Diffusion résonnante de deux fermions dans l'onde p

M2 de physique quantique 2010-2011

Examen de mécanique quantique

Y. Castin et A. Sinatra

On considère deux fermions dans le même état de spin, non relativistes et de masse m, subissant dans l'espace libre à trois dimensions une interaction à courte portée et invariante par rotation. On suppose que l'interaction est forte à basse énergie lorsque les fermions ont un moment cinétique relatif $l = 1$, alors qu'elle est négligeable pour les moments cinétiques $l \neq 1$: on parle d'interaction *résonnante* dans l'onde p. L'objectif du problème est d'étudier quantitativement l'amplitude de diffusion des deux fermions au voisinage d'une résonance de diffusion à énergie nulle.

Dans la première partie, qui ignore la nature fermionique des particules, on considère la situation modèle d'une onde plane diffusée par un potentiel $V(r)$ à support compact, et on établit pour l'onde p quelques propriétés de l'amplitude de diffusion et d'éventuels états liés de basse énergie. Dans la deuxième partie, qui prend en compte explicitement la nature fermionique des particules, on considère un modèle simple d'un cas réalisable expérimentalement avec des atomes froids, celui d'une résonance de Feshbach dans l'onde p. L'interaction entre fermions est alors décrite par un modèle à deux voies, écrit en seconde quantification sous la forme d'un couplage entre un champ fermionique et trois champs bosoniques.

Même si les deux parties sont largement indépendantes, il est conseillé de traiter les questions dans leur ordre d'apparition. Les notes prises lors des cours d'Y. Castin et des Travaux Dirigés d'A. Sinatra sont autorisées.

1 Diffusion par un potentiel dans l'onde p

On considère une onde de matière diffusée à trois dimensions par un potentiel $V(r)$, où r est le module du vecteur position $\vec{r}$. Le Hamiltonien de l'onde est donc représenté par l'opérateur

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} + V(r) \tag{1}$$

où $\Delta_{\vec{r}}$ est le Laplacien par rapport au vecteur $\vec{r}$ et μ la masse de la particule. On suppose que le potentiel diffuseur est à support compact, c'est-à-dire qu'il existe une longueur b, commodément appelée portée du potentiel, telle que

$$V(r) = 0 \quad \forall r \geq b. \tag{2}$$

1.1 États stationnaires de diffusion

On considère l'état stationnaire de diffusion d'énergie $E = \hbar^2 k^2/(2\mu)$, avec $k > 0$:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \psi_{\vec{k}}^{\mathrm{diff}}(\vec{r}), \tag{3}$$

somme de l'onde plane incidente (de vecteur d'onde $\vec{k}$) et de l'onde diffusée.

a) Rappeler la condition aux limites satisfaite par l'onde diffusée lorsque $r \to +\infty$. On introduira l'amplitude de diffusion $f_{\vec{k}}(\vec{n})$ définie en cours avec le vecteur unitaire

$$\vec{n} = \frac{\vec{r}}{r}. \tag{4}$$

b) On suppose que la diffusion se produit de façon significative seulement dans l'onde p, c'est-à-dire dans la composante de l'onde diffusée de moment cinétique $l = 1$. En utilisant une invariance par rotation que l'on précisera, montrer que l'onde diffusée s'écrit alors

$$\psi_{\vec{k}}^{\mathrm{diff}}(\vec{r}) = 3\vec{\kappa}\cdot\vec{n}\, F_k(r) \tag{5}$$

où la fonction inconnue $F_k(r)$ dépend seulement des modules des vecteurs $\vec{k}$ et $\vec{r}$, le facteur 3 est de pure commodité, et le vecteur unitaire $\vec{\kappa}$ vaut

$$\vec{\kappa} = \frac{\vec{k}}{k}. \tag{6}$$

On pourra utiliser la valeur de l'harmonique sphérique $Y_l^m(\theta,\phi)$ pour $l = 1$ et $m = 0$, $Y_1^0(\theta,\phi) = [3/(4\pi)]^{1/2}\cos\theta$, θ et ϕ étant les angles polaire et azimutal d'un système de coordonnées sphériques.

c) Montrer que l'on peut poser

$$f_{\vec{k}}(\vec{n}) = 3\vec{\kappa}\cdot\vec{n} f_k, \tag{7}$$

où la fonction f_k dépend seulement du module de $\vec{k}$ et constitue l'amplitude de diffusion dite *réduite*. Préciser, en termes de f_k, la condition aux limites satisfaite par $F_k(r)$ à grand r.

