

Méthodes Quasi-classiques en Mécanique Quantique

(predoctorat de physique)

V. Kazakov (LPTENS)

9 cours de 2h + 7 TD de 1h

14h-17h, 28/4, mardis 30/4, 5/5, 12/5, 19/5, 26/5, 2/6, 9/6/2009

Plan des cours (approximatif)

- 1. La fonction d'onde dans le régime WKB [Wentzel-Kramers-Brilluin].
- 2. La quantification de Bohr-Sommerfeld.
- 3. Amplitudes de diffusion à travers une barrière de potentielle et les éléments de matrice quasiclassiques.
- 4. Mouvement quasiclassique dans le champ avec la symétrie centrale.
- 5. Probabilités de transition et les perturbations adiabatiques dans le régime quasiclassique (si le temps permet...).
- 6. La théorie de diffusion des particules: généralités.
- 7. La théorie de diffusion des particules: le cas quasiclassique.
- 8. Intégrale fonctionnelle de Feynman

Cours 1: La fonction d'onde dans le régime WKB

- L'importance de la limite quasiclassique: la mécanique classique est un cas limite de la mécanique quantique
- Analogie avec l'approximation d'eukonal dans l'optique, grandes fréquence et la longueur d'onde:

$$\Delta E + \omega^2(x) E = 0, \quad E = a(x) \exp[i\varphi(x)]$$

où la phase $\varphi(x)$ est grande.

- Principe de Fermat de l'optique géométrique: minimum de la phase totale $\varphi(x_{\text{fin}}) - \varphi(x_{\text{init}})$ du chemin de rayon
- Les particules classiques – les paquets d'ondes compactes
- Quantités physiques à la limite classique: action d'opérateurs se réduit à la multiplication

Conditions d'application de WKB

- La fonction d'onde $\Psi(x,t)$ est liée à la fonction $\Psi(p,t)$ par la transformation de Fourier. Ainsi la relation d'incertitude $\Delta x \Delta p \gtrsim \hbar = 1.054 \cdot 10^{-27}$ erg · sec (2cm²g/sec)
- Conditions de (quasi)-classicisme: $\Delta x \ll |x|$, $\Delta p \ll |p|$
- Les électrons dans les atomes: $\Delta x \sim 10^{-8}$ cm, $m = 9.1 \cdot 10^{-28}$ g
- Vitesse (quasi)-classique:

$$v = p/m \gg \Delta p/m \sim \hbar/(m\Delta x) \sim 10^8 \text{ cm/sec}$$

- L'idée d'approximation quasiclassique: \hbar est considéré comme petit (par rapport aux paramètres du problème avec la même dimension)

Calcul de fonction d'onde de WKB

- L'équation de Schrödinger:
$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + (E - U) \psi = 0$$

- La substitution $\psi = a(x) e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} = e^{\frac{i}{\hbar} \sigma}$ donne

$$\frac{1}{2m} (\nabla \sigma)^2 - \frac{i\hbar}{2m} \Delta \sigma = (E - U)$$

- Développement quasi-classique de la phase:

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \sigma_2 + \dots$$

- Dans le cas unidimensionnel l'éq. de Schrödinger:

$$\frac{1}{2m} \sigma'^2 - \frac{i\hbar}{2m} \sigma'' = (E - U)$$

- Pour la première approximation, $\hbar=0$,

$$\frac{1}{2m}(\sigma'_0)^2 = (E - U)$$

où

$$\sigma = \pm \int \sqrt{2m[E - U(x)]} dx$$

- l'impulsion classique $p = \sqrt{2m[E - U(x)]}$

conformément à l'action $S = -Et \pm \int p dx$

- Équations de Hamilton (principe de Maupertuis):
- $$dS = -H dt + \sum_k \int p_k dx_k$$

$S \rightarrow \min$ comme pour l'approximation d'euconal!

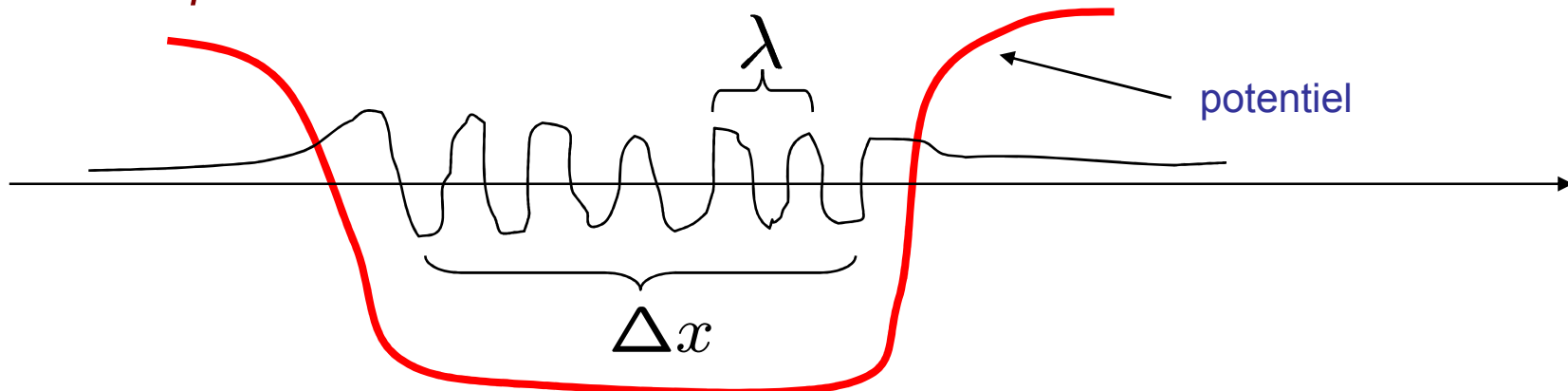
Conditions de validité

- L'omission du deuxième terme n'est légitime que pour

$$\hbar |\sigma'' / \sigma'^2| \ll 1, \quad \text{ou} \quad \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{\sigma'} \right) \right| \ll 1,$$
$$\text{ou} \quad \left| \frac{d}{dx} \lambda \right| \ll 1,$$

$\lambda(x) = 2\pi\hbar/p(x)$ est la longueur d'onde broglie.

- *Ainsi donc, la condition de quasi-classicisme (valide dans un certain domaine d'espace): la longueur d'onde de particule doit varier peu sur les distances similaires à elle même.*



- Autre forme de cette condition: comme

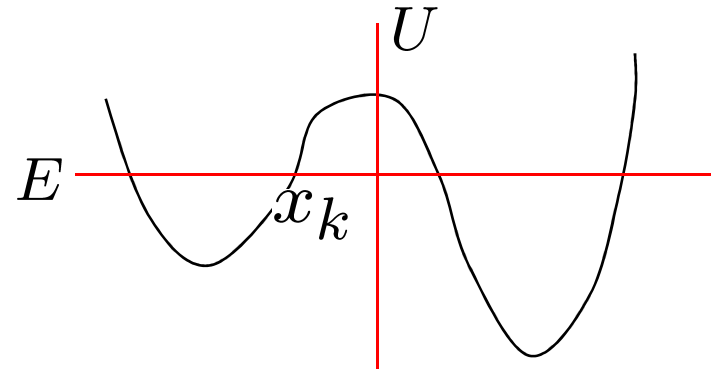
$$\frac{dp}{dx} = \frac{d}{dx} \sqrt{2m[E - U(x)]} = -\frac{m}{p} \frac{dU}{dx} = \frac{mF}{p}$$

où $F = -\frac{dU}{dx}$ est la force classique, il vient:

$$\frac{m\hbar|F|}{p^3} \ll 1$$

- Si p est trop petit l'approximation échoue.
Par exemple, au voisinage des points de rebroussement:

$$p(x_k) = 0, \quad E = U(x_k)$$



- Pour les termes du première ordre en \hbar

$$\sigma'_0 \sigma'_1 + \sigma''_0 / 2 = 0$$

ou

$$\sigma_1 = -\frac{\sigma''_0}{2\sigma'_0} = -\frac{p'}{2p}$$

Intégrant, on trouve

$$\sigma_1 = -\frac{1}{2} \ln p$$

Substituant les expressions déduites dans $\Psi = e^{\frac{i\sigma}{\hbar}}$
on obtient la fonction d'onde quasi-classique sous la forme:

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int p dx\right)$$

- Dans les domaines classiquement inaccessibles $E < U(x)$

$p(x)$ devient imaginaire:

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int |p| dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int |p| dx\right)$$

- Ce sont des termes exponentiellement petits, négligeable dans notre approximation, ou exponentiellement grands, qui doivent s'annuler selon les conditions au bord.
- La probabilité (et le temps passé à l'intervalle Δx) est inversement proportionnelle à la vitesse

$$|\psi|^2 \sim \frac{1}{|p|}$$

- A l'ordre d'approximation \hbar^2

$$\sigma'_0 \sigma'_2 + (\sigma'_1)^2 / 2 + \sigma''_1 / 2 = 0$$

ou

$$\sigma'_2 = \frac{p''}{4p^2} - \frac{3p'^2}{8p^3}$$

En introduisant la force $F = p'p/m$ Il vient

$$\sigma_2 = \frac{mF}{4p^3} + \frac{m^2}{8} \int \frac{F^2}{p^5} dx$$

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma_0 + \sigma_1} (1 - i\hbar\sigma_2)$$

ou

$$\psi = \frac{const}{\sqrt{p}} \left[1 - \frac{im\hbar F}{4 p^3} - \frac{im^2\hbar}{8} \int \frac{F^2}{p^5} dx \right] e^{\frac{i}{\hbar} \int p dx}$$

En effet, il faut ajouter les termes imaginaires à la phase, d'ordre \hbar .

- Le 2nd et le 3eme termes doivent être $\ll 1$. Pour le 1ere, cela coincide avec la condition déduite, tandis que pour le 2eme

$$\frac{m^2 \hbar F^2 L}{p^5} \ll 1$$

L'intégrand (donc la force) doit s'annuler suffisamment vite aux distances $\sim L$.

Problemes

- Reproduire le troisième et le quatrième ordres de WKB pour la fonction d'onde (sur Mathematica). Étudier le comportement de chaque ordre près du point de rebroussement.
Avancé: Que-ce qui se passe près d'un maximum du potentiel?

- Définir les niveaux d'oscillateur harmonique en étudiant les propriétés analytiques de l'impulsion (utiliser l'eq. de Riccati)
Trouver l'eq. pour x_k et vérifier que c'est les zéros des polynômes d'Hermite

$$\psi_n(x) = \prod_{k=1}^n (x - x_k) e^{i\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$p_n(x) \equiv -i\hbar \frac{\psi'_n(x)}{\psi_n(x)} = \sum_{k=1}^n \frac{-i}{x - x_k} + \omega x$$

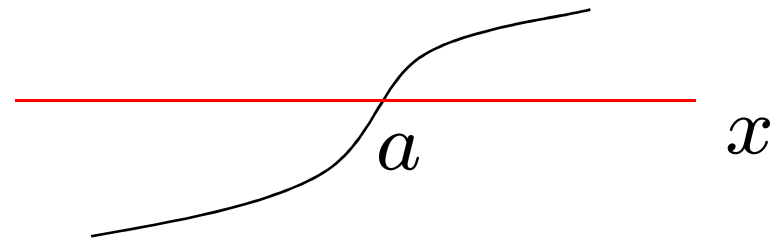
- Avancé:** Comprendre la limite WKB comme l'accumulation des pôles en coupure.

Cours II: Conditions au limites

- Soit $x = a$

un point de rebroussement

$$U(a) = E.$$



- A droite, $x > a$, est la région classiquement inaccessible.

