: impulsion de transfer

$$f_{\vec{k}_f}^{\mathcal{B}}(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) d^3r$$

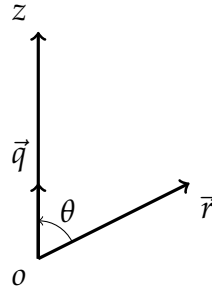
On peut donner une interprétation physique de la relation (3.6) qui souligne bien l'analogie entre la mécanique quantique et l'optique ondulatoire. En effet, si l'on considère la zone d'action du potentiel comme un milieu diffuseur, on constate que l'onde totale au point \vec{r} donnée par la formule (3.6) correspond à la superposition d'une onde incidente avec une infinité d'ondes provenant de sources secondaires induites dans le milieu diffuseur par l'onde incidente.

Remarque. L'approximation de BORN est valable quand le potentiel diffuseur est faible devant l'énergie cinétique de la particule.

3.5 Diffusion par un potentiel central

On a $V(\vec{r}) = V(r, \theta, \phi) = V(\|\vec{r}\|) = V(r)$ car on a une symétrie sphérique.

On choisit \vec{q} le long de l'axe oz et on utilise les coordonnées sphériques :



$$\vec{q} \cdot \vec{r} = qr \cos \theta$$

$$d^3r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

$$f_{\vec{k}_f}^{\mathcal{B}}(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty V(r) r^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi e^{-iqr \cos \theta} \sin \theta d\theta$$

avec :

$$\int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi, \quad \int_0^\pi e^{-iqr \cos \theta} \sin \theta d\theta = 2 \frac{\sin qr}{qr}$$

D'où :

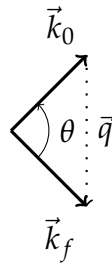
$$f_{\vec{k}_f}^{\mathcal{B}}(\theta, \phi) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty V(r) r \sin qr \, dr$$

Application.

— Potentiel de YUKAWA : $V(r) = V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{r} \quad (\alpha > 0)$

$$\begin{aligned} f_{\vec{k}_f}^{\mathcal{B}}(\theta, \phi) &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{q} \int_0^\infty e^{-\alpha r} \sin qr \, dr \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{q} \operatorname{Im} \int_0^\infty e^{(-\alpha + iq)r} \, dr \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{\alpha^2 + q^2} \end{aligned}$$

— Diffusion élastique :



$$\|\vec{k}_f\| = \|\vec{k}_0\| \implies q = 2k_0 \sin \frac{\theta}{2} \quad (\theta \text{ est l'angle de diffusion})$$

$$f_{\vec{k}_f}^{\mathcal{B}}(\theta, \phi) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{\alpha^2 + 4k_0^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

- Diffusion Coulombienne : $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$
 (Potentiel de YUKAWA pour $\alpha = 0$ et $V_0 = -Ze^2$)

$$f_{\vec{k}_f}^{\mathcal{B}}(\theta, \phi) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{Ze^2}{4k_0^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

on pose $k_0^2 = \frac{2mE_0}{\hbar^2}$:

$$f_{\vec{k}_f}^{\mathcal{B}}(\theta, \phi) = \frac{Ze^2}{4E_0 \sin^2 \frac{\theta}{2}}, \quad \frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{16E_0^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

C'est la formule de RUTHERFORD.

3.6 Équation de LIPPMANN-SCHWINGER

On a déjà trouvé l'équation intégrale :

$$\left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle = \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{G}_0^+(E_0) \hat{V} \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle, \quad \hat{G}_0^+(E_0) = \frac{1}{E_0 - \hat{H}_0}$$

Afin d'éviter les problèmes de singularité, on prend :

$$\begin{aligned} \hat{G}_0^+(E) &= \frac{1}{E_0 - \hat{H}_0 + i\varepsilon}, & \varepsilon \rightarrow 0 \\ &= \frac{1}{E - \hat{H}_0}, & E = E_0 + i\varepsilon \end{aligned}$$

Ce qui donne l'équation :

$$\left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle = \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{G}_0^+(E) \hat{V} \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$$

Connu par l'équation de LIPPMANN-SCHWINGER. Si on applique $E - \hat{H}_0$ à $\left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$, tel que :

$$\begin{aligned} (E - \hat{H}_0) \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle &= (E - \hat{H}_0) \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \underbrace{(E - \hat{H}_0) \hat{G}_0^+(E)}_{\hat{1}} \hat{V} \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle \\ &= (E - \hat{H}_0) \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{V} \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle \end{aligned}$$

On regroupe les termes en $\left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$:

$$\begin{aligned} (E - \hat{H}_0 - \hat{V}) \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle &= (E - \hat{H}_0) \left| \vec{k}_0 \right\rangle \\ &= (E - \hat{H}_0 - \hat{V}) \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle &= \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 - \hat{V}} \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle \\ &= \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \frac{1}{E_0 - \hat{H} + i\varepsilon} \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle, \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \end{aligned}$$

Cette dernière expression fait intervenir l'Hamiltonien avec interaction : $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$

Par conséquent, l'état stationnaire de diffusion $\left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$ qui satisfait l'équation de LIPPMANN-SCHWINGER vérifie aussi cette 2^{ème} forme.