d) Écrire l'équation de Schrödinger satisfaite par $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ *en dehors* du potentiel, c'est-à-dire pour $r \geq b$. En déduire une équation différentielle ordinaire satisfaite par $F_k(r)$ pour $r \geq b$. On rappelle qu'en coordonnées sphériques, $\Delta_{\vec{r}}[f(r)Y_l^m(\theta,\phi)] = \left[\frac{d^2}{dr^2}f(r) + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}f(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}f(r)\right] Y_l^m(\theta,\phi)$, ce qui fait apparaître le terme centrifuge en $1/r^2$ associé au moment cinétique l.

e) On introduit comme intermédiaire de calcul la primitive $\mathcal{F}_k(r)$ de $F_k(r)$ s'annulant à l'infini. On a donc en particulier $F_k(r) = \frac{d}{dr}\mathcal{F}_k(r)$. En intégrant une fois sur r l'équation différentielle satisfaite par $F_k(r)$, montrer qu'on obtient une équation différentielle de type Schrödinger sur $\mathcal{F}_k(r)$ et ne comportant pas de terme centrifuge.

f) Avec le changement de fonction radiale habituel en dimension trois, et compte tenu des conditions aux limites imposées, résoudre explicitement l'équation différentielle sur $\mathcal{F}_k(r)$ pour $r \geq b$. En déduire le résultat

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,) \underset{r\geq b}{=} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + 3\vec{\kappa}\cdot\vec{n} f_k \frac{d}{dr}\left(\frac{e^{ikr}}{ikr}\right). \tag{8}$$

1.2 Amplitude de diffusion

a) On rappelle que le théorème optique impose à l'amplitude de diffusion la relation

$$k\int \frac{d\Omega_{\vec{n}}}{4\pi}|f_{\vec{k}}(\vec{n}\,)|^2 = \mathrm{Im}\, f_{\vec{k}}(\vec{\kappa}\,) \tag{9}$$

où $d\Omega_{\vec{n}}$ est l'élément d'angle solide autour de la direction $\vec{n}$. En déduire une relation satisfaite par l'amplitude de diffusion réduite f_k, reliant sa partie imaginaire à son module au carré.

b) En déduire que l'amplitude de diffusion réduite peut être mise sous la forme

$$f_k = -\frac{1}{ik + u(k)} \tag{10}$$

où la fonction inconnue $u(k)$ est réelle.

c) Dans la suite, on supposera que $u(k)$ admet un développement en puissances de k autour de $k = 0$, avec seulement des puissances *paires* de k. Montrer alors qu'il est naturel de prolonger la fonction f_k aux réels négatifs de façon que

$$f_{-k} = f_k^*. \tag{11}$$

d) On considère le cas limite de basse énergie. On fait tendre k vers zéro à position *fixée* $\vec{r}$, $r \geq b$, dans la fonction d'onde Eq.(8) de l'état stationnaire de diffusion. Montrer que la composante de moment cinétique $l = 1$ de l'onde plane incidente tend vers zéro linéairement en k.

e) En général, l'onde diffusée va donc aussi tendre vers zéro linéairement en k. En déduire que l'amplitude de diffusion réduite s'annule en général quadratiquement en k :

$$\lim_{k\to 0}\frac{f_k}{k^2} = -\mathcal{V}. \tag{12}$$

f) En utilisant une analogie avec l'onde s, justifier l'appellation *volume de diffusion* pour $\mathcal{V}$. Dans la suite, on supposera que la fonction $u(k)$ admet le développement

$$u(k) \underset{k\to 0}{=} \frac{1}{k^2\mathcal{V}} + \alpha + O(k^2 b). \tag{13}$$

Quelle dimension a la quantité α ?