La fonction d'onde doit s'amortir en s'enfonçant dans cette région:

$$\psi = \frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int |p| dx\right), \quad x > a$$

- A gauche du point de rebroussement, on a la combinaison:

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int p dx\right), \quad x < a$$

Pour déterminer les coefficients il faut s'approcher du point de rebroussement, où l'approximation quasiclassique ne joue plus. Près de ce point:

$$-E + U(x) \simeq F_0(x - a), \text{ où } F_0 = -\frac{dU}{dx}|_{x=a} < 0$$

Alors pour définir les coefficients on peut utiliser le résultat exacte pour le mouvement dans le potentiel linéaire.

Dans ce cas
$$\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p| dx = \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mF_0} (x - a)^{3/2}$$

Important: le domaine quasiclassique $|x - a|^{3/2} \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2mF_0}}$

et le domaine où le développement est valable $|x - a| \ll L$

empiètent l'un sur l'autre, ils sont compatibles pour

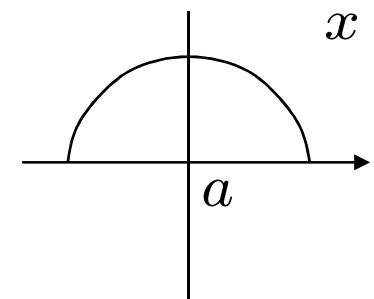
$$L^{3/2} \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2mF_0}}$$

- On peut considérer formellement Ψ comme une fonction de variable complexe x . On passe de droite à gauche du point de rebroussement par un chemin situé loin de ce point dans le plan complexe, pour que le quasi-classicisme soit vrai, mais assez proche pour que l'approximation linéaire marche encore. La fonction d'onde s'écrit ainsi:

$$\psi = \frac{C}{(2m|F_0|)^{1/4}} \frac{1}{(x-a)^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3\hbar}(2m|F_0|)^{1/2}(x-a)^{3/2}\right)$$

- Suivons la variation de cette fonction lorsqu'on décrit une demi-circonférence (de rayon ρ) dans le demi-plan supérieure: $x - a = \rho e^{i\phi}$

$$\int \sqrt{x-a} dx = \frac{2\rho^{3/2}}{3} \left(\cos \frac{3\phi}{2} + i \sin \frac{3\phi}{2} \right), \quad 0 < \phi < \pi.$$



A la fin du passage l'exponentielle devient imaginaire, et la phase vaut

$$-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx$$

Dans le facteur préexponentiel, on a à l'issue de contournement:

$$(x - a)^{-1/4} \rightarrow (a - x)^{-1/4} e^{-i\pi/4}$$

En comparant avec Ψ dans le domaine classiquement accessible on obtient:

$$C_2 = \frac{1}{2} C e^{-i\pi/4}$$

Analogiquement, si l'on fait le contournement par la demi-circonférence inférieure, on obtiens:

$$C_1 = \frac{1}{2} C e^{i\pi/4}$$

Ainsi donc la fonction d'onde pour la région à gauche est

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx + \frac{\pi}{4}\right), \quad x < a$$

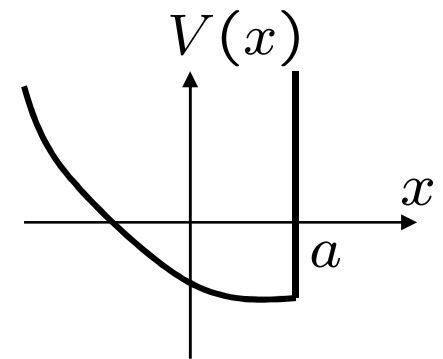
- Sous une forme indépendante du côté où se trouve le domaine inaccessible, la règle de correspondance est

$$\frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p dx \right| \right) \rightarrow \frac{C}{\sqrt{|p|}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p dx \right| - \frac{\pi}{4}\right)$$

- Ce raisonnement correspond à la condition au bord où la fonction $\psi \rightarrow 0$, quand on s'enfonce dans la région classiquement inaccessible. Si cette région est limitée par une barrière de potentielle infiniment élevée, la condition à la limite $x=a$ est $\psi=0$. L'approximation quasiclassique donne dans ce cas:

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx\right), \quad \text{pour } x < a$$

$$\psi = 0, \quad \text{pour } x > a.$$



Règle de Quantisation de Bohr-Sommerfeld

- Les états d'énergie avec de grands numéraux d'ordre n (nombre de noeuds de la fonction propre) sont quasiclassiques.
- La distance entre les noeuds est de l'ordre de longueur broglienne, qui doit être petite par rapport à L - la taille du domaine.
- Nous allons déduire les énergies des états propres dans le cas quasiclassique.

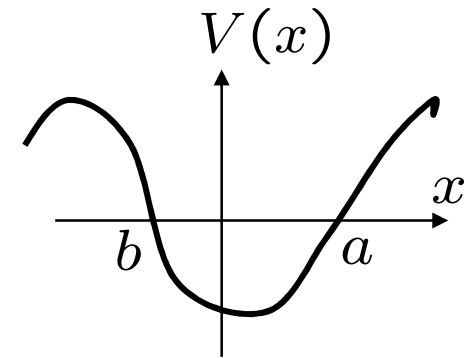
- Dans le domaine classiquement accessible $b \leq x \leq a$:

Condition à la limite $x = b$ conduit à la fonction d'onde

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p dx - \frac{\pi}{4}\right),$$

et condition à la limite $x = a$ donne

$$\psi = \frac{C'}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a p dx - \frac{\pi}{4}\right)$$



- Pour qu'elles s'identifient il faut que $C = (-1)^n C'$,
et la somme de leurs phases doit être un multiple de π :

$$\frac{1}{\hbar} \int_b^a p dx - \frac{\pi}{2} = n\pi$$

d'où vient la règle de quantisation de Bohr-Sommerfeld:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint p dx = n + \frac{1}{2}$$

L'intégrale $\oint p dx = 2 \int_b^a p dx$ est prise sur la période complète du mouvement classique:

$$T = 2 \int_b^a \frac{dx}{v} = 2m \int_b^a \frac{dx}{p}.$$

n est l'ordre de l'état stationnaire égal au nombre des noeuds (la phase de ψ croit de $-\pi/4$ à $(n + 1/4)\pi$ quand x va de b à a).

ψ s'amortit d'une manière monotone sans zéros en dehors de cette intervalle.

- Les correction à la règle de Bohr-Sommerfeld sont d'ordre (*problème intéressant*)

$$\lambda/L \ll 1.$$

- Parfois la règle BS est exacte (oscillateur, atome d'hydrogène).

- Calcul de normalisation: on remplace \cos^2 par son moyen $\frac{1}{2}$ et néglige la contribution en dehors de (a,b):

$$\int |\psi|^2 dx \simeq \frac{C^2}{2} \int_b^a \frac{dx}{p} = \frac{\pi C^2}{2m\omega} = 1$$

$\omega = 2\pi/T$ est la fréquence du mouvement périodique classique.

La fonction d'onde normalisée:

$$\psi = \sqrt{\frac{2\omega m}{\pi p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p dx - \frac{\pi}{4}\right),$$

- **Interprétation de la règle BS:** $\oint p dx$ est l'aire embrassée par la trajectoire classique fermée de la particule dans l'espace de phase (p,x).

$\oint p dx / (2\pi\hbar) = n$ s'interprète comme le nombre de cellules d'aire $2\pi\hbar$ chacune correspondante à un état quantique:

$$\frac{\Delta p \Delta x}{2\pi\hbar} = \frac{\Delta k \Delta x}{2\pi}, \text{ où } k = p/\hbar \quad (\text{vecteur d'onde})$$

- correspond avec le nombre d'oscillations propres de champ d'onde.

- La distance d'énergie caractéristique entre deux niveaux voisins est $\Delta E \ll E$. Alors,

$$\delta_E \oint p dx = \Delta E \oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = \Delta E \oint \frac{dx}{v} = \Delta E T = 2\pi\hbar$$

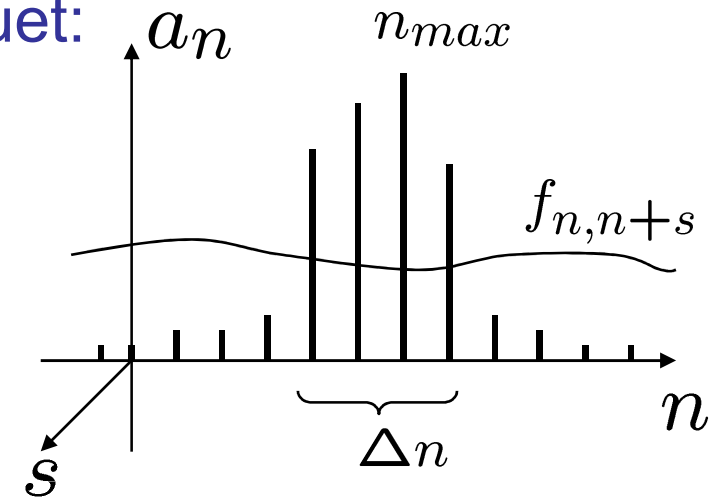
$$\text{ou } \Delta E = 2\pi\hbar/T = \hbar\omega$$

- La conclusion: pour les niveaux voisins à l'intervalle des n beaucoup plus petit que n , la distance $\hbar\omega$ est identique.

- Que-ce devient la valeur moyenne d'une quantité physique f dans un état-paquet d'ondes proche à un mouvement classique de la particule? Soit un paquet:

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n$$

a_n sont notablement non nuls dans une intervalle $1 \ll \Delta n \ll n_{max}$.



On obtient

$$\begin{aligned} \bar{f} &= \int \Psi^* \hat{f} \Psi dx = \sum_n \sum_m a_m^* a_n f_{mn} e^{i\omega_{mn}t} = \\ &= \sum_n \sum_s a_{n+s}^* a_n f_{n+s,n} e^{i\omega_{s,n}t} \end{aligned}$$

où $f_{mn} = \int \Psi_m^* \hat{f} \Psi_n dx$

On a remplacé $\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} \simeq s\omega, \quad s = m - n.$

f - une fonction lente de $\bar{n} = (m + n)/2$

mais elle décroît très vite avec la croissance de S car les fonctions d'onde propres oscillent très vite.

Alors,

$$\bar{f} = \sum_n \sum_s a_n^* a_n f_s e^{i\omega s t}, \text{ où } f_s = f_{\bar{n}+s, \bar{n}}.$$

$$\sum_n |a_n|^2 = 1, \text{ par conséquent, } \bar{f}(t) = \sum_s f_s e^{i\omega s t}$$

est une série de Fourier ordinaire. Puisque \bar{f} se réduit à la limite classique à sa valeur classique on est conduit à ce résultat que les éléments matriciels se réduisent à la limite à des composantes f_{m-n} de développement de Fourier de la fonction classique $f(t)$.

- Pour le spectre continu ils deviennent les composantes de l'intégrale de Fourier, car les fonctions d'onde se normalisent dans ce cas à $\delta(E - E')/\hbar$.