3.6.1 Opérateur ou matrice de transition

On appelle \hat{T} l'opérateur de transition, l'opérateur vérifie la relation suivante :

$$\hat{T} \left| \vec{k}_0 \right\rangle = \hat{V} \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$$

En introduisant la 1^{ère} expression de $\left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$ dans le second membre :

$$\begin{aligned} \hat{T} \left| \vec{k}_0 \right\rangle &= \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{V} \hat{G}_0^+(E) \hat{V} \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle \\ &= \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{V} \hat{G}_0^+(E) \hat{T} \left| \vec{k}_0 \right\rangle \\ &= \left(\hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^+(E) \hat{T} \right) \left| \vec{k}_0 \right\rangle \end{aligned}$$

D'où $\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+(E)\hat{T}$, c'est la 3^{ème} forme de l'équation de LIPPMANN-SCHWINGER.

De même, en introduisant la 2^{ème} expression de $\left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$ dans le second membre :

$$\begin{aligned} \hat{T} \left| \vec{k}_0 \right\rangle &= \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle + \hat{V} \frac{1}{E_0 - \hat{H} + i\varepsilon} \hat{V} \left| \vec{k}_0 \right\rangle \\ &= \left(\hat{V} + \hat{V}\hat{G}^+(E)\hat{V} \right) \left| \vec{k}_0 \right\rangle, \quad \hat{G}^+(E) = \frac{1}{E_0 - \hat{H} + i\varepsilon} \end{aligned}$$

On obtient la 4^{ème} forme de l'équation de LIPPMANN-SCHWINGER, avec $\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}^+(E)\hat{V}$.

3.6.2 Développement de BORN

Le développement de BORN consiste à réinjecter l'expression de \hat{T} auto-cohérente un certain nombre de fois, on obtient donc successivement :

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+(E)\hat{T} \\ &= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+(E) \left(\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+(E)\hat{T} \right) \\ &= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+(E)\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+(E)\hat{V}\hat{G}_0^+(E)\hat{T} \\ &= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+(E)\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+(E)\hat{V}\hat{G}_0^+(E)\hat{V} + \dots \end{aligned}$$

Pour que la série converge vite, V doit être faible devant l'énergie initial E_0 ($V \ll E_0$).

3.6.3 L'amplitude de diffusion en fonction de \hat{T}

On a déjà trouvé :

$$f_{\vec{k}_f}(\theta, \phi) = -\frac{m}{\hbar^2}(2\pi)^2 \left\langle \vec{k}_f \left| \hat{V} \right| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$$

Or selon la définition de \hat{T} :

$$\hat{T} \left| \vec{k}_0 \right\rangle = \hat{V} \left| \Psi_{\vec{k}_f}^+ \right\rangle$$

Alors :

$$f_{\vec{k}_f}(\theta, \phi) = -\frac{m}{\hbar^2} (2\pi)^2 \left\langle \vec{k}_f \left| \hat{T} \right| \vec{k}_0 \right\rangle$$

au 1^{ère} ordre : $\hat{T} = \hat{V}$

$$\begin{aligned} f_{\vec{k}_f}^B(\theta, \phi) &= -\frac{m}{\hbar^2} (2\pi)^2 \left\langle \vec{k}_f \left| \hat{V} \right| \vec{k}_0 \right\rangle \\ &= -\frac{m}{\hbar^2} \frac{(2\pi)^2}{(2\pi)^3} \int e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} d^3r \\ &= -\frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \int e^{-i(\vec{k}_f - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) d^3r \end{aligned}$$

On pose $\vec{k}_f - \vec{k}_0 = \vec{q}$:

$$f_{\vec{k}_f}^B(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) d^3r$$

Dans le cas d'un potentiel central $V(\vec{r}) = V(r)$, on trouve :

$$\begin{aligned} f_{\vec{k}_f}^B(\theta, \phi) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty V(r) r^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi e^{-iqr \cos \theta} \sin \theta d\theta \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty V(r) r^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} e^{-iqr \cos \theta} d \cos \theta \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r) r^2 \frac{\sin qr}{qr} dr \end{aligned}$$

Si $q \rightarrow 0$, alors $\frac{\sin qr}{qr} \rightarrow 1$, d'où :

$$f_{\vec{k}_f}^B(\theta, \phi) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r) r^2 dr$$