1.3 États liés

On considère (s'ils existent) les états liés de moment cinétique $l = 1$ de l'onde dans le potentiel $V(r)$, d'énergies $E_n = -\hbar^2 q_n^2/(2\mu)$, avec q_n positif. n est un nombre quantique numérotant le spectre discret de H. On rappelle qu'on peut prolonger analytiquement la fonction f_k aux valeurs de k complexes, avec $\mathrm{Im}\, k > 0$, et que les énergies des états liés sont en correspondance avec des pôles simples de l'amplitude de diffusion réduite ainsi prolongée :

$$\frac{1}{f_{iq_n}} = 0. \tag{14}$$

De façon remarquable, on va montrer que des facteurs de normalisation apparaissant dans la fonction d'onde des états liés se déduisent aussi du prolongement de f_k.

a) En général, quelle est la dégénérescence de l'état lié d'énergie E_n ? Expliquer brièvement pourquoi on peut alors prendre comme base du sous-espace propre d'énergie E_n des fonctions d'onde de la forme

$$\phi_{n,\gamma}(\vec{r}) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \vec{n} \cdot \vec{e}_\gamma \, \Phi_n(r), \quad \gamma \in \{x, y, z\} \tag{15}$$

où la fonction inconnue $\Phi_n(r)$ est invariante par rotation, les vecteurs unitaires $\vec{e}_\gamma$ forment une base orthonormale $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ de l'espace réel, et $\vec{n} = \vec{r}/r$ [voir Eq.(4)].

b) En indiquant brièvement comment les calculs ayant abouti à Eq.(8) se transposent au cas d'un état lié, conclure que

$$\Phi_n(r) \underset{r \geq b}{=} \mathcal{N}_n \frac{d}{dr}\left(\frac{e^{-q_n r}}{r}\right), \tag{16}$$

où le facteur de normalisation $\mathcal{N}_n$, tel que chaque fonction d'onde $\phi_{n,\gamma}(\vec{r})$ soit normalisée à l'unité, est pris réel positif.

c) Pour déterminer $\mathcal{N}_n$, on utilise la relation de fermeture

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}_1)\psi^*_{\vec{k}}(\vec{r}_2) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) - \sum_{n,\gamma} \phi_{n,\gamma}(\vec{r}_1)\phi_{n,\gamma}(\vec{r}_2), \tag{17}$$

où $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ sont des positions fixées quelconques. Montrer que

$$\sum_{n,\gamma} \phi_{n,\gamma}(\vec{r}_1)\phi_{n,\gamma}(\vec{r}_2) = \frac{3\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2}{4\pi} \sum_n \Phi_n(r_1)\Phi_n(r_2), \tag{18}$$

avec les vecteurs unitaires $\vec{n}_1 = \vec{r}_1/r_1$ et $\vec{n}_2 = \vec{r}_2/r_2$.

d) On spécialise ces relations au cas où $r_1 \geq b$ et $r_2 \geq b$, si bien que les dépendances en position des fonctions d'onde sont explicitement connues. Les calculs, assez longs et sans grand intérêt, ne sont pas demandés ici. On admet donc qu'en calculant explicitement les intégrales angulaires en coordonnées sphériques, et qu'en éliminant $|f_k|^2$ au profit de f_k et f_k^* à l'aide du théorème optique Eq.(9), on obtient

$$\sum_n \Phi_n(r_1)\Phi_n(r_2) = \int_0^{+\infty} \frac{dk}{2i\pi} 2k \left[f_k \frac{d}{dr_1}\left(\frac{e^{ikr_1}}{ikr_1}\right) \frac{d}{dr_2}\left(\frac{e^{ikr_2}}{ikr_2}\right) - \text{c.c.}\right] \tag{19}$$

où c.c. signifie *complexe conjugué* comme d'habitude. À l'aide du prolongement Eq.(11), montrer que l'intégrale ci-dessus, sur k allant de 0 à $+\infty$, peut être transformée en une intégrale sur k allant de $-\infty$ à $+\infty$ d'un intégrand plus simple.

e) Calculer l'intégrale correspondante en utilisant le théorème des résidus sur un contour d'intégration comportant un demi-cercle que l'on précisera. En déduire que

$$\mathcal{N}_n^2 = \text{Rés}[-2f_k/k, k = iq_n] \tag{20}$$

où $\text{Rés}[f(z), z = z_0]$ est le résidu de la fonction $f(z)$ au point $z = z_0$ dans le plan complexe. Par calcul du résidu sur la forme Eq.(10), établir alors la relation exacte

$$\mathcal{N}_n^2 = \frac{-2}{q_n[1 - iu'(iq_n)]}. \tag{21}$$

f) On applique les résultats précédents au cas fortement résonnant, $|\mathcal{V}| \to +\infty$, en pratique $|\mathcal{V}| \gg b^3$: on parle de résonance de diffusion à énergie nulle. On suppose que le paramètre α dans le développement Eq.(13) admet une limite finie et non nulle à la résonance :

$$\alpha \underset{|\mathcal{V}|\to+\infty}{\longrightarrow} \alpha_{\text{res}}. \tag{22}$$