- Cela se généralise pour les systèmes de plusieurs degrés de liberté si le mouvement est quasi-périodique (admet une séparation des variables dans la méthode de Hamilton-Jacobi). Le résultat se reproduit pour chaque degré de liberté:

$$\oint p_i dx_i = 2\pi\hbar(n_i + \gamma_i)$$

- Par exemple, pour le champ central symétrique:

$$\oint p_r dr = 2\pi\hbar(n_r + 1/2)$$

$$\oint p_\theta d\theta = 2\pi\hbar(l - m + 1/2)$$

$$\oint p_\phi d\phi = 2\pi\hbar m,$$

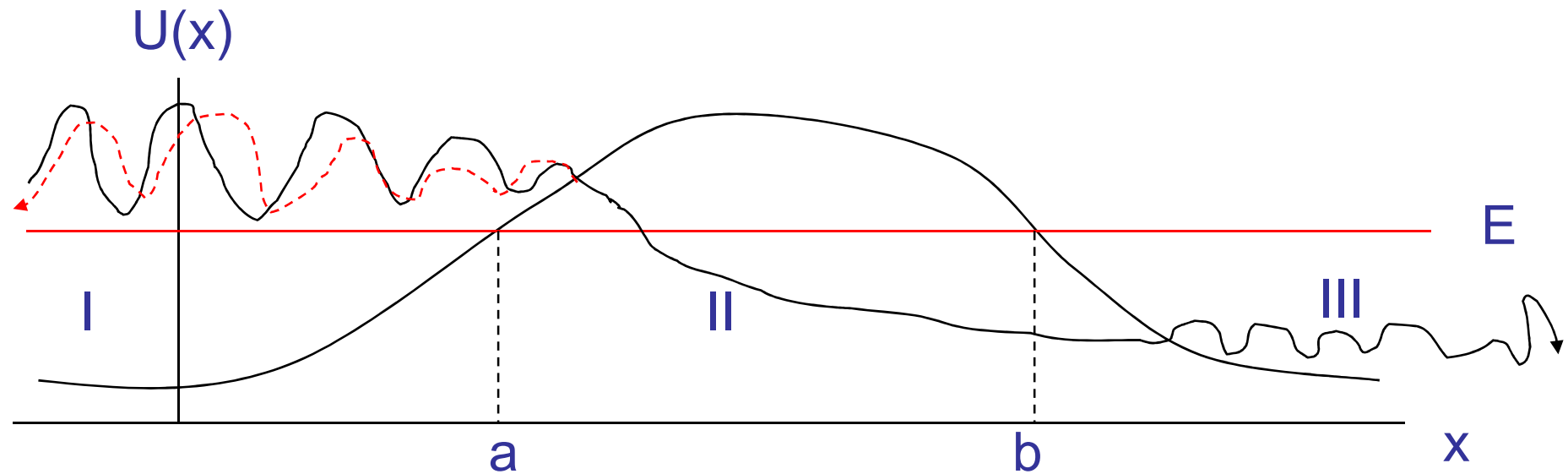
$n_r = n - l - 1$ est le nombre radial (principal);
 p_ϕ est la composante sur l'axe des z
 du moment, de valeur $\hbar m$.

- Même pour le mouvement non-quasipériodique la notion de «cellules» dans l'espace des phases subsiste toujours (dans l'approximation quasiclassique). Dans le système à s degrés de liberté, le nombre des états quantiques dans un élément de volume de l'espace des phases ce donne par:

$$\Delta N = \frac{\Delta q_1 \Delta p_1 \cdots \Delta q_s \Delta p_s}{(2\pi\hbar)^s}$$

- *Problème*: Trouver le spectre et les fonctions d'onde d'états propres d'oscillateur harmonique dans l'approximation quasiclassique.
- *Problème (avancé)*: trouver la correction $\sim\hbar^{-1}$ à la formule de Bohr-Sommerfeld.

Cours III: Passage à travers la barrière potentiel



- La probabilité de l'effet tunnel dans la MQ est non-zéro, mais dans l'approximation WKB elle est exponentiellement petite, $\sim \exp[-C/\hbar]$.
- Si le champ $U(x)$ satisfait les critères de WKB (barrière large et lisse) on peut calculer le coefficient de transmission dans la forme générale.

- Trouvons les règles de transitions entre les fonctions d'onde des domaines III et II. A droite de $x=b$:

$$\psi_{III} = \frac{C}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p dx + \frac{i\pi}{4}\right), \quad x > b$$

Pour trouver la fonction à gauche de $x=b$, regardons $x \rightarrow b$:

$$E - U(x) \simeq F_0(x - b), \quad \text{où } F_0 > 0.$$

$$\psi = \frac{C}{(2m|F_0|)^{1/4}} \frac{1}{(x - b)^{1/4}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int (2m|F_0|)^{1/2} (x - b)^{1/2} dx + \frac{i\pi}{4}\right)$$

et faisons le passage dans le plan complexe le long du demi-cercle supérieur:

$$x - b = \rho e^{i\phi}, \quad i \int_b^x \sqrt{x - b} dx = \frac{2\rho^{3/2}}{3} \left(-\sin \frac{3\phi}{2} + i \cos \frac{3\phi}{2}\right), \quad 0 < \phi < \pi.$$

Nous trouvons la règle de correspondance suivante (III \rightarrow II):

$$\frac{C}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p dx + \frac{i\pi}{4}\right) \rightarrow \frac{C}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_b^x p dx \right|\right)$$

- Calculons le coefficient de transition. La particule tombe de l'infinie du domaine I, la fonction d'onde dans le domaine III est une onde courant à $x=\infty$:

$$\psi_{III} = \sqrt{\frac{D}{v}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p dx + \frac{i\pi}{4}\right), \quad x > b$$

où $v = p/m$ est la vitesse de la particule,

$$D = \frac{1}{2m} \psi^* \hat{p} \psi + c.c. \text{ est la densité du courant dans l'onde.}$$

La règle de transition de III à II donne:

$$\begin{aligned} \psi_{II} &= \sqrt{\frac{D}{|v|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_x^b p dx \right| \right) = \\ &= \sqrt{\frac{D}{|v|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^b p dx \right| - \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p dx \right| \right), \quad x < b \end{aligned}$$

Le passage entre II et I a été déjà calculée. En l'appliquant à notre fonction d'onde on a

$$\psi_I = 2\sqrt{\frac{D}{|v|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^b p dx \right|\right) \cos\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_x^a p dx \right| - \frac{\pi}{4}\right), \quad x < a$$

Si on y met $D = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \left| \int_a^b p dx \right|\right)$

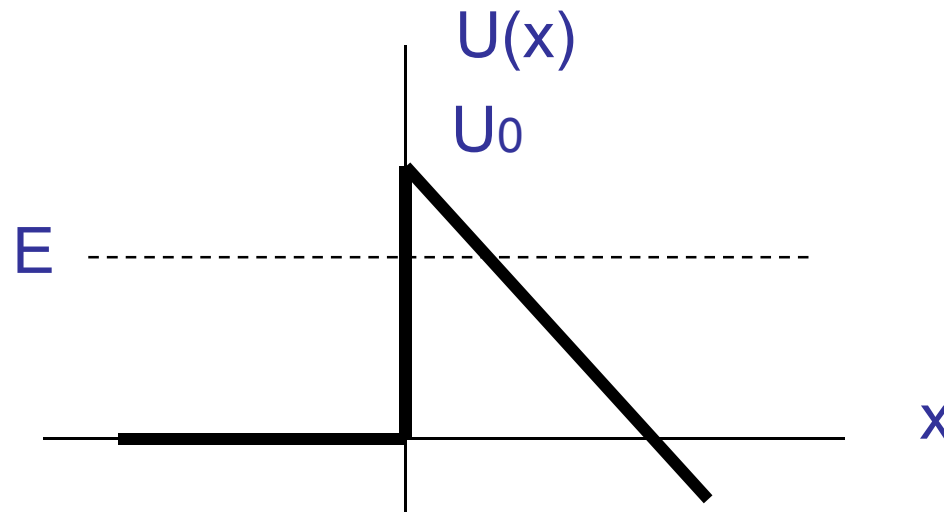
la fonction d'onde devient

$$\begin{aligned} \psi_I &= 2\sqrt{\frac{1}{|v|}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p dx \right| + \frac{\pi}{4}\right) = \\ &= \sqrt{\frac{1}{|v|}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left| \int_a^x p dx \right| + \frac{i\pi}{4}\right) + \sqrt{\frac{1}{|v|}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left| \int_a^x p dx \right| - \frac{i\pi}{4}\right), \end{aligned}$$

1ere et 2eme termes décrivant l'onde d'impacte et de transition, avec les courants normalises à 1 (la précision exponentielle).

Alors, D est le coefficient de transmission sous la barrière.

- **Problème:** Définir la partie exponentielle du coefficient de transition dans le potentiel



- **Problème (avancé):** fixer le pre-exponentiel.

• Solution: $D \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \left| \int_a^b p dx \right| \right)$

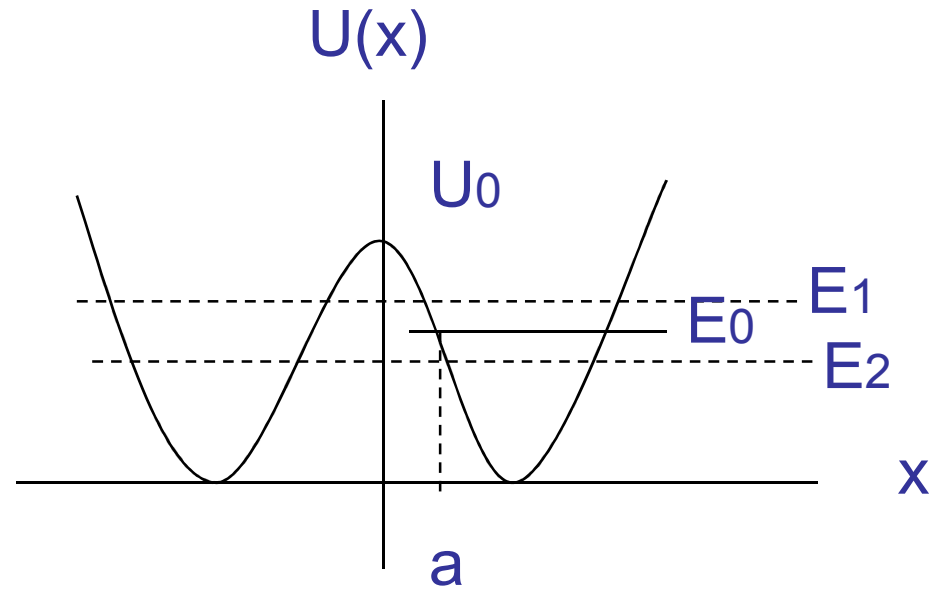
$$p(x) = \sqrt{2m(E - U_0 + Fx)}$$

$$U(x) = U_0 - Fx, \quad x > 0$$

$$\int_0^{(U_0 - E)/F} dx p(x) = \frac{2\sqrt{2m}}{3F} (U_0 - E)^{3/2}$$

$$D \sim \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar F} (U_0 - E)^{3/2}\right)$$

- **Problème:** Définir le décalage des niveaux pairs et impairs dans le potentiel quasiclassique à double puit.



• Solution:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x) + \psi_0(-x)], \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x) - \psi_0(-x)]$$

$$\psi_0'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - U) \psi_0 = 0, \quad \psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - U) \psi_1 = 0$$

$$\psi_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_0(0), \quad \psi_1'(0) = 0$$

$$\int_0^\infty \psi_0 \psi_1 \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^\infty \psi_0^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

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

$$\psi_0(x) = \sqrt{\omega/2\pi|v|} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p| dx\right), \quad -a < x < a.$$

(extra $\frac{1}{2}$ pour le double puit)

$$\psi_0(0) = \sqrt{\omega/2\pi v_0} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^a |p| dx\right), \quad \psi'_0(0) = \frac{mv_0}{\hbar} \psi_0(0)$$

$$|v_0| = \sqrt{2(U_0 - E)/m} = |p_0|/m.$$

Pareil pour E2.

$$E_2 - E_1 = \frac{\omega \hbar}{\pi} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a |p| dx\right)$$

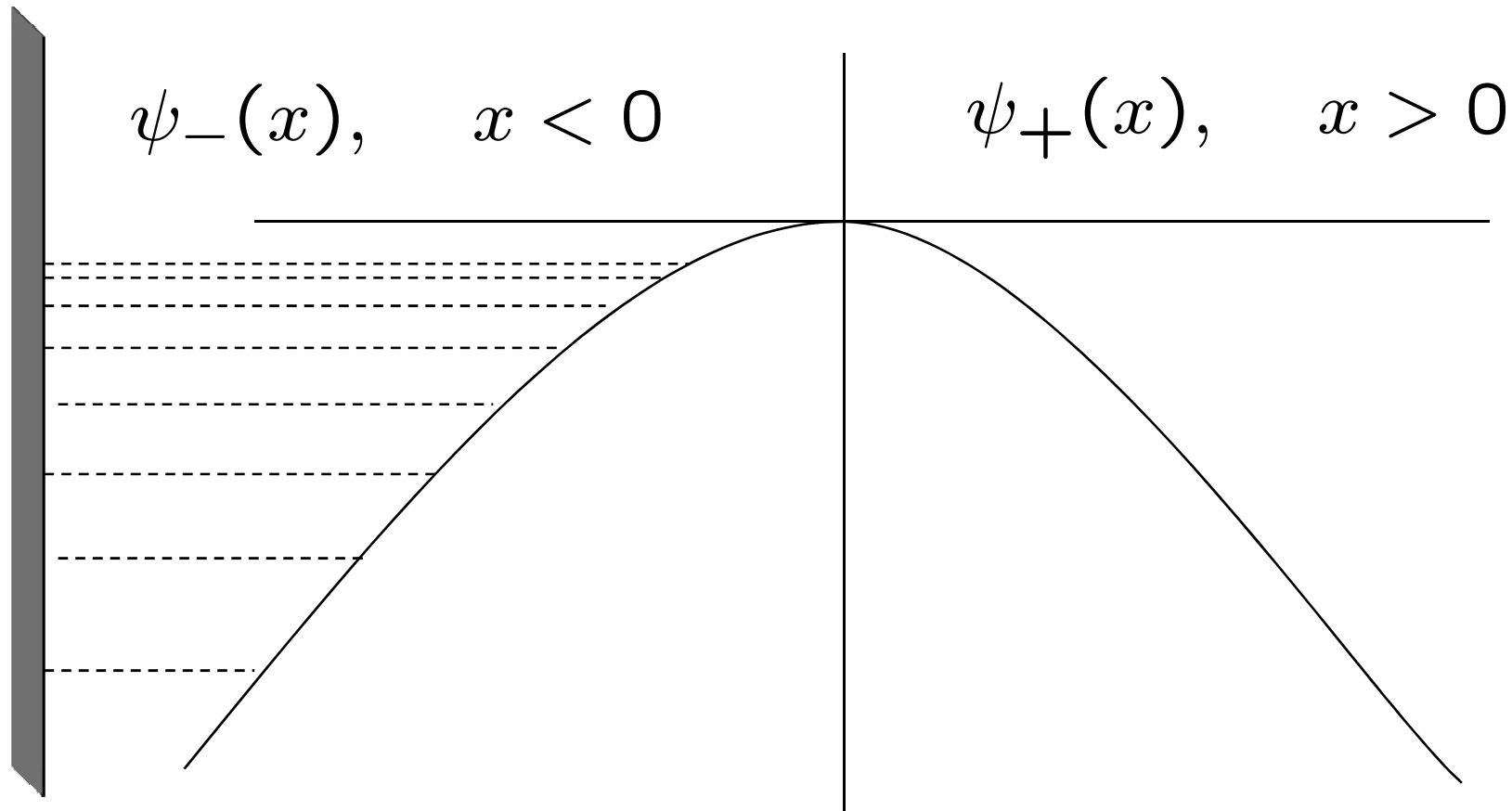
• $U(x) = -\frac{1}{2}kx^2$:

$$\frac{\pi}{\omega} = \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{\sqrt{2E/k}}^{\Lambda} \frac{dx}{\sqrt{\frac{k}{2}x^2 - |E|}} \simeq \sqrt{\frac{m}{2}} \log \left(\Lambda \sqrt{\frac{k}{2E}} \right)$$

$$\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{-\sqrt{2E/k}}^{\sqrt{2E/k}} dx \sqrt{|E| - \frac{k}{2}x^2} = \frac{2\pi|E|\sqrt{m}}{\hbar\sqrt{k}}$$

$$E_2 - E_1 \simeq \sqrt{\frac{2\hbar^2}{m}} \frac{1}{\log \left(\Lambda \sqrt{\frac{k}{2E}} \right)} e^{-\frac{2\pi|E|\sqrt{m}}{\hbar\sqrt{k}}}$$

- *Problème:* Définir la fonction d'onde, D et le spectre d'énergies (*avancé!*) dans le potentiel inverse quadratique $U(x) = -\frac{1}{2} k x^2$ (avec un mur verticale à $|x|=|\Lambda| \gg 1$).



- *Solution:* Pour toutes énergies $|E| \sim 1$
le mouvement est quasiclassique si $|x| \gg 1$:

$$p = \sqrt{2m\left(E + \frac{1}{2}kx^2\right)} \simeq x\sqrt{mk} + E\sqrt{m/k} \frac{1}{x}$$

Période: $T = 2m \int_{-\Lambda}^{\sqrt{2|E|/k}} \frac{dx}{p(x)} \sim \sqrt{m/k} \log \left(\frac{1}{\Lambda} \sqrt{\frac{|E|}{k}} \right)$

La plupart du temps la particule est loin des bornes, donc quasiclassique. Solution asymptotique de l'eq. Schrödinger:

$$\sigma = \pm i\xi^2/2 + (\pm i\epsilon - 1/2) \log \xi + i\Phi(\epsilon) + O(1/\xi)$$

où $\xi = x \left(\frac{mk}{\hbar^2} \right)^{1/4}$, $\epsilon = \frac{E}{\hbar} \sqrt{m/k}$,

- La fonction d'onde:

$$\psi_+ \simeq B \xi^{i\epsilon-1/2} e^{i\xi^2}, \quad x \rightarrow \infty,$$

$$\psi_- \simeq (-\xi)^{-1/2} e^{-i\xi^2 - i\epsilon \log(-\xi)}$$

$$+ A (-\xi)^{-1/2} e^{i\xi^2 + i\epsilon \log(-\xi)}, \quad x \rightarrow -\infty.$$

- Passage de $x > 0$ à $x < 0$ par une grande circonférence

$$\xi = \rho e^{i\phi}, \quad i\xi^2 = \rho^2 (\sin 2\phi + i \cos 2\phi) \quad (0 < \phi < \pi).$$

induit une relation entre les normalisations:

$$B = A (e^{i\pi})^{-1/2 + i\epsilon}$$

$$A(\epsilon) = |A(\epsilon)| e^{i\Phi(\epsilon)} \quad (\text{coeff. de réflexion avec la phase}).$$

- Courant zéro: $|A|^2 + |B|^2 = 1$

- Coeff. de transition: $D = |B|^2 = \frac{1}{1 + e^{-2\pi\epsilon}}$.

- Coeff. de réflexion: $R = |A|^2 = \frac{1}{1 + e^{2\pi\epsilon}}$.

- Notons qu'il est valable pour les deux signes d'énergie: i.e. pour la réflexion au-dessous et au-dessus de la barrière.

- On connaît la partie réelle du coefficient de réflexion:

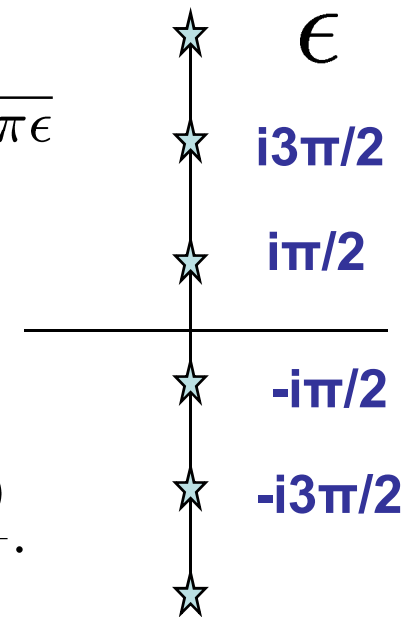
$$\log |A(\epsilon)| = \frac{1}{2} \log (2 \cosh(\pi\epsilon)) - \frac{\pi}{2}\epsilon \sim e^{-\pi\epsilon}, \quad \epsilon \rightarrow \infty_+$$

Pour restaurer la partie imaginaire (la phase), utilisons:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2} + i\epsilon\right)\Gamma\left(\frac{1}{2} - i\epsilon\right) = \left|\Gamma\left(\frac{1}{2} + i\epsilon\right)\right|^2 = \frac{\pi}{\cosh \pi\epsilon}$$

Alors, $\log A(\epsilon) \equiv \log |A(\epsilon)| + i\Phi(\epsilon) =$
 $= -\log \Gamma\left(\frac{1}{2} + i\epsilon\right) - \frac{\pi\epsilon}{2} + \frac{1}{2} \log 2\pi$

et la phase de réflexion est $\Phi(\epsilon) = \frac{i}{2} \log \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + i\epsilon\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - i\epsilon\right)}$.



Densité du spectre

- A la normalisation près, on peut écrire la fonction d'onde stationnaire (à des effets exponentiellement petits près) comme

$$\psi_\epsilon(\xi) \approx \frac{C}{\sqrt{\xi}} \sin\left(\frac{1}{2}\xi^2 + \epsilon \log \xi + \frac{\Phi(\epsilon)}{2} + \Phi_0\right) [1 + O(1/\xi)]$$

- La condition de Bohr-Sommerfeld fixe

$$\Phi_0 + \frac{1}{2}\Phi(\epsilon) + \epsilon \log \Lambda + \frac{\Lambda^2}{4} = \pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad \frac{mk}{\hbar^2} = 1$$

- La densité d'états dans le potentiel quadratique inverse:

$$\begin{aligned} \rho(\epsilon) &= \frac{\partial n}{\partial \epsilon} = \frac{1}{\pi} \left[\frac{1}{2} \frac{\partial \Phi(\epsilon)}{\partial \epsilon} + \log \Lambda \right] = \\ &= \frac{1}{2\pi} \Re \psi\left(\frac{1}{2} + i\epsilon\right) + \frac{1}{\pi} \log \Lambda \\ &= \left[\Re \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{i\epsilon - n - 1/2} \right]_{reg} = \frac{1}{4\pi} \Re \int_{1/\Lambda}^{\infty} dt \frac{e^{-i\epsilon t}}{\sinh \frac{\pi t}{2}} \end{aligned}$$

où $\psi(x) = \partial_x \log \Gamma(x)$ est la fonction di-gamma d'Euler.

Cours IV: Mouvement Quasi Classique dans un Champ Central Symétrique

- Il s'agit d'analyse de l'équation de Schrödinger:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(r)]\psi = 0$$

- Dans les coordonnées radiales:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\tilde{l}^2}{r^2} \psi \right] + U(r)\psi = E\psi$$

- Séparation de variables:

$$\psi = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) = R(r)P_l(\theta)e^{im\phi}$$

- Regardons le cas de nombre quantique magnétique nul $m=0$.