À l'aide de la propriété Eq.(14) et du développement Eq.(13), vérifier qu'il existe alors, du côté de la résonance où $\alpha_{\text{res}}\mathcal{V}$ est positif, un état (pris de nombre quantique $n = 0$) faiblement lié, c'est-à-dire tel que $q_0 b \ll 1$. On doit trouver que

$$q_0 \simeq \frac{1}{(\alpha_{\text{res}}\mathcal{V})^{1/2}}. \tag{23}$$

Puis, en passant à la limite $q_0 \to 0$ dans Eq.(21), montrer qu'à la résonance, on a

$$(\mathcal{N}_0^{\text{res}})^2 = \frac{1}{\alpha_{\text{res}}}, \tag{24}$$

ce qui prouve donc que α_{res} est positif. De quel côté de la résonance se trouve l'état faiblement lié ?

g) En passant à la limite $\mathcal{V} \to +\infty$ dans l'expression Eq.(16), donner l'expression explicite à la résonance des fonctions d'onde $\phi_{0,\gamma}(\vec{r})$ en dehors du potentiel, en fonction de r, $\vec{n}$, $\vec{e}_\gamma$ et α_{res}.

h) Expliquer pourquoi l'inégalité suivante est satisfaite par la fonction d'onde $\phi_{0,\gamma}(\vec{r})$ de l'état lié :

$$\int_{r>b} d^3r |\phi_{0,\gamma}(\vec{r})|^2 \leq 1. \tag{25}$$

Calculer explicitement cette intégrale à la résonance, en utilisant un système de coordonnées sphériques bien choisi, et en déduire que

$$\alpha_{\mathrm{res}} b \geq 1. \tag{26}$$

i) On ajuste le potentiel $V(r)$ pour que la portée b tende vers zéro à valeur fixée du volume de diffusion $\mathcal{V}$. Compte tenu de Eq.(13), montrer que $f_k \to 0$ à k fixé. Cette limite est-elle atteinte uniformément en k lorsque $\mathcal{V} < 0$?

j) Comparer au cas de la diffusion dans l'onde s.

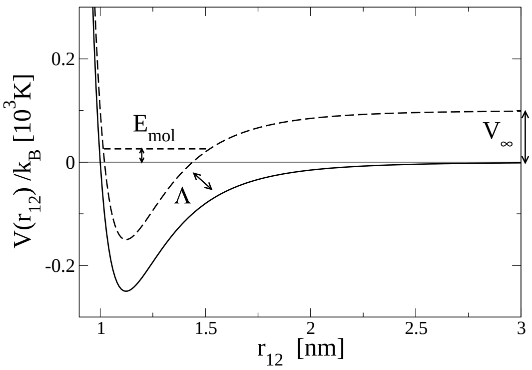
2 Résonance de Feshbach dans l'onde p

On considère dans cette partie un modèle assez réaliste d'une résonance de Feshbach dans l'onde p entre deux atomes fermioniques dans le même état de spin et de masse m.

Les atomes ayant une structure interne de spin électronique et nucléaire, leur interaction (par exemple dans l'approximation de Born-Oppenheimer) est en fait décrite par *plusieurs* courbes de potentiel, chaque courbe constituant ce que l'on appelle une *voie*. On suppose qu'on se trouve dans le cas représenté sur la Figure de deux courbes de potentiel (cas à deux voies), une courbe (voie inférieure) tendant conventionnellement vers zéro à grande distance interatomique ($r_{12} \to +\infty$), l'autre courbe (voie supérieure) tendant vers une valeur V_∞ strictement positive. On considère ici deux atomes d'états internes préparés dans la voie inférieure et diffusant l'un sur l'autre avec une énergie $E \ll V_\infty$ dans le référentiel du centre de masse. À cause de l'existence d'un couplage Λ entre les deux voies, les atomes peuvent explorer la voie supérieure lorsqu'ils sont à courte distance. À grande distance, la conservation de l'énergie empêche les atomes de sortir par la voie supérieure (dite *fermée*), les atomes sortent donc par la voie inférieure (dite *ouverte*).