P_l sont les polynômes de Legendre, satisfaisants

$$\frac{\partial^2 P_l}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial P_l}{\partial \theta} + l(l+1)P_l = 0$$

- Par la substitution $P_l(\theta) = \chi(\theta) / \sqrt{\sin \theta}$

elle se ramène à

$$\chi'' + \left[(l + 1/2)^2 + \frac{1}{4 \sin^2 \theta} \right] \chi = 0$$

- Le domaine d'application naturel pour la méthode de WKB correspond aux grands moments orbitaux l .

- *L'asymptotique QC de la fonction d'onde sphérique:*

La quantité $\lambda/(2\pi) = [(l + 1/2)^2 + \frac{1}{4 \sin^2 \theta}]^{-1/2}$

joue le rôle de "longueur d'onde broglienne". L'exigence que $d\lambda/d\theta$ soit petite conduit aux inégalités:

$$\theta l \gg 1, \quad (\pi - \theta)l \gg 1$$

Quasiclassicisme est non valable au pôles $\theta = 0, \pi$.

Ainsi on peut omettre le dernier terme dans l'éq. Scrodinger:

$$\chi'' + (l + 1/2)^2 \chi = 0$$

La solution: $\chi = A \sin[(l + 1/2)\theta + \alpha]$

Le cas $\theta \ll 1$: approximativement $\cot \theta \sim 1/\theta$,

$$\frac{\partial^2 P_l}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\theta} \frac{\partial P_l}{\partial \theta} + (l + 1/2)^2 P_l = 0$$

La solution est la fonction de Bessel d'ordre zéro:

$$P_l(\cos \theta) \simeq J_0[(l + 1/2)\theta], \quad \theta \ll 1$$

$$P_l(0) = 1.$$

Compatible avec
asymptotique pour $1/l \ll \theta \ll 1$

En particulier, pour $\theta l \gg 1$

$$P_l(\cos \theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi l \theta}} \sin[(l + 1/2)\theta + \frac{\pi}{4}],$$

ce qui colle bien avec la fonction en dehors de cet intervalle. Alors,

$$A = \sqrt{2/(\pi l)}, \quad \alpha = \pi/4.$$

- Finalement, la fonction sphérique normalisée dans le cas quasiclassique:

$$P_l(\cos \theta) = Y_{l0}(\cos \theta) \simeq i^l \pi \sqrt{\frac{1}{\sin \theta}} \sin[(l+1/2)\theta + \frac{\pi}{4}],$$
$$1/l \ll \theta$$

- Notons que le remplacement $l(l+1) \rightarrow (l+1/2)^2$

fait que la parité de Y est conserve:

$$P_l(\pi - \theta) = (-1)^l P_l(\theta)$$

- *L'asymptotique QC de la fonction d'onde radiale*

$\kappa = rR(r)$ est la fonction d'onde satisfaisant l'eq. Schrödinger ordinaire, avec l'énergie potentielle modifiée:

$$\kappa'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U_l(r)] \kappa = 0$$

avec un potentiel modifié: $U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2}$

$$l = 0 : \quad \kappa(r = 0) = 0 \quad (\text{le mur infini à } r = 0)$$

et la fonction se détermine conformément à la règle standard

$$\kappa = \sqrt{\frac{2\omega}{\pi v}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_b^r p_r dr \right)$$

avec b comme le point de rebroussement.

- *Conditions de quasiclassicime* (supposant que $U(x)$ les satisfait)

$l \neq 0$: la condition de QC pour la longueur d'onde doit être vérifiée aussi pour l'énergie centrifuge:

$r \sim 1$: l'énergie centrifuge a la même grandeur que l'énergie totale. Alors $\lambda = \hbar/p \sim r/l \implies \partial_r \lambda \sim 1/l \ll 1$ et la condition de QC est $l \gg 1$.

Pour $r \ll 1$ la condition de QC est violée par l'énergie centrifuge. On se convaincrait aisément qu'on a exactement la phase QC de $\kappa(r)$ ayant remplacé

$$U_l(r) : \quad l(l+1) \rightarrow (l+1/2)^2$$

- *Problème*: montrer que pour $U = 0$:

$$R_l \simeq \frac{2}{r} \sin \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r - \pi l/2 \right)$$

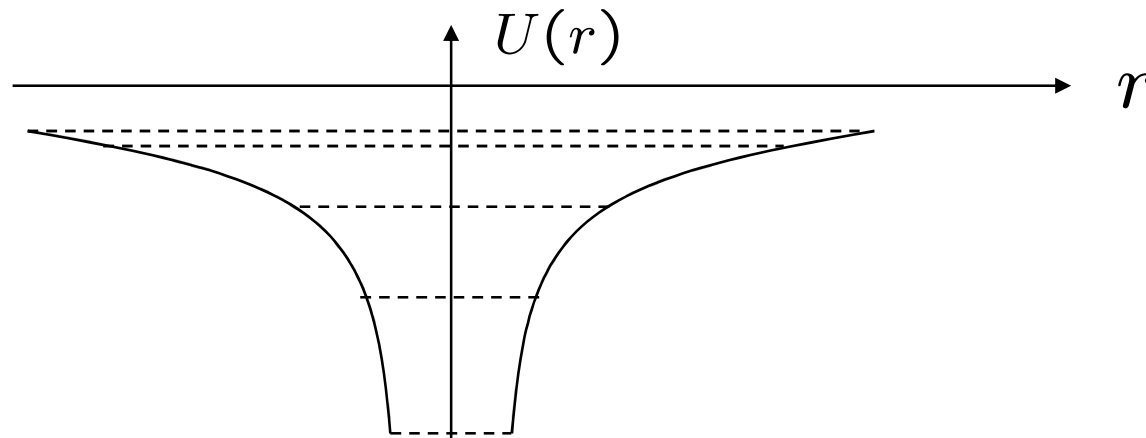
- *Le cas coulombien:* $U = \pm\alpha/r :$

La région la plus importante est celle de $|U| \sim |E|$,
à savoir, $r \sim \alpha/|E|$.

- La condition de QC $\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m|E|}} \ll L = r$

ou $|E| \ll m\alpha^2/\hbar^2$

c'est à dire que le module d'énergie doit être bien plus petite que l'énergie de la première orbite de Bohr, ou $\alpha/\hbar \gg v$ (ce qui est inverse de la condition d'application de la théorie de perturbation).



- Les petites distances $|U| \gg |E|$:

et pour le champ répulsif le QC n'est pas intéressant:
la fonction d'onde est exponentiellement petite.

- Pour le champ attractif utilisons la condition de QC

$$m\hbar|F|/p^3 \ll 1$$

avec $F = -\partial_r U = -\alpha/r^2$, $p \sim \sqrt{m\alpha/r}$

On trouve la région d'application de QC:

$$r \gg \frac{\hbar^2}{m\alpha} \sim 10^{-8} \text{ cm}$$

c'est-à-dire à distances grandes par rapport au "rayon" de la première orbite de Bohr.

Atome d'hydrogène $U(r) = -e^2/r$

$$U_l(r) \rightarrow U_{\text{WKB}} = U(r) + \frac{\hbar^2 (l + 1/2)^2}{2m r^2}$$

Spectre QC:

$$\int_{r_1}^{r_2} dr \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(-|E| + e^2/r - \frac{\hbar^2 (l + 1/2)^2}{2m r^2} \right)} = (n_r + 1/2)\pi,$$

$$k \int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{r} \sqrt{(r - r_1)(r_2 - r)} = (n_r + 1/2)\pi,$$

Notations: $r_{1,2} = \frac{1}{k^2 a} \left(1 \mp \sqrt{1 - (\lambda k a)^2} \right).$

$$k^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}, \quad a = \frac{\hbar^2}{m e^2}, \quad \lambda = l + 1/2$$

Par résidus:

$$\frac{\pi}{2}k(r_1 + r_2 - 2\sqrt{r_1 r_2}) = (n_r + 1/2)\pi$$

Après un simple algèbre on obtient le résultat exacte!

$$ka = \frac{1}{n_r + 1/2 + \lambda}$$

$$E = -\frac{me^2}{2\hbar^2} \frac{1}{(n_r + l + 1)^2}$$

- Degénéressance $n = n_r + l + 1$.

- **Problème:** Trouver approximativement le nombre de niveaux discrets dans le potentiel quasiclassique $U(r)$ avec la symétrie radiale.
- **Solution:** Le nombre des niveaux avec le moment orbital M coïncide avec celui dans le potentiel effectif $U_{\text{eff}}=U(r)+M^2/2mr^2$.
En intégrant ce nombre dans la couche d'espace de phase $(r,r+dr)$ et $(p,p+dp)$ on obtient pour M fixe

$$\int \int_0^{p_{\text{max}}} \frac{dr dp_r}{2\pi\hbar} = \frac{\sqrt{2m}}{2\pi\hbar} \int dr \sqrt{-U(r) - \frac{M^2}{2mr^2}}$$

$$p_{\text{max}} = \sqrt{-2mU_{\text{eff}}}$$

Intégrant sur $dM/\hbar=dl$, on obtient le nombre de niveaux

$$-\frac{\sqrt{2m}}{4\hbar^2} \int U(r)r dr$$

Cours VI: Collisions élastiques: Théorie générale de la diffusion

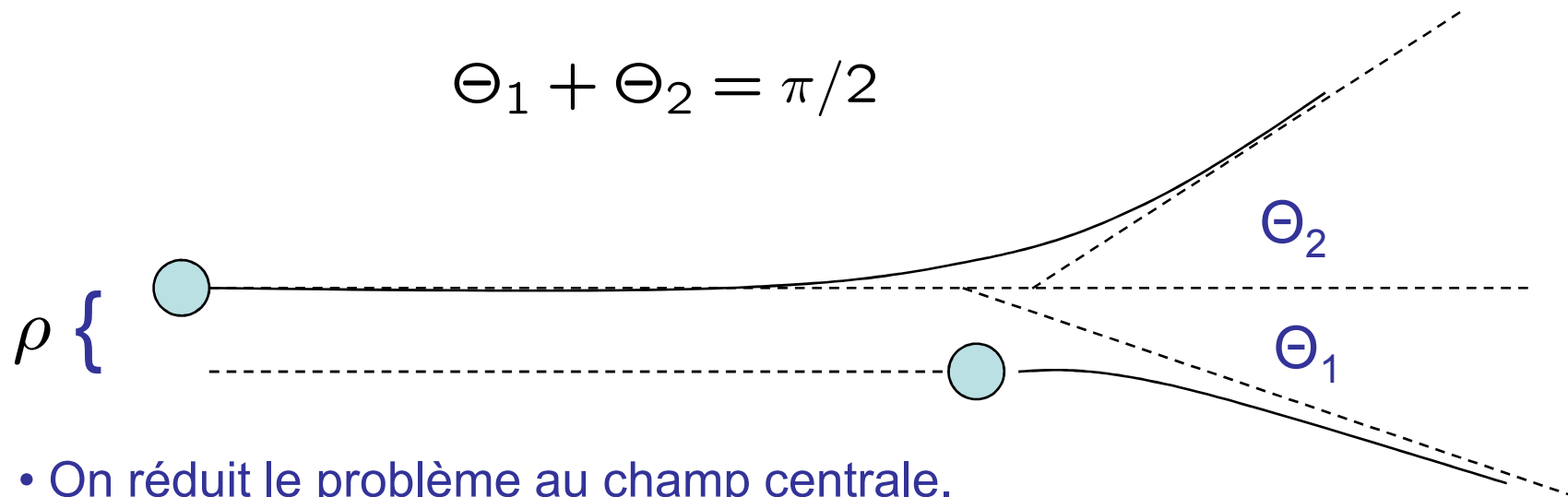
- Collisions élastiques: sans transmutations des particules ou sans changement de leur état interne.
 - Théorie générale de la diffusion
 - Étude de la formule générale
 - Condition d'unitarité de la diffusion
- En mécanique classique la collision de 2 particules est déterminée par la vitesse et le paramètre d'impact ρ .
- En mécanique quantique, pour les vitesses déterminées le paramètre d'impact perd son sens. On calcule la probabilité de déviation de tel ou tel angle.

- Le système de centre d'inertie: diffusion avec une masse réduite m dans le champ $U(r)$. θ - l'angle de diffusion dans le système de centre de masse CM. Pourvue que Θ_1 et Θ_2 sont les angles de déviation dans le système laboratoire, où la particule 2 est au repos avant la collision (conservation de l'énergie et de l'impulsion), on a

$$\tan \Theta_1 = \frac{m_2 \sin \theta}{m_1 + m_2 \cos \theta}, \quad \Theta_2 = \frac{\pi - \theta}{2}$$

Pour $m_1 = m_2$ on a $\Theta_1 = \frac{\theta}{2}, \quad \Theta_2 = \frac{\pi - \theta}{2}:$

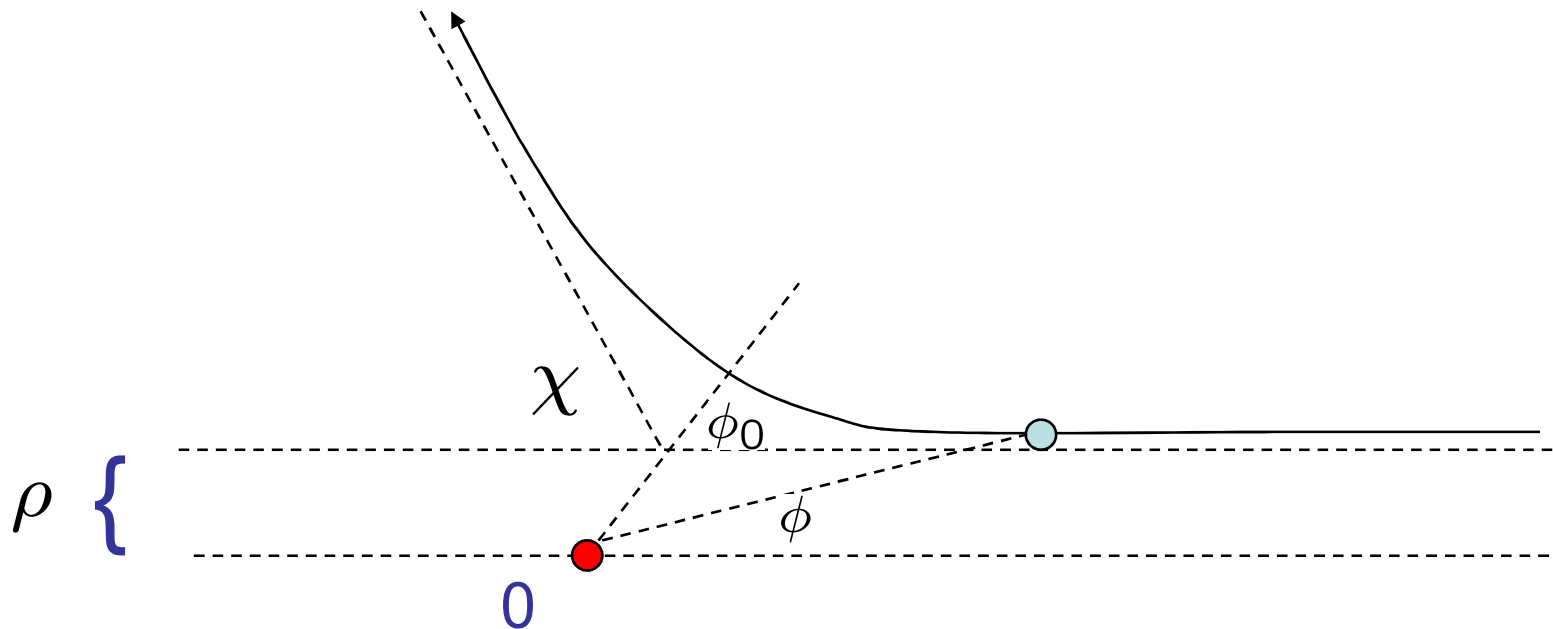
$$\Theta_1 + \Theta_2 = \pi/2$$



- On réduit le problème au champ centrale.

Rappel des formules classiques

- Pour une particule classique diffusée sur un champ central symétrique $U(r)$ la trajectoire est symétrique par rapport à la droite qui connecte le centre avec le point le plus proche de la trajectoire. Soit χ l'angle de déviation et φ_0 l'angle entre cette droite et la droite d'asymptotique de la trajectoire. Ils sont liés: $\chi = |\pi - 2\varphi_0|$.



- Énergie de particule dans les coordonnées radiales:

$$E = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) + U(r) = \frac{m\dot{r}^2}{2} + \frac{M^2}{2mr^2} + U(r) = \text{const}$$

Moment angulaire: $M = mr^2\dot{\phi} = \text{const}, \quad d\phi = \frac{M}{mr^2}dt.$

- L'angle est défini par l'intégrale:

$$\phi_0 = \int_{r_{min}}^{\infty} dr \frac{M/r^2}{\sqrt{2m[E - U(r)] - M^2/r^2}}$$

$$\chi = |\pi - 2\phi_0| = \left| \pi - 2 \int_{r_{min}}^{\infty} dr \frac{\rho/r^2}{\sqrt{1 - 2U(r)/(mv_{\infty}^2) - \rho^2/r^2}} \right|$$

ρ - paramètre d'impact, v_{∞} - vitesse à l'infini:

$$E = mv_{\infty}^2/2, \quad M = mv_{\infty}\rho$$

- Section de diffusion d'un faisceau homogène: $d\sigma = dN/n$
 où dN - le nombre de particules passantes entre les angles θ et $\theta + d\theta$, n - la densité de courant des particules. Alors:

$$dN = 2\pi n \rho d\rho$$

et la section efficace ne dépend pas des détails du faisceau:

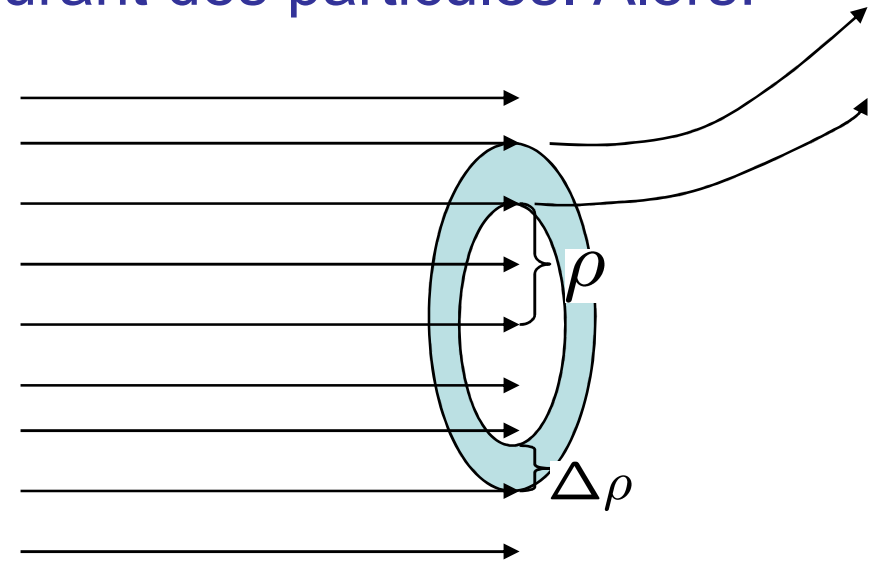
$$d\sigma = 2\pi \rho d\rho$$

- La dépendance de l'angle:

$$d\sigma = 2\pi \rho(\theta) \left| \frac{\partial \rho(\theta)}{\partial \theta} \right| d\theta$$

- Pour l'élément d'angle solide $d\omega = 2\pi \sin \theta d\theta$

$$d\sigma = \frac{\rho(\theta)}{\sin \theta} \left| \frac{\partial \rho(\theta)}{\partial \theta} \right| d\omega$$



Cas quantique: Section efficace

- La particule incidente: l'onde plane le long de l'axe z , dont la densité de courant vaut la vitesse v : $\psi \simeq e^{ikz}$
- La particule diffusée: l'onde sphérique divergente

$\frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}$, où $f(\theta)$ est l'amplitude de diffusion.

- La fonction d'onde exacte: $\psi \simeq e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}$

- La probabilité de traverser dans l'unité de temps la surface $dS = r^2 d\Omega$ est égale $v r^{-2} |f|^2 dS = v |f|^2 d\Omega$

Son quotient par la densité de courant dans l'onde incidente s'appelle **section efficace** (dim. d'aire): $d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega$

ou
$$d\sigma = 2\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta$$

Calcul de la section efficace

- La solution a la symétrie axiale autour de l'axe z. Elle se caractérise par l'énergie de particule $\hbar^2 k^2/(2m)$ et se donne par une superposition des ondes sphériques avec des diverses valeurs du moment angulaire l

$$\psi = \sum_{l=1}^{\infty} A_l P_l(\cos\theta) R_{kl}(r)$$

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

Asymptotique des fonctions radiales:

$$\begin{aligned} R_{kl} &\simeq \frac{2}{r} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) = \\ &= \frac{1}{ir} \left((-i)^l \exp[i(kr + \delta_l)] - i^l \exp[-i(kr + \delta_l)] \right) \end{aligned}$$

δ_l - déphasages.

Amplitude

- Montrons que l'asymptotique des grands r impose

$$A_l = \frac{1}{2k}(2l + 1)i^l \exp(i\delta_l)$$

- La substitution donne

$$\psi \simeq \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)P_l(\cos \theta)[(-1)^{l+1}e^{-ikr} + S_l e^{ikr}]$$

$$\text{où } S_l = e^{2i\delta_l}.$$

- La décomposition de l'onde plane:

$$e^{ikz} \simeq \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)P_l(\cos \theta)[(-1)^{l+1}e^{-ikr} + e^{ikr}]$$

- Leur comparaison avec l'asymptotique des grands r donne l'amplitude de diffusion f en fonction des phases

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)[S_l - 1]P_l(\cos \theta)$$

Section totale

- Section totale, ou le rapport de probabilité totale de diffusion dans tous les angles $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ dans l'unité de temps à la densité de courant dans l'onde incidente:

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta$$

- En utilisant l'orthogonalité des polynômes de Legendre

$$\int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \delta_{ll'} \frac{2}{2l+1}$$

on obtient
$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

- Chacun des termes ici s'appelle une section partielle σ_l pour la diffusion du moment orbital l .

- Les amplitudes partielles: $f_l = \frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_l} - 1)$

$$f(\theta) = \sum_l (2l + 1) f_l P_l(\cos \theta)$$

- Les sections partielles: $\sigma_l = 4\pi(2l + 1)|f_l|^2$.

- Il suit de la définitions de l'amplitude partielle que

$$\text{Im } f_l = k|f_l|^2$$

- *Théorème optique:*

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

Où on a utilisé $P_l(1) = 1$

Propriétés de la section totale

- Valeur maximale: $\sigma_l^{max} = \frac{4\pi}{k^2}(2l + 1)$
- Le cas classique: $\sigma_l \simeq 2\pi\rho\Delta\rho = 2\pi\rho_l(\rho_{l+1} - \rho_l)$

$$l \rightarrow \infty, \quad M = \hbar l = \rho p = \rho k \hbar \Rightarrow \rho = l/k.$$

Donc
$$\sigma_l^{cl} = \frac{\pi}{k^2} 2l = \frac{1}{4} \sigma_l^{max}$$

- Le nombre des particules diffusées peut être 4 fois supérieur de ce nombre dans le flux incident (l'effet d'interférence quantique)!