En l'absence de couplage Λ, il existe un état lié à deux corps (dit état moléculaire, ou *molécule*) pour les atomes dans la voie fermée, son énergie est E_{mol}, et son moment cinétique interne est $S = 1$. Expérimentalement, on peut déplacer les deux courbes de potentiel l'une par rapport à l'autre le long de l'axe des énergies, en appliquant un champ magnétique induisant un effet Zeeman différentiel entre les deux voies. On peut alors s'arranger pour que E_{mol} soit proche de zéro, donc de la limite de dissociation de la voie ouverte, ce qui, en présence du couplage Λ, va conduire à une diffusion résonnante des deux atomes dans la voie ouverte. Comme la molécule est de moment cinétique interne $S = 1$, cette résonance a lieu dans l'onde p.

Mécanisme de la résonance de Feshbach entre deux atomes dans l'onde p. Suivant leurs états internes, les atomes interagissent par deux courbes de potentiel représentées schématiquement en fonction de la distance interatomique r_{12}, la voie ouverte (trait continu) et la voie fermée (trait tireté). Si l'on oublie le couplage Λ entre les deux voies, la voie fermée possède un état lié moléculaire d'énergie E_{mol} et de moment cinétique interne $S = 1$. En présence du couplage, cet état moléculaire, d'énergie convenablement ajustée par un champ magnétique, déclenche une diffusion résonnante dans l'onde p dans la voie ouverte.



Pour simplifier encore, on retient la molécule comme seul état quantique du mouvement relatif des deux atomes dans la voie fermée. Cette molécule étant composée de deux atomes fermioniques, on la traite comme un boson, avec un indice de dégénérescence $\gamma \in \{x, y, z\}$ associé au moment cinétique interne $S = 1$. En seconde quantification, ceci conduit à trois champs bosoniques. Dans la voie ouverte, les atomes sont traités comme des fermions sans spin, décrits par un champ fermionique, et l'on y néglige leur interaction directe supposée non résonnante. L'interaction entre fermions est donc *indirecte*, médiée par le couplage entre les deux voies, c'est-à-dire par le couplage aux champs bosoniques.

Soit donc le Hamiltonien modèle en seconde quantification en point de vue impulsion :

$$\begin{aligned} H &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \left(E_{\rm mol} + \frac{\hbar^2 k^2}{4m} \right) \sum_\gamma b^\dagger_{\gamma,\vec{k}} b_{\gamma,\vec{k}} \right] \\ &+ \Lambda \int \frac{d^3k_1 d^3k_2}{(2\pi)^6} \left[\sum_\gamma \chi_\gamma \left(\frac{\vec{k}_1 - \vec{k}_2}{2} \right) b^\dagger_{\gamma,\vec{k}_1+\vec{k}_2} a_{\vec{k}_1} a_{\vec{k}_2} + \text{h.c.} \right]. \end{aligned} \tag{27}$$

Comme d'habitude, h.c. signifie *hermitien conjugué*. Les opérateurs de création et d'annihilation $a^\dagger_{\vec{k}}$ et $a_{\vec{k}}$ d'un atome de vecteur d'onde $\vec{k}$ dans la voie ouverte obéissent aux relations d'anticommutation fermioniques, par exemple

$$\{a_{\vec{k}_1}, a^\dagger_{\vec{k}_2}\} = (2\pi)^3 \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2). \tag{28}$$

Les opérateurs de création et d'annihilation $b^\dagger_{\gamma,\vec{k}}$ et $b_{\gamma,\vec{k}}$ d'une molécule, d'état interne γ et de centre de masse de vecteur d'onde $\vec{k}$ dans la voie fermée, obéissent aux relations de commutation bosoniques, par exemple

$$[b_{\gamma_1,\vec{k}_1}, b^\dagger_{\gamma_2,\vec{k}_2}] = \delta_{\gamma_1\gamma_2} (2\pi)^3 \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2). \tag{29}$$