Étude de la formule générale

- Dans le régime quasi classique, pour $U(r)$ s'évanouissant à l'infini, les phases sont définies par la différence des phases de la fonction d'onde des particules diffusées et de la fonction d'onde libre:

$$\delta_l = \lim_{r \rightarrow \infty} \int_{r_0}^r dr \left[\sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} - \frac{2mU(r)}{\hbar^2}} - \sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}} \right] - \pi/4 + \pi/4,$$

r_0 étant la racine de l'expression sous le radical.

l grands correspondent aux grands r_0

$$\delta_l = - \int_{r_0}^r \frac{mU(r)dr}{\hbar^2 \sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}}}$$

- Pour $U(r) \sim r^{-n}$, $n > 1$

l'intégrale converge, l'ordre de grandeur étant

$$\delta_l \sim \frac{mU(r_0)r_0}{k\hbar^2} \quad r_0 \sim l/k$$

$n > 1$: δ_l est finie.

$n \leq 1$: δ_l est infinie pour tous les l

- Convergence de somme sur l pour $\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$

$$l \gg 1, n > 1 : \delta \ll 1 \Rightarrow \sin^2 \delta_l \simeq \delta_l^2$$

et la somme des termes éloignés dans la phase

$$\sum_{l \gg 1} l \delta_l^2 \sim \int^{\infty} dl l \delta_l^2 \sim \int^{\infty} U^2(r_0) r_0^3 dr_0$$

$$l \sim kr_0$$

- Alors, pour $n < 2$ la section totale est infinie. Ceci est dû à la grande probabilité de diffusion sur les petits angles.

- Dans la mécanique classique, la section $\int 2\pi\rho d\rho$ est toujours infinie car pour n'importe quel paramètre d'impact ρ arbitrairement grand mais fini la particule n'en dévie pas moins d'un certain angle, petit mais non nul.

- Dans la mécanique quantique, ρ est connu à $\Delta\rho$ près; l'incertitude d'impulsion transverse est $\hbar/\Delta\rho$, qui se traduit dans l'incertitude sur l'angle: $\hbar/(mv\Delta\rho)$

La diffusion sur les petits angles

- De l'expression générale pour f on estime que à $\theta = 0$

$$f(0) \sim \sum_{l \gg 1} l \delta_l \sim \int^{\infty} U(r_0) r_0^2 dr_0$$

diverge déjà pour $n < 3$.

- Le cas de $\delta_l = \infty$, lorsque $n < 1$. Notons que:

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) P_l(\cos \theta) = 4\delta(1 - \cos \theta) \sim \delta(\theta)$$

On peut le soustraire de $f(\theta)$

et le multiplier par un facteur constant inessential $\exp(-2i\delta_0)$

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) P_l(\cos \theta) e^{2i(\delta_l - \delta_0)}$$

où l'intégral définissante $\delta_l - \delta_0$ est déjà finie.

Cours VII: Cas quasi classique

- Passage à la limite quasi classique dans la formule principale pour l'amplitude (à l'exception de $\theta=0$):

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

$\delta_l \rightarrow \infty$, $l \rightarrow \infty$, alors on remplace:

$$P_l(\cos \theta) \simeq \frac{i \left(\exp[i(l+1/2)\theta + i\pi/4] - \exp[-i(l+1/2)\theta - i\pi/4] \right)}{\sqrt{2\pi l \sin \theta}}$$

qui donne:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_l \frac{\sqrt{l} \left(\exp i[2\delta_l - (l+1/2)\theta - \pi/4] - \exp i[2\delta_l + (l+1/2)\theta + \pi/4] \right)}{\sqrt{2\pi \sin \theta}}$$

- Les points de la phase stationnaire: $2 \frac{\partial \delta_l}{\partial l} \pm \theta = 0$

- Les phases quasi classiques (la différence entre la phase de la fonction d'onde diffusée est la phase libre $kr - \pi l/2$) :

$$\delta_l = \int_{r_0}^{\infty} dr \left[\frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U) - \frac{(l + 1/2)^2}{r^2}} - k \right] + \pi/2(l + 1/2) - kr_0$$

- L'équation de la phase stationnaire se réécrit comme

$$\int_{r_0}^{\infty} \frac{dr \rho}{r^2 \sqrt{1 - U/E - \frac{\rho^2}{r^2}}} = \frac{\pi \mp \theta}{2}$$

où on a mis à la limite classique $\hbar l \simeq m\rho v$

On prend (-) pour le champ répulsif et (+) pour le champ attractif.

- On voit que l'angle de diffusion quasi classiques coïncident précisément avec les valeurs classiques.

Montrons que la formule quasi-classique coïncide avec la formule classique (pour le cas répulsif, par exemple).

En vertu de l'eq. du col

$$\left. \frac{\partial^2 \delta_l}{\partial l^2} \right|_{l=l_0} = \frac{1}{2} \frac{\partial \theta}{\partial l_0}$$

on a:

$$2\delta_l - (l + 1/2)\theta - \frac{\pi}{4} \simeq 2\delta_{l_0} - (l_0 + 1/2)\theta - \frac{\pi}{4} + \frac{1}{2} \frac{\partial \theta}{\partial l_0} [l - l_0(\theta)]^2$$

L'intégration gaussienne (après avoir tourné le contour par $\pm\pi/4$) donne le résultat final:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \left(\frac{l_0}{\sin \theta} \left| \frac{\partial l_0}{\partial \theta} \right| \right)^{1/2} \exp i \left[\delta_{l_0} - (l_0 + 1/2)\theta - \frac{\pi}{4} \right]$$

$$\text{d'ou: } d\sigma = 2\pi |f|^2 \sin \theta d\theta = 2\pi \frac{l_0}{k^2} \left| \frac{\partial l_0}{\partial \theta} \right| d\theta$$

Introduisant le paramètre d'impact $\rho = l_0/k$

on obtient le résultat classique $d\sigma = 2\pi \rho d\rho$

La condition de classicisme

δ_l, l doivent être grands. Pour qu'on puisse parler de θ, ρ

bien définis les incertitudes doivent être: $\Delta\rho \ll \rho, \quad \Delta\theta \ll \theta$

$\Delta\theta \sim \Delta p/p$ - l'incertitude dans l'angle,
 $p, \Delta p$ - l'impulsion et son incertitude dans la direction traverse.

Ensuite $\Delta p \sim \hbar/\Delta\rho \gg \hbar/\rho,$ alors $\Delta\theta \gg \hbar/(p\rho)$

Et, forcément, $\theta \gg \hbar/(\rho m v)$

En vertu de $\hbar l \simeq m\rho v$ on obtiens $\theta l \gg 1$

ce qui coïncide avec $\delta_l \gg 1$

(la conséquence de condition de la phase stationnaire).

- Pour la "durée de collision" $\tau \sim \rho/v$

l'impulsion transverse augmente jusqu'à Δp

La force

$$F = -\partial U / \partial \rho, \quad \Delta p \sim F \rho / v \Rightarrow \theta \sim \rho F / m v^2$$

Cela donne: $F \rho^2 \gg \hbar v$ pour tout les ρ

satisfaisants $|U(\rho)| < E$.

- Si $U(r) \sim r^{-n}$, $n > 1$,

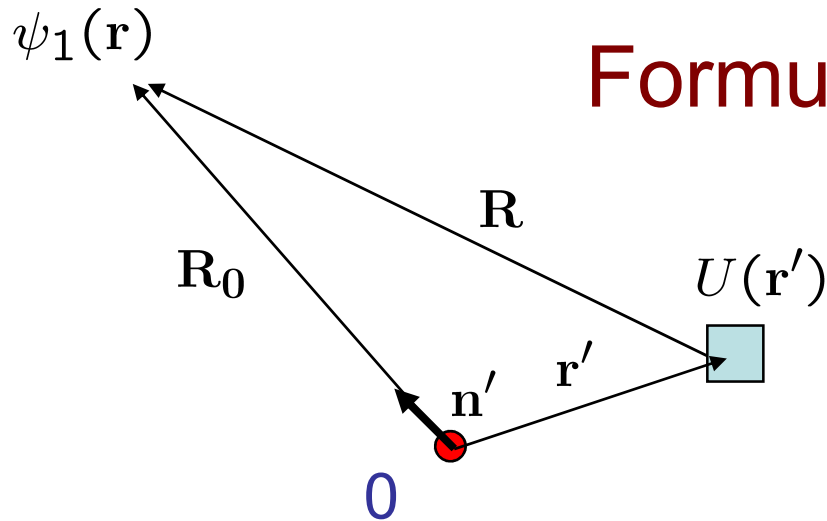
la dernière conditions ne sera pas satisfait pour ρ suffisamment grands (ou θ petits). Pour $n < 1$ la diffusion sur les petits θ sera classique, tandis que pour les grands θ ça dépend de l'allure du champ sur les petites distances.

- Pour le champ coulombien $U=\alpha/r$ la condition du quasi-classicisme sera $\alpha \gg \hbar v$, inverse de la critère de la théorie des perturbations. Mais pour des raisons fortuites la section de diffusion coïncide avec le résultat classiques pour tous les angles (la formule de Rutherford):

$$d\sigma = \frac{do}{4k^4 \sin^4(\theta/2)}$$

- *Problème*: reproduire la formule de Rutherford par la méthode exacte et la méthode quasiclassique.

Formule de Born



$$(\Delta + k^2)\psi_1(\mathbf{x}) = \frac{2mU(\mathbf{x})}{\hbar^2}\psi_0(\mathbf{x})$$

$$\psi_1(\mathbf{x}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{d\mathbf{x}' e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} U(\mathbf{x}') \psi_0(\mathbf{x}')$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_0 - \mathbf{r}', \quad R = |\mathbf{R}_0 - \mathbf{r}'| \simeq R_0 - r'n'$$

$$\mathbf{k}' = k\mathbf{n}'$$

Onde reflechis:

$$\psi_1(\mathbf{R}_0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}' + kR)}}{R} U(\mathbf{r}') \simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikR_0}}{R_0} \int d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}')$$

Comparant à $\psi \simeq e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikR_0}}{R_0}$

on obtient: $f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}')$

ou $d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \right|^2 d\Omega, \quad |\mathbf{k}' - \mathbf{k}| = 2k \sin(\theta/2)$

Cours VIII: L'intégrale de Feynman sur les chemins

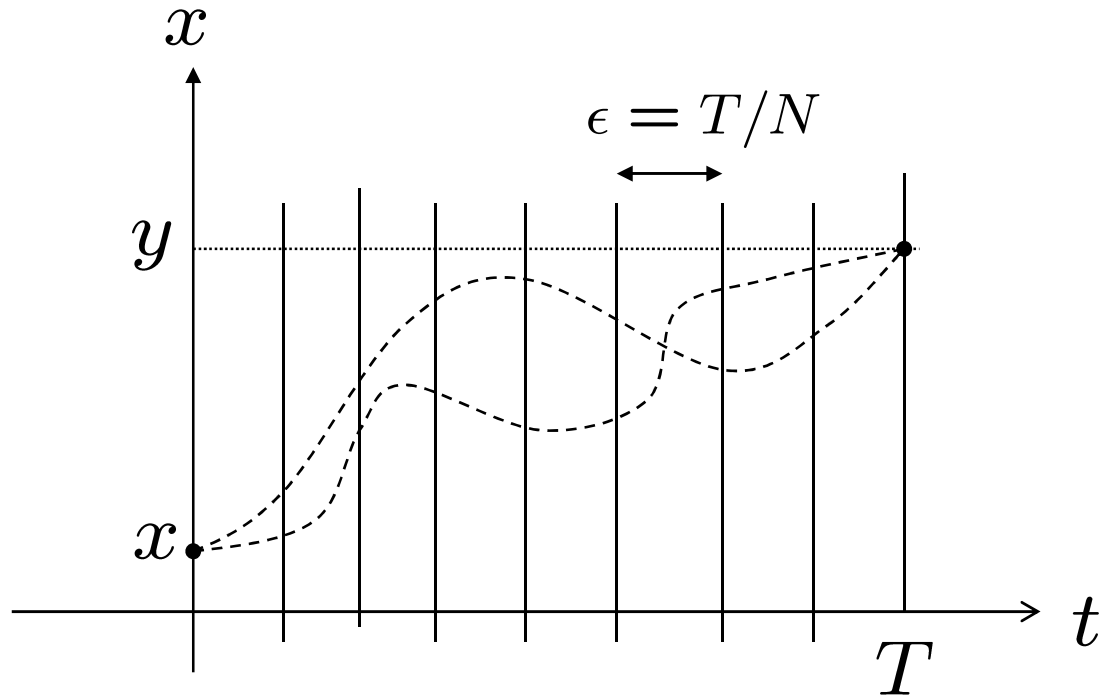
- L'intégrale sur les chemins (IC) dans la MQ calcule l'amplitude de probabilité de propagation de particule du point x au point y au moment $t = 0$ au point y au moment $t = T$:

$$\psi(y, T) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(e^{-\frac{i}{\hbar} T \hat{H}} \right)_{yx} \psi(x, 0)$$

where

$$i\hbar\partial_t\psi - \hat{H}\psi = 0, \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x), \quad \hat{p} = -i\hbar\partial$$

$$K_T(y, x) = \left(e^{-\frac{i}{\hbar} T \hat{H}} \right)_{yx} \quad \text{- amplitude.}$$



- On coupe l'intervalle T sur N petits intervalles $\epsilon = T/N$, $N \rightarrow \infty$.

$$K_T(y, x) = \left(e^{-\frac{i}{\hbar} T \hat{H}} \right)_{y,x} = \left(\left[e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}} \right]^N \right)_{y,x} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}} \right)_{y,x_1} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}} \right)_{x_1,x_2} \cdots \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}} \right)_{x_{N-1},x_N \equiv x}$$

- Avec une précision $O(\epsilon^{3/2})$ dans l'exponentiel:

$$\left(e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}} \right)_{x_j, x_{j+1}} \simeq e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon U(x_j)} \left(e^{-\epsilon \frac{i \hat{p}^2}{\hbar 2m}} \right)_{x_j, x_{j+1}}$$

- *Problème: vérifier que le noyau sans potentiel est*

$$K_\epsilon^{(0)}(x_j, x_{j+1}) = \left(e^{-\epsilon \frac{i \hat{p}^2}{\hbar 2m}} \right)_{x_j, x_{j+1}} =$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{im(x_{j+1} - x_j)^2}{2\hbar \epsilon} \right]$$

- *Approximativement:*

$$x(t_j) = t_j, \quad x(t_{j+1}) = t_{j+1}$$

$$\left(e^{-\epsilon \frac{i \hat{p}^2}{\hbar 2m}} \right)_{x_j, x_{j+1}} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_j}^{t_{j+1}} dt \frac{m \dot{x}^2}{2} + O(\epsilon^2) \right]$$

- Finalement, on obtient l'amplitude comme une multiple intégrale

$$K_T(y, x) = \lim_{N \rightarrow \infty}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int \prod_{j=1}^{N-1} \left[\left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} dx_j \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N-1} \int_{t_j}^{t_{j+1}} dt \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} - U(x) + O(\epsilon) \right) \right]$$

- Par définition, on l'appelle l'intégrale sur les chemins et note

$$K_T(y, x) = \int_{x(0)=x}^{x(T)=y} \mathcal{D}x(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} - U(x) \right) \right]$$

- En générale, pour une action quelconque $S[x(t)]$

$$K_T(y, x) = \int_{x(0)=x}^{x(T)=y} \mathcal{D}x(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[x(t)] \right]$$

- Une formule très générale, quoi que ce soient les coordonnées et le système.

Propriétés de noyau de propagation (« noyau de chaleur »)

$$\begin{aligned} K_T(y, x) &= \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} T \hat{H}} | y \rangle = \sum_k \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} T \hat{H}} | E_k \rangle \langle E_k | y \rangle = \\ &= \sum_k \langle x | E_k \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} T E_k} \langle E_k | y \rangle \end{aligned}$$

ou, en notant $\psi_k(x) = \langle E_k | x \rangle$

$$K_T(y, x) = \sum_k \psi_k^*(y) \psi_k(x) e^{-\frac{i}{\hbar} T E_k}$$

- Satisfait l'équation

$$(i\hbar\partial_t - \hat{H}) K_t(x, y) = 0, \quad K_0(x, y) = \delta(x - y)$$

- Exemple: $K_T(x, y) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{im(x-y)^2}{2\hbar T}\right]$

satisfait l'eq. du mouvement libre $\left(i\partial_t + \frac{\hbar}{2m}\partial_x^2\right) K_t(x, y) = 0.$

- Limite classique $\hbar \rightarrow 0$: calcule de l'intégrale par la méthode du col:

$$\frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t)} = 0 \quad \Rightarrow \quad x(t) = x_{class}(t)$$

$$x_{class}(0) = x, \quad x_{class}(T) = y$$

- Approximation suivante: $x(t) = x_{class}(t) + \xi(t)$, ($\xi(0) = \xi(T) = 0$)

$$S[x(t)] \simeq S[x_{class}(t)] + \frac{1}{2} \int_0^T dt \int_0^T dt' \frac{\delta^2 S[x_{class}(t)]}{\delta x(t) \delta x(t')} \xi(t) \xi(t') + \dots$$

$$\simeq S[x_{class}(t)] + \int_0^T dt \left[\frac{\dot{\xi}^2}{2m} - \frac{1}{2} U''(x_{class}) \xi^2(t) \right] + \dots \quad m = 1$$

$$K_T(y, x) \simeq e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{class}]} \int_{\xi(0)=0}^{\xi(T)=0} \mathcal{D}\xi(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \xi(t) [-\partial_t^2 - U''(x_{class}(t))] \xi(t) \right]$$

$$K_T(y, x) \simeq e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{class}]} \text{Det}^{-1/2} \left[-\partial_t^2 - U''(x_{class}(t)) \right]$$

$$\left[-\partial_t^2 - U''(x_{class}(t)) \right] \phi_n(t) = \lambda_n \phi_n(t)$$

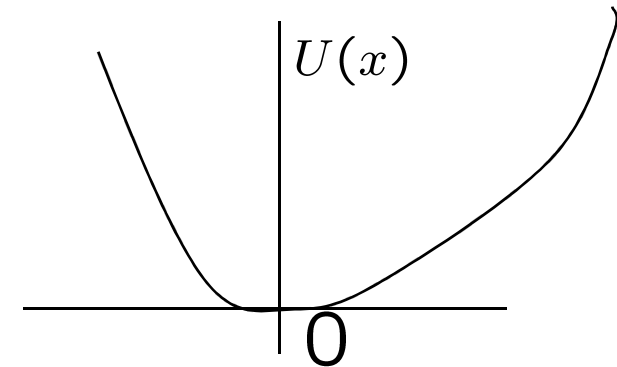
$$\text{Det} \left[-\partial_t^2 - U''(x_{class}(t)) \right] = \prod_n \lambda_n$$

- Calcul QC d'état du vide:

$$x_{class} = 0, \quad U''(x_{class}(t)) = \omega^2$$

(« oscillateur harmonique »)

$$\phi_\lambda(0) = 0, \quad \phi_{\lambda_n}(T) = 0$$



- Théorème:
$$\text{Det} \left[\frac{-\partial_t^2 + W_1(t) - \lambda}{-\partial_t^2 + W_2(t) - \lambda} \right] = \frac{\phi_\lambda^{(1)}(T)}{\phi_\lambda^{(2)}(T)}$$

où $\phi_\lambda^{(1,2)}(t)$ solutions associées avec $W_{1,2}$ $(\phi_\lambda^{(1,2)}(0) = 0)$

- Preuve: l.h.s. et r.h.s. ont les mêmes pôles et zéros: $\phi_{\lambda_n}^{(1,2)}(T) = 0$

- Conséquence:
$$\text{Det} \left[-\partial_t^2 + W(t) \right] = \text{const} \times \phi_0(T)$$

- Pour l'oscillateur: $S = \frac{1}{2} \int_0^T dt (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2)$

$$\psi_0(t) = \frac{2\pi\hbar}{\omega} \sin(\omega t)$$

$$K_T(0,0) \simeq \text{Det}^{-1/2} [-\partial_t^2 - \omega^2] = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} \sim e^{-i\frac{\omega}{2}T} + O(e^{-i\frac{3\omega}{2}T})$$

Donc, du développement à $T \rightarrow -i\infty$

$$E_k = \hbar\omega(k + 1/2)$$

- Pour potentiel quelconque:

$$E_0 = \hbar\omega/2 + O(\hbar^2), \quad \omega^2 = U''(0).$$

Noyau d'oscillateur harmonique

- L'approximation QC est exacte.
- Le pre-exponentiel de noyau est déjà calculé (il ne dépend pas de x, y).
- Il suffit de calculer

$$S[x_{class}(t)], \quad x_{class}(0) = x, \quad x_{class}(T) = y.$$

$$x_{class}(t) = y \frac{\sin \omega t}{\sin \omega T} + x \frac{\sin \omega(T-t)}{\sin \omega T}$$

$$S[x_{class}] = \omega \left(\cot(\omega T)(y^2 + x^2) - \frac{2}{\sin \omega T}xy \right)$$

$$K_T(x, y) = \left(\frac{\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{i\omega}{2\hbar} \left(\cot(\omega T)(y^2 + x^2) - \frac{2}{\sin \omega T}xy \right) \right]$$

Literature

- S. Coleman, « Uses of instantons », 1978 (voir SPIRES, Version scannée (KEK))
- R.Feynman, A.R.Hibbs
« Quantum Mechanics and Path Integrals »
- L.D.Landau, E.M.Lifshits, v.III: « Mécanique Quantique »
- S Flugge, « Practical Quantum Mechanics », v.I,II
- A.B.Migdal, « Méthodes qualitatives dans la mécanique quantique »
- On the Zeros of the Classical Polynomials.
[F. Calogero](#) Lett.Nuovo Cim.19:505-508,1977
- Schiff, Mécanique quantique

Problèmes:

- Corrections a la formule de BS (Stril)(Perdigou)
- Oscillateur et l'équation de Calogero (Lehe)(Vernier, Hobeika)
- Potentiel inverse quadratique: transmission et spectre (Piatecki)(Riello)
- La formule de Rutherford: dérivation quantique (Fruleux)
- L'approximation de Born ()
- Relation de dispersion ()
- Unitarité ()
- Nombre des niveaux dans $U(r)$ (Fruleux)
- Dégénérescence (Guillomot)
- Asymptotique fonction radiale
- Fonction d'Airy (Raoux)
- Double puit (Mlle Michel)