Par ailleurs, les opérateurs fermioniques a et $a^\dagger$ commutent avec les opérateurs bosoniques b et $b^\dagger$. Le terme de couplage entre les champs bosoniques et fermionique correspond à une conversion cohérente de deux atomes de la voie ouverte en une molécule de la voie fermée, et *vice-versa*, avec une amplitude dépendant du paramètre réel Λ et des fonctions de coupure réelles $\chi_\gamma(\vec{k}\,)$, évaluées au vecteur d'onde relatif $(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)/2$ des deux atomes (de façon à préserver l'invariance galiléenne). Ces fonctions de coupure sont de moment cinétique $l = 1$, elles sont impaires sous l'échange $\vec{k} \leftrightarrow -\vec{k}$; plus précisément $\chi_\gamma(\vec{k})$ est impaire selon la direction γ et paire selon les directions orthogonales à γ. Au moment de faire des calculs explicites, on prendra ces fonctions de la forme

$$\chi_\gamma(\vec{k}) = k_\gamma e^{-k^2 b^2/2}, \quad \forall \gamma \in \{x, y, z\}, \tag{30}$$

où k_γ est la composante du vecteur $\vec{k}$ selon la direction γ. La longueur b est de l'ordre du rayon de la molécule dans la voie fermée.

a) On souhaite déterminer l'état stationnaire de diffusion de deux fermions. Expliquer pourquoi on peut utiliser l'ansatz

$$|\Psi\rangle = \sum_\gamma \beta_\gamma b^\dagger_{\gamma,\vec{0}} |0\rangle + \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A(\vec{k}) a^\dagger_{\vec{k}} a^\dagger_{-\vec{k}} |0\rangle, \tag{31}$$

où $|0\rangle$ est l'état vide, et les trois coefficients β_γ et la fonction quelconque $A(\vec{k})$ sont à déterminer.

b) On appelle $E > 0$ l'énergie de l'état stationnaire de diffusion. En projetant l'équation de Schrödinger $(E - H)|\Psi\rangle = 0$ sur le sous-espace à un boson et zéro fermion (on pourra appeler P_{mol} le projecteur correspondant), montrer que

$$(E - E_{\mathrm{mol}})\beta_\gamma + 2\Lambda \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A(\vec{k})\chi_\gamma(\vec{k}) = 0, \quad \forall\gamma \in \{x, y, z\}. \tag{32}$$

c) Projeter l'équation de Schrödinger $(E - H)|\Psi\rangle = 0$ sur le sous-espace à zéro boson et deux fermions (on pourra appeler P_{at} le projecteur correspondant). Montrer que cette équation projetée est satisfaite si l'on impose

$$\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{m}\right) A(\vec{k}) + \Lambda \sum_\gamma \chi_\gamma(\vec{k})\beta_\gamma = 0. \tag{33}$$

d) On considère la diffusion d'un fermion de vecteur d'onde initial $\vec{k}_0$ sur un fermion de vecteur d'onde initial $-\vec{k}_0$. Exprimer E en fonction du module k_0 et de la masse m. Justifier soigneusement la forme de la solution que l'on choisit pour Eq.(33) :

$$A(\vec{k}) = (2\pi)^3\delta(\vec{k} - \vec{k}_0) - \frac{\Lambda \sum_\gamma \chi_\gamma(\vec{k})\beta_\gamma}{E + i\eta - \frac{\hbar^2 k^2}{m}}, \tag{34}$$

avec $\eta \to 0^+$.

e) On rappelle que, dans la théorie de la diffusion d'une onde de matière sur un potentiel V, l'état stationnaire de diffusion d'énergie E s'écrit $[1 + G_0(E + i\eta)T(E + i\eta)]|\vec{k}_0\rangle$, où G_0 est la résolvante de l'opérateur énergie cinétique, T est la matrice T, $|\vec{k}_0\rangle$ représente l'onde plane incidente. On rappelle aussi que, dans ce cas, l'amplitude de diffusion dans la direction du vecteur unitaire $\vec{n}$ se déduit de la matrice T par

$$f_{\vec{k}_0}(\vec{n}\,) = -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2}\langle k_0\vec{n}\,|T(E + i\eta)|\vec{k}_0\rangle \tag{35}$$

où μ est la masse de la particule associée à l'onde de matière. Lorsqu'on fait le lien entre ce formalisme et le modèle à deux voies, montrer qu'on est conduit à définir l'amplitude de diffusion d'un fermion sur l'autre dans la direction $\vec{n}$ par la relation :

$$f_{\vec{k}_0}(\vec{n}\,) = \frac{m\Lambda}{4\pi\hbar^2} \sum_\gamma \chi_\gamma(k_0\vec{n}\,)\beta_\gamma. \tag{36}$$

f) En reportant l'expression Eq.(34) de la fonction A dans Eq.(32), et en utilisant la forme Eq.(30) des fonctions χ_γ, donner l'expression de chaque coefficient β_γ en fonction de $E - E_{\mathrm{mol}}$, Λ, b, k_0, de la composante $k_{0,\gamma}$ du vecteur $\vec{k}_0$ selon la direction γ, et de l'intégrale suivante que l'on ne cherchera pas à calculer :

$$I = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k^2 e^{-k^2 b^2}}{E + i\eta - \frac{\hbar^2 k^2}{m}}. \tag{37}$$

g) Pour ces valeurs des coefficients β_γ, vérifier que l'amplitude de diffusion $f_{\vec{k}_0}(\vec{n}\,)$ est bien de la forme Eq.(7), où $\vec{\kappa}$ est maintenant la direction $\vec{k}_0/k_0$ du vecteur $\vec{k}_0$. Donner l'expression de l'amplitude de diffusion réduite f_{k_0} en fonction de m, Λ, $\hbar$, k_0, b, $E - E_{\mathrm{mol}}$ et de l'intégrale I.

h) En utilisant la relation au sens des distributions

$$\frac{1}{x + i\eta} = \mathcal{PP}\,\frac{1}{x} - i\pi\delta(x), \tag{38}$$

où x est une variable réelle, calculer explicitement la valeur de la partie imaginaire de I. On doit trouver alors que f_{k_0} est effectivement de la forme Eq.(10), c'est-à-dire que $\mathrm{Im}\,(1/f_{k_0}) = -k_0$.

i) On admet qu'on sait exprimer l'intégrale I en termes de la fonction erreur, ce qui permet de calculer le volume de diffusion $\mathcal{V}$ et la quantité α définis par Eq.(13) :

$$\frac{1}{\mathcal{V}} = \frac{1}{2\pi^{1/2}b^3} - \frac{6\pi\hbar^2}{m\Lambda^2}E_{\mathrm{mol}} \tag{39}$$

$$\alpha = \frac{b^2}{\mathcal{V}} + \frac{1}{\pi^{1/2}b} + \frac{6\pi\hbar^4}{m^2\Lambda^2}. \tag{40}$$

Pour quelle valeur $E_{\mathrm{mol}}^{\mathrm{res}}$ de E_{mol} se produit la résonance $1/\mathcal{V} = 0$? Cette valeur coïncide-t-elle avec la valeur attendue naïvement et que l'on précisera ? Donner une explication physique de ce fait.

j) Le modèle à une voie de la partie 1 prédit, en fonction de la portée du potentiel, une borne inférieure sur α_{res}, valeur de α à la résonance, voir Eq.(26). Cette prédiction reste-t-elle pertinente dans le cas présent d'une résonance de Feshbach ?

k) On considère maintenant une observable sans équivalent dans le modèle à une voie de la partie 1. On se place au voisinage de la résonance de Feshbach, du côté $\mathcal{V} > 0$, pour lequel existe un état faiblement lié entre les deux atomes, d'énergie $E_0 \simeq -\hbar^2/(m\alpha_{\mathrm{res}}\mathcal{V})$ [voir Eq.(23)]. Cet état peuple les deux voies de façon cohérente, la voie fermée avec la probabilité p_{ferm} et la voie ouverte avec la probabilité $1 - p_{\mathrm{ferm}}$. On rappelle le théorème de Hellmann-Feynman : *Soit un Hamiltonien autoadjoint $H(\lambda)$ dépendant de façon continue et dérivable du paramètre réel λ. On considère, dans le spectre discret de $H(\lambda)$, une valeur propre $E(\lambda)$ d'état propre associé $|\phi(\lambda)\rangle$ normalisé à l'unité et également fonction continue et dérivable de λ. Alors*

$$\frac{d}{d\lambda}E(\lambda) = \langle\phi(\lambda)|\left[\frac{d}{d\lambda}H(\lambda)\right]|\phi(\lambda)\rangle. \tag{41}$$

En utilisant ce théorème, montrer que

$$\frac{dE_0}{dE_{\mathrm{mol}}} = p_{\mathrm{ferm}} \tag{42}$$

où la dérivée est prise en gardant les paramètres du Hamiltonien autres que E_{mol} fixés.

l) En déduire qu'à la résonance,

$$p_{\mathrm{ferm}} = 1 - \frac{1}{\pi^{1/2}\alpha_{\mathrm{res}} b}. \tag{43}$$

Pour quelle valeur limite du couplage Λ entre les deux voies peut-on espérer qu'un modèle à une voie comme dans la partie 1 soit une bonne approximation de la "réalité" à deux voies ?